

Titel

Numerische Untersuchung metallischer Photonischer Kristalle

Dissertation

zur Erlangung des Grades
des Doktors der Naturwissenschaften der
Naturwissenschaftlich-Technischen Fakultät III
Chemie, Pharmazie, Bio- und Werkstoffwissenschaften
der Universität des Saarlandes

von

Steffen Conrad

Saarbrücken
Mai 2007

Tag des Kolloquiums: 18.10.07
Dekan: Prof. Dr. U. Müller
Prüfungsausschuss: Prof. Dr. M. Springborg
Prof. Dr. R. Hempelmann
Prof. Dr. C. Huber
Dr. R. Haberkorn

Danksagung

Diese Arbeit wurde unter der Betreuung von Prof. Dr. Michael Springborg und durch die Unterstützung des SFB 277 – Grenzflächenbestimmte Materialien – an der Universität des Saarlandes von 2001 bis 2006 durchgeführt. Mein besonderer Dank gilt dabei:

Prof. Dr. Springborg, für die stets freundliche und hilfreiche Betreuung, für die vielen produktiven Diskussionen und für das sehr positive Arbeitsklima;

dem SFB 277, durch dessen Mittel diese Arbeit erst möglich wurde;

den Korrekturlesern dieser Arbeit, insbesondere Dr. Jan-Ole Joswig.

Inhaltsverzeichnis

Summary/Zusammenfassung	3
1 Einleitung	6
2 Photonische Kristalle	8
2.1 Theorie der photonischen Kristalle	8
2.1.1 Periodizität und Bandstruktur	12
2.1.2 Skaleneigenschaften	13
2.2 Beispiele und Weiterführendes	15
2.3 Konkrete Problemstellung für diese Arbeit	19
2.3.1 Allgemeines	19
2.3.2 Das Problem der Dispersion	21
2.3.3 Das Problem der Absorption	22
2.3.4 Lösungsansatz	22
3 Plane-Wave-Verfahren	24
3.1 Einfaches Plane-Wave-Verfahren	24
3.1.1 Motivation	24
3.1.2 Verfahren	24
3.1.3 Dispersion und ebene-Wellen-Verfahren	26
3.1.4 Absorption	30
3.2 Modifiziertes Plane-Wave-Verfahren	31
3.2.1 Motivation	31
3.2.2 Testrechnungen	32
3.2.3 Zusammenfassung und Ausblick	40
4 Transfer-Matrix-Methode	44
4.1 Motivation und Einführung	44
4.2 Die Transfer-Matrix-Methode	45
4.2.1 Transmission/Reflexion	50
4.3 Beispielrechnung	52
4.4 Numerische Instabilität	55
4.5 Zusammenfassung und Ausblick	63

5	DFD-Verfahren	65
5.1	Motivation	65
5.2	Testrechnungen	66
5.2.1	Vakuum	66
5.2.2	2-dimensionale Testrechnung	72
5.3	Zusammenfassung und Ausblick	78
6	Untersuchung metallischer Systeme	80
6.1	Warum metallische Systeme?	80
6.2	Quadratisch angeordnete Zylinder aus Silber	83
6.3	Störstellen	92
6.3.1	1-dimensionale Störstelle	92
6.3.2	0-dimensionale Störstelle	102
6.4	Zusammenfassung	111
7	Zusammenfassung	113
7.1	Vergleich mit anderen Arbeiten	113
7.2	Zusammenfassung	116
A	Modifiziertes Plane-Wave-Verfahren	124
A.1	Verfahren	124
A.1.1	Formulierung als quadratische Eigenwertgleichung	124
A.1.2	Lösung des quadratischen Problems	131
A.1.3	Invertierbarkeit der Matrix C	133
A.1.4	Numerische Eigenwertberechnung	136
A.1.5	Skalierungseigenschaften	137
B	DFD-Verfahren	139
B.1	Transmission-Spektren	139
B.2	Bandstruktur mittels des DFD-Verfahrens	151
	Literaturverzeichnis	153

Summary / Zusammenfassung

Summary

This work deals with the numerical analysis of metallic photonic crystals. Within this work the problems of the application of common numerical methods for calculations of photonic crystals on metallic systems are discussed. An alternative approach is given which allows to perform full calculations (including absorption and dispersion) of the spectra of finite slices of photonic crystals. This numerical method is used for a numerical analysis of the potential of metallic systems for applications on the basis of systems build from silver.

This work is organized as follows: a short introduction on the most important aspects of the theory of photonic crystals and an overview on the numerical problems when dealing with metallic systems are given in chapter 2.

In chapter 3, the commonly used plane-wave method is presented in a basic manner and it is shown why this method is not well suited for the treatment of metallic systems. An alternate plane-wave method which allows the inclusion of the dispersion without the need of self-consistent solutions is presented. Due to the numerical inefficiency as well as the fundamental problems of treating metallic systems with plane-wave methods and the fact that this method is less efficient than the standard plane-wave method, this alternate method is also shown as unfit for the treatment of metallic systems.

In chapter 4 the transfer-matrix method is introduced. This is typically the alternative method to the plane-wave method when it comes to calculating transmission spectra. It is an explicit finite difference method that, in principle, should be able to include both absorption and dispersion. In this work it is shown though that the method has an underlying numerical instability which makes it useless for treatment of complex systems. Both, dealing with absorption and a higher

number of lattice nodes, is not possible with this method. Additionally, the method shows a bad numerical behaviour for a zero crossings in the dispersion $\varepsilon(\omega)$.

In chapter 5 an alternative to the transfer-matrix-method, the fdfd-method (finite difference, frequency domain), is tested. (The numerical method itself is presented in appendix B.) It is shown that the method gives almost identical results as the transfer-matrix methods in the cases where the transfer-matrix-method still works, but it does not comprise its numerical instability.

In chapter 6 metallic systems are tested for their potential for application with the fdfd-method. Both “simple” photonic crystals as well as 1-dimensional and 0-dimensional impurities are studied for a normal dielectric material and for systems composed of silver. It is shown that metallic systems are indeed of interest for applications.

In appendix A and B the numerical methods that are not common for photonic crystals, namely the modified plane-wave method as well as the fdfd-method, are presented.

Zusammenfassung

Diese Arbeit widmet sich der numerischen Untersuchung von metallischen Photonischen Kristallen. Dabei wird zunächst auf die dazu verwendbaren numerischen Verfahren (Ebene-Wellen, Transfer-Matrix und Finite Difference Frequency Domain) eingegangen, da die üblicherweise für Photonische Kristalle verwendeten Verfahren bei den metallischen System unzureichend sind. Es wird ein alternatives Verfahren, ein Finite Difference Frequency Domain (FDFD) Verfahren, vorgestellt, welches die Untersuchung dieser Systeme erlaubt. Mittels dieses Verfahrens werden Photonische Kristalle aus Silber auf ihre praktische Anwendbarkeit trotz vorhandener Absorption untersucht.

Die Arbeit ist dabei so aufgeteilt, dass zunächst in Kapitel 2 eine knappe Einführung mit den wichtigsten Eigenschaften Photonischer Kristalle gegeben und die numerische Problemstellung dieser Arbeit, die metallischen Systeme, erläutert wird.

In Kapitel 3 wird das üblicherweise verwendete Plane-Wave-Verfahren kurz vorgestellt und gezeigt, wieso dieses Verfahren für die Untersuchung von metallischen Systemen nur bedingt geeignet ist. Es wird zusätzlich kurz ein alternatives

Plane-Wave-Verfahren vorgestellt, bei dem die Dispersion direkt betrachtet werden kann. Wegen der grundlegenden Probleme der Plane-Wave-Verfahren mit metallischen Systemen bilden die modifizierten Plane-Wave-Verfahren nur eine sehr eingeschränkte Alternative für die Behandlung dieser Systeme.

In Kapitel 4 wird die Transfer-Matrix-Methode vorgestellt. Bei der Transfer-Matrix-Methode handelt es sich um die üblicherweise verwendete Alternative zu Plane-Wave-Verfahren, wenn es um die Berechnung von Transmissions-Spektren geht. Es ist ein Finite-Difference-Verfahren, das im Orts-Frequenzraum arbeitet. Prinzipiell sind mit der Transfer-Matrix-Methode sowohl Absorption als auch Dispersion behandelbar. Allerdings wird gezeigt, dass das Verfahren numerisch instabil und somit für die Betrachtung komplexerer Systeme nicht verwendbar ist. Sowohl die Betrachtung der Absorption als auch Einheitszellen mit höherer Stützstellenzahl sind mit diesem Verfahren nicht möglich. Zusätzlich wäre das Verfahren auch ohne diese Instabilität im Bereich einer Nullstelle der Dispersion numerisch schlecht konditioniert.

In Kapitel 5 wird ein alternatives Verfahren zur Transfer-Matrix-Methode, das FDFD (Finite-Difference, Frequency Domain) Verfahren, getestet. Das Verfahren selbst ist im Anhang erläutert. Es wird gezeigt, dass in den Bereichen, in denen die Transfer-Matrix-Methode noch funktioniert, dieses alternative Verfahren fast identische Ergebnisse liefert, allerdings ohne die numerische Instabilität der Transfer-Matrix-Methode.

In Kapitel 6 werden mittels des FDFD-Verfahrens metallische Systeme auf ihre praktische Anwendbarkeit untersucht. Dabei werden sowohl "einfache" Photonische Kristalle, als auch Kristalle mit Störstellen jeweils für ein normales dielektrisches Material und für Silber untersucht und es wird gezeigt, dass metallische Systeme für die Anwendung von Interesse sind.

Im Anhang werden die beiden in diesem Bereich nicht üblichen Verfahren, nämlich das modifizierte Plane-Wave-Verfahren und das FDFD-Verfahren vorgestellt.

Kapitel 1

Einleitung

Obwohl die theoretischen Grundlagen der Photonischen Kristalle, nämlich die klassische Elektrodynamik in makroskopischen Medien, schon sehr lange bekannt waren, richtete sich erst vor ca. 20 Jahren das Interesse auf dieses Themengebiet. Man erkannte, dass es deutliche Parallelen zwischen der quantenmechanischen Beschreibung von Elektronen im Festkörper und der Beschreibung der Ausbreitung des Lichtes in periodischen Medien gibt. Es wurde rasch klar, dass bekannte und in der Halbleiterelektronik ausgenutzte Gegebenheiten (z.B. die Bandstruktur) in ähnlicher Weise auch für die Lichtausbreitung auftreten. Interessant war hierbei vor allem periodische Strukturen zu erhalten, bei denen es für einen bestimmten Frequenzbereich keine Bloch-Lösungen gibt. Hat man ein solches 3-dimensionales System, so kann sich darin keine Welle ausbreiten. D.h. ein ausreichend dicker Kristall aus diesem Material würde in diesem Frequenzbereich eine vollkommene Reflexion aufweisen, egal aus welcher Richtung man Licht einstrahlt. Recht schnell erkannte man das Potential der Photonischen Kristalle, sowohl für Anwendungen, wie z.B. die Möglichkeit zur Herstellung verlustfreier Wellenleiter mit extrem kleinen Kurvenradien, Steigerung der Effizienz von aktiven Medien in Lasern, als auch für die Grundlagenforschung, wie z.B. völlig neue Materiezustände ("gebundene" Atom-Photon-Zustände). Längerfristig besteht die Hoffnung, dass man Bauteile aus der Halbleiterelektronik soweit übertragen kann, dass man auch "optische Computer" herstellen kann.

Die experimentelle Herausforderung ist es nun, Strukturen zu synthetisieren, die im Bereich der optischen Wellenlänge eine komplette Bandlücke besitzen. Das Problem dabei ist, dass die Größen dieser Systeme für die üblichen Halbleiter-

techniken zu klein sind, um damit makroskopische Mengen eines 3-dimensionalen Photonischen Kristalls herzustellen. Aus atomarer Sicht wären diese Strukturen allerdings wiederum zu groß, um sich aus Atomen oder Molekülen zusammensetzen zu lassen. Eine Möglichkeit der Synthetisierung makroskopischer Mengen ist beispielsweise die Selbstorganisation monodisperser Nanokugeln, welche eine fcc-Struktur bilden können. Diese besitzt allerdings im Falle eines normalen Dielektrikums keine komplette Bandlücke.

Aus diesem Mangel an experimentell zugänglichen Systemen ist die Idee entstanden, auch Metalle für Photonische Kristalle in Betracht zu ziehen, obwohl diese im Allgemeinen eine nicht verschwindende Absorption besitzen und somit im ersten Moment als nicht sonderlich geeignet erscheinen. Allerdings gibt es zwei Eigenschaften der Metalle, die diese für Photonische Kristalle interessant machen: Zum einen existiert bei der Plasmafrequenz eine Nullstelle im Realteil ε_1 des Materials und somit kann man nahe der Plasmafrequenz gegen ein konstantes Dielektrikum ε_2 sehr hohe Werte für den Quotient aus $\frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_1}$ erhalten, der für das Ausbilden von Bandlücken möglichst groß (oder nahe bei 0) sein sollte. Weiterhin hat man auch relativ breite Bereiche (im Fall von Silber von ca. 1 eV bis 4 eV) mit vorhandener, aber recht niedriger Absorption und betragsmäßig sehr großen negativen Werten für den Realteil von ε_1 .

Während die Systeme ohne Dispersion und ohne Absorption (und ohne Nullstelle in der Dispersion) von theoretischer Seite sehr gut verstanden sind und effiziente Verfahren zur Berechnung existieren, stellen die metallischen Systeme immer noch eine Herausforderung für die vollständige theoretische Betrachtung dar. In dieser Arbeit soll nun zunächst auf die numerischen Möglichkeiten eingegangen werden. Danach soll anhand eines "Finite Difference Frequency Domain"-Verfahrens (FDFD), das es erlaubt volle Rechnungen (inklusive Dispersion und Absorption) durchzuführen, eine Untersuchung der metallischen Systeme auf ihre Anwendbarkeit erfolgen. Dabei ist sowohl die Nullstelle der Dispersion als auch der betragsmäßig große Wert für den Realteil von ε interessant. Weiterhin sollen auch Störstellensysteme Photonischer Kristalle betrachtet werden, um zu sehen, inwieweit bei diesen Systemen metallische Photonische Kristalle in Betracht kommen. Bei den Rechnungen handelt es sich dabei um eine volle Betrachtung von Silber als Material, die sowohl die Dispersion wie auch die Absorption anhand gemessener Werte beinhaltet.

Kapitel 2

Photonische Kristalle

2.1 Theorie der photonischen Kristalle

Historische Entwicklung

Die Wellenausbreitung von Licht in klassischen, makroskopischen Medien ist eine Theorie, die im Prinzip seit den Maxwell-Gleichungen, die von James Clerk Maxwell Mitte des 19. Jahrhunderts aufgestellt wurden, sehr gut verstanden ist. Dennoch birgt auch dieses Themengebiet immer noch neue Erkenntnisse, wie man am Beispiel der Photonischen Kristalle sehen kann. 1928 veröffentlichte Felix Bloch seine Dissertation, die Elektronen in periodischen Potentialen und die Ausbildung sogenannter Bloch-Wellen beschreibt, welche zur Bildung von Bandstrukturen im Festkörper führen. Zum ersten Mal wurde 1972 von V. P. Bykov der Einfluss einer periodischen Struktur auf die spontane Emission genauer betrachtet [1], was sozusagen die ersten (modernen) Betrachtungen zu Photonischen Kristallen waren. Vor etwa 20 Jahren erkannte man dann, dass man den Formalismus von Bloch auch auf die Maxwell-Gleichungen in räumlich periodischen Dielektrika übertragen kann und dies ebenfalls zur Ausbildung von Bandstrukturen führt [2],[3].

Damit waren die Grundlagen für die Theorie der Photonischen Kristalle gelegt und man erkannte relativ schnell, dass es zwischen der quantenmechanischen Festkörperphysik und der Theorie der Photonischen Kristalle etliche Parallelen gibt, allerdings auch einige Unterschiede. Mögliche Anwendungen und neuartige Effekte waren auch relativ schnell gefunden. Zum Beispiel die Unterdrückung

unerwünschter spontaner Emission [2] oder auch geänderte physikalische Eigenschaften in Raumbereichen, in denen keine Vakuumfluktuation stattfinden kann [4]. Auch für verlustfreie Wellenleiter und zahlreiche andere Anwendungen bieten sich die Photonischen Kristalle an. Der erste hergestellte Photonische Kristall mit einer vollständigen Bandlücke im Mikrowellenbereich wurde 1991 von E. Yablonovitch mittels verschiedener mechanischer Bohrungen in einem Block dielektrischen Materials erstellt und in Anlehnung an seinen Erfinder ‘‘Yablonovite’’ genannt [5].

Auch heutzutage stellt die Herstellung Photonischer Kristalle mit einer vollständigen Bandlücke im Bereich der optischen Wellenlängen, bzw. im nahen Infrarotbereich ein schwieriges experimentelles Problem dar, das es zu lösen gilt und für dessen Lösung teilweise auch neue Rechenverfahren benötigt werden. Eine Erweiterung der Standardrechenverfahren soll hier aufgezeigt und vorgestellt werden. Dabei wird erläutert, warum die Probleme eines dispersiven und absorbierenden Mediums mit den in diesem Bereich üblicherweise verwendeten Verfahren nur sehr unzureichend behandelt werden können.

Mathematische und physikalische Grundlagen

Unter einem Photonischen Kristall versteht man ein makroskopisches dielektrisches Objekt, das räumlich periodisch angeordnet ist.

Grundlage für die mathematische Beschreibung der Photonischen Kristalle bilden somit die Maxwell-Gleichungen:

$$\operatorname{div} \vec{D} = 4\pi\rho, \quad \operatorname{div} \vec{B} = 0, \quad (2.1a)$$

$$\operatorname{rot} \vec{H} - \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \vec{D} = \frac{4\pi}{c} \vec{j}, \quad \operatorname{rot} \vec{E} + \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \vec{B} = 0. \quad (2.1b)$$

Man geht bei der Betrachtung Photonischer Kristalle davon aus, dass man es mit linearen, isotropen Medien zu tun hat, sprich, dass gilt:

$$\vec{D}(\vec{x}) = \varepsilon(\vec{x})\vec{E}(\vec{x}) \quad (2.2a)$$

$$\vec{B}(\vec{x}) = \mu(\vec{x})\vec{H}(\vec{x}). \quad (2.2b)$$

im Allgemeinen wird bei Photonischen Kristallen davon ausgegangen, dass $\mu = 1$ ist, da die betrachteten Materialien im Allgemeinen keine magnetischen, sondern nur dielektrische Eigenschaften besitzen. (Man beachte weiter, dass bei dieser Form der Maxwell-Gleichungen gilt: $\varepsilon_0 = \mu_0 = 1$). Diese Annahme ist für die weiteren Rechnungen nicht unbedingt notwendig, allerdings vereinfacht sie die diese.

Angemerkt sei hierbei auch, dass die Forderung der Isotropie nur eine praktische Vereinfachung darstellt, da in den meisten experimentell betrachteten Fällen die Materialien tatsächlich isotrop sind. Will man anisotrope Medien behandeln, so muss man in (2.2a) das skalare ε durch den Dielektrischen Tensor ε ersetzen. Dadurch werden die Gleichungen zwar komplizierter, aber strukturell bleiben ansonsten fast alle Rechnungen gleich.

Bei den Berechnungen von Photonischen Kristallen geht man i.a. weiterhin davon aus, dass es weder eine Ladungsverteilung gibt (d.h., dass $\rho(\vec{x}) = 0$ ist), noch eine Stromdichte (d.h., dass $\vec{j}(\vec{x}) = 0$ ist). Damit ergeben sich die Gleichungen (2.1a) und (2.1b) zu:

$$\operatorname{div}(\varepsilon\vec{E}) = 0, \quad \operatorname{div}\vec{H} = 0, \quad (2.3a)$$

$$\operatorname{rot}\vec{H} - \frac{\varepsilon}{c}\frac{\partial}{\partial t}\vec{E} = 0, \quad \operatorname{rot}\vec{E} + \frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\vec{H} = 0. \quad (2.3b)$$

Die beiden Divergenz-Gleichungen werden nun vorläufig nicht weiter behandelt. (Durch die Anordnung der Felder bei der numerischen Lösung [6] werden die Divergenz-Gleichungen später automatisch erfüllt.) Betrachtet man also nun die beiden Rotationsgleichungen (2.3b) und spaltet die Felder in ihre Frequenzanteile

auf, so kann man aufgrund der Linearität der Gleichungen die Frequenzanteile einzeln betrachten. Es wird also für die Felder verwendet:

$$\vec{E}(\vec{x}, t) = \vec{E}(\vec{x})e^{-i\omega t} \quad \vec{H}(\vec{x}, t) = \vec{H}(\vec{x})e^{-i\omega t}. \quad (2.4)$$

Damit folgt zusammen mit (2.3b):

$$\vec{\nabla} \times \left(\frac{1}{\varepsilon(\vec{x})} \vec{\nabla} \times \vec{H}(\vec{x}) \right) = \left(\frac{\omega}{c} \right)^2 \vec{H}(\vec{x}). \quad (2.5)$$

Betrachtet man diese Gleichung etwas genauer, so erkennt man, dass es sich dabei um eine Eigenwertgleichung mit Eigenwert $\left(\frac{\omega}{c}\right)^2$ für den Differentialoperator 2. Ordnung

$$\hat{O} := \vec{\nabla} \times \left(\frac{1}{\varepsilon(\vec{x})} \vec{\nabla} \times - \right) \quad (2.6)$$

handelt.

Definiert man ein Skalarprodukt zwischen zwei Feldern \vec{H} und \vec{H}' mittels

$$\langle \vec{H} | \vec{H}' \rangle := \int \vec{H}^* \cdot \vec{H}' dV, \quad (2.7)$$

so ist \hat{O} hermitesch, falls $\forall \vec{x}$ gilt: $\varepsilon(\vec{x}) \in \mathbb{R}$. Physikalisch entspricht dies einem nicht-absorbierenden Medium, da der Imaginäranteil von ε die Absorption des Mediums beschreibt. Ist $\forall \vec{x}$ $\varepsilon(\vec{x}) > 0$, dann ist \hat{O} sogar positiv definit. Für die meisten verwendeten Materialien ist diese Annahme gültig. Allerdings gibt es auch Ausnahmen, z.B. Metalle in der Nähe der Plasmafrequenz, die in dieser Arbeit auch noch genauer betrachtet werden.

Für den Fall, dass $\varepsilon \in \mathbb{R}$ und $\varepsilon > 0$ gilt, d.h., dass \hat{O} hermitesch und positiv definit ist, dann folgt für die Eigenwerte von \hat{O} , dass diese ebenfalls reell und positiv sind. D.h. $\left(\frac{\omega}{c}\right)^2 > 0$ und daraus folgt, dass man ω als reelle, positive Zahl definieren kann. Man könnte als Konvention auch $\omega < 0$ wählen. Allerdings lässt sich $\omega > 0$ direkt als Frequenz interpretieren und das Vorzeichen ist im Prinzip lediglich eine Konvention. Man kann nämlich in der Aufspaltung (2.4) in Frequenzanteile im Prinzip sowohl $e^{-i\omega t}$, als auch $e^{+i\omega t}$ verwenden. Damit hat man eigentlich nur einen Austausch zwischen $+\omega$ und $-\omega$, bzw. zwischen $+t$ und $-t$ (also eine Zeitinversion) vollzogen.

Betrachtet man die Lösungen der Gleichung (2.5) mit verschiedenen Frequenzen ω , so sind diese bezüglich des Skalarprodukts (2.7) orthogonal. D.h. hat man zwei Lösungen \vec{H}_1 und \vec{H}_2 mit den Frequenzen ω_1 und ω_2 , wobei $\omega_1 \neq \omega_2$ ist, dann gilt: $\langle \vec{H}_1 | \vec{H}_2 \rangle = 0$.

2.1.1 Periodizität und Bandstruktur

Die bisher betrachteten Eigenschaften gelten (mit den genannten Einschränkungen) für beliebige dielektrische Strukturen. Man spricht jedoch von einem n -dimensionalen Photonischen Kristall ($n = 1, 2, 3$) im allgemeinen nur, wenn die dielektrische Struktur in n linear unabhängigen Raumrichtungen periodisch ist. D.h. es gibt n linear unabhängige Vektoren minimaler Länge $\vec{R}_i \neq \vec{0}, i = 1, \dots, n$, so dass für alle x und $i = 1, \dots, n$ gilt:

$$\varepsilon(\vec{x} + \vec{R}_i) = \varepsilon(\vec{x}). \quad (2.8)$$

Sehr ähnlich zum zentralen Problem der Festkörperphysik, nämlich der quantenmechanischen Lösung der Schrödinger-Gleichung für ein periodisches Potential, kann man auch hier das Bloch-Floquet-Theorem anwenden [10],[11]. Dieses besagt, dass man die Lösung von (2.5) für ein beliebiges $\vec{k} \in \mathbb{R}^3$ als Bloch-Welle in der Form

$$\vec{H}(\vec{x}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} \vec{u}_{\vec{k}}(\vec{x}) \quad (2.9)$$

schreiben kann, wobei $\vec{u}_{\vec{k}}(\vec{x})$ periodisch mit $\vec{R}_i, i = 1, \dots, n$ ist und \vec{k} Bloch-Wellen-Vektor genannt wird. Für $\vec{u}_{\vec{k}}(\vec{x})$ gilt dann:

$$(\vec{\nabla} + i\vec{k}) \times \left(\frac{1}{\varepsilon} (\vec{\nabla} + i\vec{k}) \times \vec{u}_{\vec{k}}(\vec{x}) \right) = \left(\frac{\omega(\vec{k})}{c} \right)^2 \vec{u}_{\vec{k}}(\vec{x}). \quad (2.10)$$

Diese Gleichung hat nun für jedes \vec{k} Lösungen mit jeweils verschiedenen Eigenwerten, die durchnummeriert werden. Somit erhält man die jeweiligen Lösungen $\vec{u}_{n,\vec{k}}(\vec{x})$ mit den dazugehörigen Frequenzen $\omega_n(\vec{k})$. Trägt man nun diese Frequenzen $\omega(\vec{k})$ gegen \vec{k} auf, so erhält man die aus der Festkörperphysik bekannten sogenannten Bandstrukturen. Analog zum Fall des Festkörpers kann man auch hier ein reziprokes Gitter definieren, indem man die Basis $G_j, j = 1, \dots, n$ durch die Gleichung

$$\vec{R}_i \cdot \vec{G}_j = 2\pi\delta_{i,j} \quad \forall i, j \quad (2.11)$$

definiert. (Die Vektoren G_j sind durch diese Gleichung wohldefiniert.) Bezüglich dieser Basis gilt, dass die Bandstrukturen periodisch mit \vec{G}_j sind, was man anhand von (2.9) mit (2.11) sehr einfach unter Ausnutzung der Periodizität von $\vec{u}_{n,\vec{k}}(\vec{x})$ nachvollziehen kann. Definiert man, ebenfalls analog zur Festkörperphysik, die erste Brillouin-Zone als die primitive Wigner-Seitz-Zelle des reziproken Gitters, so genügt es, die Bandstruktur innerhalb der ersten Brillouin-Zone zu kennen, da sich alle anderen Bereiche durch die Periodizität der Bandstruktur aus der ersten Brillouin-Zone ergeben. Sind noch zusätzliche räumliche Symmetrien in der dielektrischen Struktur $\varepsilon(\vec{x})$ enthalten, so ergibt sich dadurch eine noch kleinere irreduzible erste Brillouin-Zone.

2.1.2 Skaleneigenschaften

Eine besondere Eigenschaft Photonischer Kristalle ist auch, dass in Gleichung (2.5) keine natürliche Längenskala vorgegeben ist. (Lediglich die Forderung, dass das Material sich makroskopisch verhalten muss, ist vorgegeben.) Man betrachtet Gleichung (2.5) und nimmt an, dass man für eine gegebene dielektrische Struktur $\varepsilon(\vec{x})$ die Lösung $\vec{H}(\vec{x})$ mit zugehöriger Frequenz ω bestimmt hat. Nun definiert man eine neue dielektrische Struktur ε' mit $\varepsilon'(\vec{x}) := \varepsilon(\frac{\vec{x}}{\alpha})$ mit dem Skalierungsfaktor $\alpha \in \mathbb{R}$. Dabei handelt es sich um eine komprimierte bzw. gestreckte Version der Ausgangsstruktur. Führt man nun in (2.5) die Substitution $\vec{x}' := \alpha\vec{x}$ durch, so wird $\vec{\nabla}' = \frac{1}{\alpha}\vec{\nabla}$ und (2.5) zu

$$\vec{\nabla}' \times \left(\frac{1}{\varepsilon'(\vec{x}')} \vec{\nabla}' \times \vec{H} \left(\frac{\vec{x}'}{\alpha} \right) \right) = \left(\frac{\omega}{\alpha c} \right)^2 \vec{H} \left(\frac{\vec{x}'}{\alpha} \right). \quad (2.12)$$

Das gleichfalls komprimierte bzw. gestreckte Feld $\vec{H}(\frac{\vec{x}}{\alpha})$ löst also die Gleichung (2.5) mit der Frequenz $\omega' = \frac{\omega}{\alpha}$. D.h., es spielt im Prinzip keine Rolle, ob die gleiche Grundstruktur im Mikrowellenbereich oder im sichtbaren Bereich betrachtet wird. Die grundsätzlichen Eigenschaften ändern sich nicht. Man muss lediglich die Felder und Frequenzen umskalieren. Aus diesem Grund werden in den folgenden Rechnungen auch häufig nur "relativen Einheiten" $\omega_{rel} = \frac{\omega a}{2\pi c}$ angegeben, wobei a die Größe der Einheitszelle und c die Lichtgeschwindigkeit ist.

Allerdings gilt diese Skaleninvarianz nur, solange keine Dispersion vorliegt,

also solange ε nicht von der Frequenz abhängt. Hat man eine Dispersion des Mediums, so wird die Skaleninvarianz durch die Einführung einer Längenskala gebrochen und die obige Bedingung gilt nicht mehr. Dies wird später insbesondere im Fall der Photonischen Kristalle aus Metallen und Frequenzen um die Plasmafrequenz interessant, da dann insbesondere um die Plasmafrequenz eine nicht zu vernachlässigende Dispersion gegeben ist [7].

Die Gleichung (2.5) besitzt allerdings auch noch eine weitere Skalierungseigenschaft: skaliert man den Wert von ε für den gesamten Photonischen Kristall $\varepsilon'(\vec{x}) := \frac{\varepsilon(\vec{x})}{\alpha^2}$, so wird (2.5) zu

$$\vec{\nabla} \times \left(\frac{1}{\varepsilon'(\vec{x})} \vec{\nabla} \times \vec{H}(\vec{x}) \right) = \left(\frac{\alpha\omega}{c} \right)^2 \vec{H}(\vec{x}). \quad (2.13)$$

Die Felder selbst bleiben also unter dieser Transformation invariant, allerdings ändert sich die Frequenz zu $\omega' = \alpha\omega$.

Variationsprinzip

Wir haben bereits gesehen, dass man Gleichung (2.5) als Eigenwertgleichung eines positiv hermiteschen Operators interpretieren kann (falls $\varepsilon \in \mathbb{R}$ und $\varepsilon > 0$). Auch hier trifft man eine Analogie zur Quantenmechanik wieder: man kann in der Quantenmechanik den niedrigsten Energiezustand Ψ_0 dadurch finden, dass man

$$\Psi \mapsto \frac{\langle \Psi | H \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \quad (2.14)$$

minimiert, wobei H der Hamilton-Operator des Systems ist. (siehe hierzu z.B. [8].)

Im Falle der Photonischen Kristalle kann man die Lösung mit der niedrigsten Frequenz ω_0 dadurch finden, dass man das elektromagnetische Energiefunktional

$$E[\vec{H}] := \frac{1}{2} \frac{\langle \vec{H} | \hat{O} \vec{H} \rangle}{\langle \vec{H} | \vec{H} \rangle} \quad (2.15)$$

minimiert. Den Beweis hierzu findet man z.B. in [9]. Möchte man die höheren Moden finden, dann muss man aus den zu minimierenden Feldern die jeweils

energetisch niedrigeren Felder herausprojizieren und auf dem verbleibenden Funktionsraum das Energiefunktional $E[\vec{H}]$ minimieren. Die Betrachtung des Energiefunktional hilft jedoch nicht nur bei der Bestimmung der Lösungen von (2.5), sondern sie hilft auch bei dem Verständnis dieser Lösungen. Betrachtet man nämlich $E[H]$, dann erkennt man, dass gilt:

$$\begin{aligned} E[H] &= \frac{1}{2} \frac{\langle \vec{H} | \hat{O} \vec{H} \rangle}{\langle \vec{H} | \vec{H} \rangle} \\ &= \frac{1}{2 \|\vec{H}\|^2} \int dV \frac{1}{\varepsilon} \left\| \frac{\omega}{c} \vec{D} \right\|^2. \end{aligned}$$

(Zur Herleitung sei ebenfalls auf [9] verwiesen.) An der letzten Zeile kann man sehr gut erkennen, wie sich das Feld über den Photonischen Kristall zu verteilen versucht: das Energiefunktional wird klein, wenn die Bereiche mit großen Feldstärken in \vec{D} in den Bereichen mit großem ε liegen. Gleichzeitig müssen die Moden natürlich noch orthogonal zu den tieferliegenden Moden sein.

2.2 Beispiele und Weiterführendes

Bandlücke am Beispiel 1-dimensionaler Photonischer Kristalle

Um das allgemeine Verhalten 2- oder gar 3-dimensionaler Photonischer Kristalle zu verstehen, ist es hilfreich, sich zunächst mit dem deutlich einfacheren Fall eines 1-dimensionalen Photonischen Kristalls zu beschäftigen. Alle wichtigen Eigenschaften sind in diesem Fall schon in einfacher Form vorhanden.

Man betrachtet in diesem Fall Licht, das sich nur in eine Richtung ausbreitet, hier willkürlich in z -Richtung. Nun muss man nur eine Komponente von \vec{k} betrachten, in diesem Fall k_z . Man wählt die Ausbreitungsrichtung so, dass gilt: $k_x = k_y = 0$. Weiter muss für den 1-dimensionalen Fall gelten, dass ε in x - und y -Richtung konstant ist. In z -Richtung muss ε periodisch mit Periode a sein.

Der denkbar einfachste Fall, der dies erfüllt, wäre das Vakuum oder auch ein konstantes dielektrisches Medium $\varepsilon(x, y, z) = \textit{konst.}$ I.a. spricht man hierbei nicht von einem Photonischen Kristall. Wir wollen dies aber zunächst als pathologischen Sonderfall eines 1-dimensionalen Photonischen Kristalls betrachten. Wählt

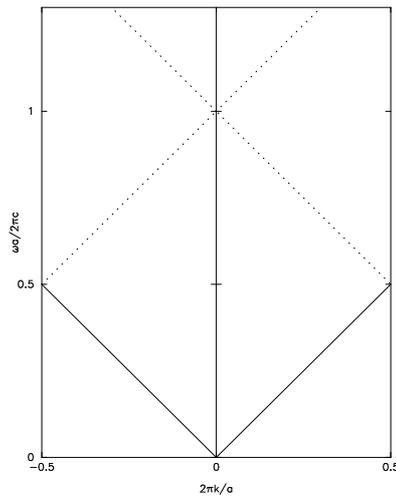


Abbildung 2.1: 1-dimensionale Bandstruktur des Vakuums. Für ein homogenes Medium erhält man die gleiche Struktur durch Stauchung um $\sqrt{\varepsilon}$.

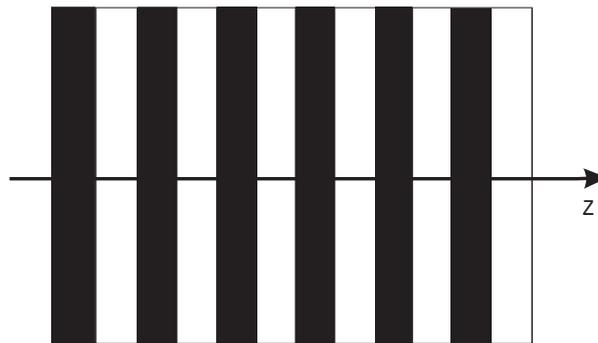


Abbildung 2.2: 1-dimensionaler Photonischer Kristall, der immer abwechselnd aus einer Schicht mit $\varepsilon = 12$ und einer Schicht mit $\varepsilon = 1$ besteht.

man die Periodizität a in z -Richtung nun willkürlich, so kann man die Bandstruktur des Problems berechnen. Das Ergebnis ist allerdings sehr einfach analytisch zu erhalten. Man muss lediglich den 1-dimensionalen Lichtkegel betrachten der durch $\omega = \frac{ck}{\sqrt{\varepsilon}}$ gegeben ist, und diesen entsprechend dem gewählten a in die 1. Brillouin-Zone falten. (Siehe hierzu Abb. 2.1. Die in die erste Brillouin-Zone zurückgefalteten Bereiche sind hierbei gepunktet dargestellt.)

Im Vergleich dazu betrachtet man nun die Struktur aus Abb. 2.2, bei der sich jeweils eine Schicht mit $\varepsilon = 12$ und eine gleichgroße Schicht mit $\varepsilon = 1$ abwechseln. Der Kristall besitzt in x - und y -Richtung eine konstante Dielektrizität. Die Periodizität a in z -Richtung entspricht der doppelten Dicke der Schichten. Man spricht dabei auch von einem 1-dimensionalen Photonischen Kristall, da eine "ech-

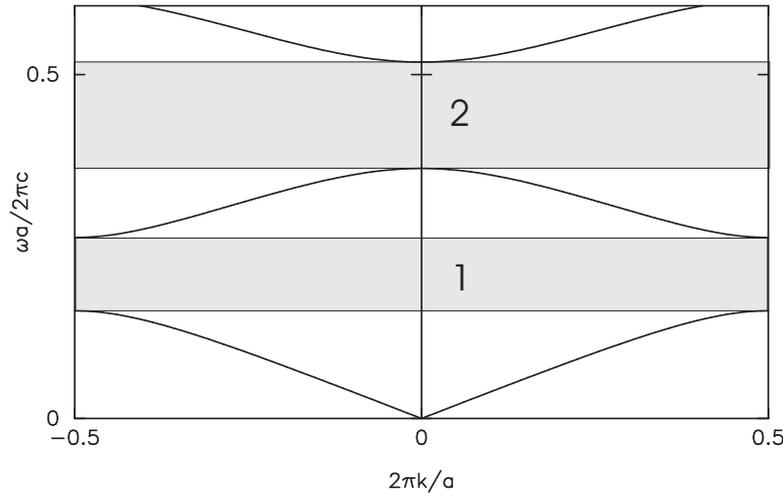


Abbildung 2.3: Bandstruktur des Photonischen Kristalls aus Abb. 2.2, der aus abwechselnden Schichten mit $\varepsilon = 12$ und $\varepsilon = 1$ besteht. Eingezeichnet sind die beiden Bandlücken 1 und 2.

te” Periodizität nur in z -Richtung vorliegt und ε in x - und y -Richtung konstant ist. Bei der Berechnung dieser Struktur geht man von senkrechtem Lichteinfall aus, d.h. es soll $k_x = k_y = 0$ gelten und somit ist $k = k_z$. Berechnet man die Bandstruktur dieses 1-dimensionalen Photonischen Kristalls unter senkrechtem Lichteinfall (Abb 2.3), so erkennt man das Auftreten der sogenannten Bandlücke. In diesem Fall sind es sogar im betrachteten Frequenzbereich zwei Bandlücken. Eine Bandlücke bedeutet dabei, dass es für einen endlichen Frequenzbereich kein $k(=k_z)$ gibt, das eine Lösung in diesem Frequenzbereich besitzt. In diesem Fall sind dies die in der Bandstruktur in Abb. 2.3 grau gezeichneten Bereiche 1 und 2. Weiter erkennt man, dass im Vergleich zur Bandstruktur des Vakuums (Abb. 2.1) die Bänder wesentlich flacher verlaufen. Dies ist allerdings anhand dessen, was wir in Abschnitten 2.1.2 und 2.1.2 gesehen haben, nicht weiter verwunderlich. Das \vec{D} -Feld konzentriert sich in den niedrigen Moden hauptsächlich in den Bereichen mit großem ε , was dazu führt, dass die Frequenz im Vergleich zum Vakuum absinkt. Man sieht hier auch beim niedrigsten Band, dass die Größenordnung in etwa den Erwartungen entspricht: Betrachtet man in beiden Fällen das niedrigste Band, so schneidet im Falle des Vakuums das unterste Band den Rand der 1. Brillouin-Zone bei dem normierten Frequenzwert von $\frac{\omega a}{2\pi c} = 0,5$, im Gegensatz zu $\frac{\omega a}{2\pi c} \approx 0,157$ bei der Struktur aus Abb. 2.2. Dieser Wert liegt leicht oberhalb des Wertes $\frac{\omega a}{2\pi c} = \frac{0,5}{\sqrt{12}} \approx 0,144$, den man für eine homogene Struktur

mit $\varepsilon = 12$ erhielt.

Was bedeutet nun das Vorhandensein einer Bandlücke? Da bei gegebener Frequenz ω , die in der Bandlücke liegt, für kein k eine Lösung existiert, bedeutet dies, dass sich innerhalb des Mediums Licht dieser Frequenz nicht ausbreiten kann. (Lediglich exponentiell abklingende Moden können existieren.) D.h., hat man einen Photonischen Kristall, so wird Licht einer Frequenz ω , die innerhalb der Bandlücke liegt, vollständig reflektiert, da es sich im Kristall nicht ausbreiten kann. (Dies gilt im 1-dimensionalen Fall allerdings nur, solange sich das Licht, wie anfangs angenommen, entlang der z -Achse ausbreitet. Breitet sich das Licht nicht entlang der z -Achse aus, so kann es auch in dem betrachteten Frequenzbereich Lösungen geben, die sich im Photonischen Kristall ausbreiten.)

Höherdimensionale Photonische Kristalle

Im Prinzip ergibt sich im mehrdimensionalen Fall ähnliche Strukturen wie auch schon im 1-dimensionalen Fall. Allerdings wird die 1. Brillouin-Zone und damit auch die Bandstruktur in 2 bzw. 3 Dimensionen deutlich komplizierter. Deshalb soll hier nur auf einige Besonderheiten gezielt eingegangen werden.

Im Fall eines 2-dimensionalen Photonischen Kristalls sei angemerkt, dass sich die Gleichungen für das Problem in zwei getrennte Gleichungssysteme zerlegen lassen. Die Lösungen nennt man in Anlehnung an die Lösungen von Wellenhohlleitern TE (für transversal elektrische) bzw. TM (für transversal magnetische) Moden. (Anmerkung: Im 1-dimensionalen Fall ist das natürlich auch möglich. Dort sind diese beiden Gleichungssysteme und dementsprechend die Moden sogar jeweils doppelt entartet.) Im 3-dimensionalen Fall gibt es diese Entartung nicht mehr.

Weiterhin ist außerdem im 2- und noch stärker im 3-dimensionalen Fall das Auftreten der Bandlücke durch die verschiedenen Raumrichtungen immer unwahrscheinlicher. Im 3-dimensionalen Fall ist es so, dass man nach einer Struktur sucht, die eine möglichst sphärische Brillouin-Zone besitzt, denn dann ist $\|\vec{k}\|$ am Rand der Brillouin-Zone am ehesten konstant. Wenn sich nun in den verschiedenen Raumrichtungen lokal Bandlücken öffnen, ist es eher möglich, dass diese sich zu einer globalen Bandlücke zusammenfügen. Aus diesem Grund ist im 3-dimensionalen Fall die fcc-Struktur (fcc=face centered cubic. Dies ist die kubisch dichteste Packung gleichgroßer Kugeln) eine der bevorzugt betrachteten Struk-

turen, da die 1. Brillouin-Zone eine gute Näherung einer Kugel ist. So findet man z.B. bei der Diamant-Struktur eine vollständige Bandlücke [9]. Von experimenteller Seite ist die einfache fcc-Struktur interessant, da sich diese durch Selbstorganisation monodisperser Nanokügelchen auch im Bereich optischer Wellenlängen erzeugen lässt. Allerdings besitzt die einfache fcc-Struktur aus herkömmlichen Dielektrika keine Bandlücke.

2.3 Konkrete Problemstellung für diese Arbeit

2.3.1 Allgemeines

Nach der allgemein gehaltenen Einführung soll nun kurz auf die konkrete Problemstellung eingegangen werden, der sich diese Arbeit widmet. Diese Arbeit ist in zwei Bereiche aufgeteilt. Zunächst geht es um die möglichen numerischen Verfahren. Ausgehend von den üblicherweise in diesem Gebiet verwendeten Verfahren (ebene-Wellen Verfahren, Transfer-Matrix-Methode), sollen deren Mängel in der Beschreibung der betrachteten Photonischen Kristalle dargelegt werden. Danach wird eine Möglichkeit aufgezeigt, wie diese Unzulänglichkeiten mittels eines Finite Difference Frequency Domain (FDFD) Verfahrens umgangen werden können. Dieses Verfahren wird üblicherweise nicht für die Berechnungen Photonischer Kristalle verwendet, sondern hat seinen Ursprung in der Beschreibung von Wellenhohlleitern und wurde im Rahmen dieser Arbeit an die Photonischen Kristalle angepasst. Mittels dieses FDFD-Verfahrens wurden metallische Photonische Kristalle auf die Möglichkeit der praktischen Nutzung untersucht. Dazu stellt sich insbesondere die Frage, ob die Absorption des Metalle die erhofften positiven Auswirkungen auf die Bandstruktur zunichte macht. Es ist zwar auch möglich mittels spezieller Ebene-Wellen-Verfahren Bandstrukturen von Materialien mit Dispersion zu berechnen, allerdings erhält man aus der Bandstruktur keine Information darüber, wie stark der Kristall bei welcher Frequenz wirklich absorbiert. Mittels des adaptierten FDFD-Verfahrens ist es möglich sowohl über die Spektren nach Bandlücken zu suchen, wie auch zu beurteilen, wie stark der Einfluss der Absorption ist. Es ist gerade bei Photonischen Kristallen nämlich nicht so, dass die Absorption sich so verhält wie der Absorption des reinen Materials, da die Verteilung der Felder innerhalb des Kristalls und somit auch die Absorption des gesamten Kristalls mit der Frequenz stark variiert.

Seit der Entdeckung der Photonischen Kristalle und der Herstellung erster Strukturen mit einer Bandlücke im Mikrowellenbereich ist man auf der Suche nach einer einfachen Möglichkeit, mit der man eine Struktur mit einer solchen Bandlücke auch im sichtbaren Bereich bzw. im nahen Infrarotbereich, in makroskopischen Mengen herstellen kann. Hier bietet sich vor allem der Prozess der Selbstorganisation an. Das Problem bei diesem Verfahren ist allerdings, dass hierbei üblicherweise eine einfache fcc-Struktur entsteht, die, wie im vorherigen Abschnitt erwähnt, zwar prinzipiell eine räumlich vorteilhafte Brillouin-Zone besitzt, die allerdings mit einfachen, nicht dispersiven Medien trotzdem keine direkte Bandlücke aufweist. Einen möglichen Ausweg bietet unter Umständen die Verwendung metallischer Nanopartikel [12], [13], [14], [15], [18], [19], [20], [21]. Dabei wird insbesondere Silber als Metall betrachtet, da es für diese Systeme günstige Eigenschaften besitzt, insbesondere eine sehr niedrige Absorption unterhalb der Nullstelle des Realteils von ε .

Ein weiterer interessanter Aspekt der metallischen Systeme ist der sehr große negative Realteil von ε [7]. Allerdings sind diese mit einem nicht zu vernachlässigenden Imaginäranteil (entspricht Absorption) verbunden. Numerische Untersuchungen [13] deuten jedoch darauf hin, dass trotz der vorhandenen Absorption diese Materialien für Photonische Kristalle immer noch von Bedeutung sein könnten. Allerdings sei darauf verwiesen, dass das in [13] verwendete Transfer-Matrix-Verfahren [22] einige tiefliegende Mängel (numerische Instabilität) aufweist, die dieses Verfahren insbesondere für die Fragestellung der Absorption einer endlichen Schicht als gänzlich ungeeignet erscheinen lassen, weshalb für diese Arbeit auch das FDFD-Verfahren für die Beschreibung von Wellenhohlleitern auf die Photonischen Kristalle übertragen wurde.

Ein weiterer Vorteil von Metallen gegenüber anderen Materialien liegt im Verhalten nahe der Plasmafrequenz. Dort hat man zum einen einen Nulldurchgang des Realteils der Dielektrizitätskonstante ε . Betrachtet man beispielsweise ein 2-komponentiges System Metall-Luft, mit jeweiligen dielektrischen Konstanten ε_1 und ε_2 (wobei ε_1 hier frequenzabhängig ist), so erhält man nahe der Plasmafrequenz einen sehr hohen Wert für den Kontrast $\frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_1}$. Allerdings setzt auch in der Nähe der Plasmafrequenz die Absorptionskante des Metalls ein, was die Frage aufwirft, ob man den hohen Kontrast gegenüber einer akzeptablen Gesamtabsorption einer endlichen Schicht ausnutzen kann.

Für das Auftreten einer Bandlücke ist ein hoher Kontrast sehr günstig bzw. notwendig (siehe hierzu z.B. [9]). Mit herkömmlichen dispersiven Materialien ist lediglich ein Kontrast zu Luft von ca. 1:13 möglich. Die Verwendung metallischer Systeme kann dieser Kontrast um mindestens eine Größenordnung erhöhen. Nahe des Nulldurchganges (der Plasmafrequenz) kann dieser Kontrast sogar prinzipiell beliebig hoch werden (wenn auch nur in einem sehr kleinen Frequenzbereich).

2.3.2 Das Problem der Dispersion

Eines der beiden Probleme, die bei der Berechnung der Bandstrukturen, bzw. allgemein der Eigenschaften von Photonischen Kristallen auftreten können, ist die Dispersion. Diese bedeutet, dass die Dielektrizitätskonstante von der Frequenz abhängt. Im Standardverfahren zur Berechnung von Bandstrukturen [23], einem Verfahren, das die Fourier-Transformation der Gleichung (2.5) mittels einer endlichen ebenen-Wellen-Basis löst, berechnet man die Bandstruktur $\omega(\vec{k})$ dadurch, dass man für gegebenes \vec{k} die Eigenfrequenz ω berechnet. Allerdings hat man dabei das Problem, dass man zur Beschreibung der Struktur die Dielektrizität des Materials benötigt, welche wiederum von der Lösung abhängt. Dieses Problem ist zwar prinzipiell nicht unüberwindlich und kann durch Iterationen bis zur Selbstkonsistenz gelöst werden. Jedoch wird auch dieses Verfahren schwieriger, wenn für eine Struktur sowohl $\varepsilon < 0$ als auch $\varepsilon > 0$ in gewissen Raumbereichen gilt. Auch ein solches System ist prinzipiell noch berechenbar, jedoch trifft man dabei häufig auf komplexe Werte für ε . Weiterhin ist das Verfahren auch numerisch für $\varepsilon \approx 0$ sehr schlecht konditioniert, was aber bei den betrachteten Strukturen gerade der Bereich ist, der berechnet werden soll. Im Vergleich dazu ist bei der Transfer-Matrix-Methode [22] die Dispersion sehr einfach zu integrieren, da hier die Frequenz bei der Berechnung immer bekannt ist. Jedoch hat man bei dieser Methode das bereits angedeutete Problem der numerischen Instabilität bei feiner werdenden Gitterrastern, was dazu führt, dass dieses Verfahren ebenfalls nur bedingt brauchbar ist. Für das FDFD-Verfahren als Frequenzraum-Verfahren stellt (ähnlich wie bei der Transfer-Matrix-Methode) die Dispersion kein Problem dar, da bereits zu Beginn der Rechnung, im Gegensatz zu den üblichen ebenen-Wellen-Verfahren, die Frequenz zu Beginn der Rechnung vorgegeben ist. Das für diese Arbeit adaptierte FDFD-Verfahren bietet also den Vorteil der Transfer-Matrix-Methode bezüglich der Behandlung der Dispersion, allerdings ohne deren

numerische Instabilität.

2.3.3 Das Problem der Absorption

Zusätzlich zu dem Problem der Dispersion hat man im Falle eines metallischen Photonischen Kristalls noch das Problem, dass das Metall auch noch absorbiert. Dies führt zunächst dazu, dass eigentlich das gesamte Konzept der Bandstruktur nur noch sehr eingeschränkt brauchbar ist. Man müsste auf komplexe \vec{k} zurückgreifen, um die Absorption zu beschreiben. Komplexe \vec{k} entsprechen allerdings sich nicht unendlich ausbreitenden Moden. Im Falle der Absorption bietet es sich daher an, statt der Bandstruktur für einen unendlichen Photonischen Kristall die Reflexion bzw. Transmission durch eine endliche Schicht zu betrachten. Auch bei diesem Problem würde sich eigentlich die Transfer-Matrix-Methode wieder anbieten, da sie dazu geeignet ist, Transmissionen und Reflexionen direkt zu berechnen. Auch die Absorption, also ein komplexes ε , ist für dieses Verfahren kein prinzipielles Problem. Aufgrund der numerischen Instabilität erscheint dieses Verfahren jedoch insbesondere für absorbierende Materialien absolut ungeeignet.

2.3.4 Lösungsansatz

In dieser Arbeit soll auf zwei verschiedene Alternativen eingegangen werden. Zunächst eine Alternative zu der ebene-Wellen-Methode [23], bei der man nicht von \vec{k} ausgeht und daraus ω ausrechnet, sondern bei der zwei Komponenten, etwa k_x und k_y , sowie ω gegeben sind und die 3. Komponente von \vec{k} , in diesem Falle also k_z , berechnet wird. Dieses Verfahren wurde anhand von [24] nachprogrammiert und getestet. Allerdings erwies sich diese Programm als sehr zeitintensiv. Zusätzlich hat man auch hier immer noch nicht das Problem der Absorption gelöst. Das Verfahren selbst soll deshalb nur im Anhang vorgestellt und die Ergebnisse kurz in der Arbeit besprochen werden.

Der numerische Schwerpunkt soll daher auf einer Alternative zur Transfer-Matrix-Methode liegen. Zunächst wird das numerische Problem der Transfer-Matrix-Methode anhand exemplarischer Beispiele aufgezeigt. Das Problem der Transfer-Matrix-Methode ist, dass exponentiell anwachsende Felder entstehen.

Um dieses Problem zu umgehen wurde nach einer Alternative zur Transfer-Matrix-Methode gesucht, die jedoch die prinzipiellen Vorteile der Transfer-Matrix-

Methode beibehält (keine Probleme Absorption und Dispersion zu behandeln, sowie die Berechnung der experimentell leichter zugänglichen Größen Transmission und Reflexion), aber die nicht instabil ist. Dabei wurde im Rahmen dieser Arbeit das Finite Difference Frequency Domain (FDFD) Verfahren aus dem Bereich der Wellenhohleiter (siehe z.B. [30], [31]) auf die Problemstellung der Photonischen Kristalle übertragen und anschließend implementiert.

Mit diesem Verfahren wird das Problem des numerisch exponentiellen Anwachsens der Felder überwunden und das Verfahren bleibt auch bei feineren Diskretisierungsraster weiterhin stabil. Es werden bei dem FDFD-Verfahren üblicherweise Reflexions- und Transmissionsspektren berechnet. (Prinzipiell ist es mit dieser Methode auch möglich Bandstrukturen zu berechnen. Da aber Bandstrukturen für die betrachteten Probleme grundsätzlich schon ein ungeeignetes Werkzeug darstellen, und die Bandstrukturen somit auch nur sehr rudimentär und unvollständig implementiert wurden, soll auf eine Bandstruktur-Untersuchung mittels dieses Verfahrens verzichtet werden. Dazu eignen sich die Standardverfahren deutlich besser.)

Dieses Verfahren soll dann für die Untersuchung der metallischen Systeme verwendet werden, um abschätzen zu können, ob die beiden erwähnten Eigenschaften (hoher negativer Realteil von ε und der Nulldurchgang) von ε für praktische Anwendungen von Interesse sein könnten.

Kapitel 3

Plane-Wave-Verfahren

3.1 Einfaches Plane-Wave-Verfahren

3.1.1 Motivation

Aufgrund der bereits in der Einführung erwähnten Ähnlichkeiten zur Quantenmechanik im Festkörper ist es naheliegend, numerische Verfahren aus diesem Gebiet auf das Problem der Photonischen Kristalle zu übertragen. Eines der direktesten Verfahren ist hierbei üblicherweise die Entwicklung der Gleichungen (in diesem Fall (2.5)) in eine endliche Zahl ebener Wellen, so dass eine endlich-dimensionale Matrixgleichung entsteht. Diese wird dann mittels numerischer linearer Algebra gelöst.

Diese Methode ist die Standardmethode zur Berechnungen von Bandstrukturen und dafür gut geeignet. Es handelt sich um ein etabliertes und gut verstandenes Verfahren, dass jedoch auf das Problem der metallischen Photonischen Kristalle nur sehr eingeschränkt anwendbar ist.

3.1.2 Verfahren

Ausgangspunkt ist die Mastergleichung (2.5) unter Verwendung der Bloch-Struktur der Lösung. Dies führt zur Form (2.10):

$$(\vec{\nabla} + i\vec{k}) \times \left(\frac{1}{\varepsilon} (\vec{\nabla} + i\vec{k}) \times \vec{u}_{\vec{k}}(\vec{x}) \right) = \left(\frac{\omega(\vec{k})}{c} \right)^2 \vec{u}_{\vec{k}}(\vec{x}). \quad (3.1)$$

Da weiterhin gilt, dass $\vec{u}_{\vec{k}}(\vec{x})$ periodisch ist, kann man $\vec{u}_{\vec{k}}(\vec{x})$ in ebene Wellen

zerlegen, deren Wellenvektoren \vec{G} auf dem Gitter Γ liegen, das als reziprokes Gitter durch die Periodizität im Ortsraum gegeben ist.

$$\vec{u}_{\vec{k}}(\vec{x}) = \sum_{\vec{G} \in \Gamma} \vec{u}_{\vec{k}, \vec{G}} e^{i\vec{G} \cdot \vec{x}}. \quad (3.2)$$

Ebenso wird nun $\frac{1}{\varepsilon(\vec{x})}$ zerlegt

$$\frac{1}{\varepsilon(\vec{x})} = \sum_{\vec{G} \in \Gamma} \left(\frac{1}{\varepsilon} \right)_{\vec{G}} e^{i\vec{G} \cdot \vec{x}} \quad (3.3)$$

und (3.3) mit (3.2) in (3.1) eingesetzt. Die Ableitungen $\vec{\nabla}$ können damit sehr einfach berechnet werden und nach einigen einfachen Umformungen ergibt sich:

$$\left(\frac{\omega^2}{c^2} \vec{u}_{\vec{k}, \vec{G}'} + \sum_{\vec{G} \in \Gamma} \left(\frac{1}{\varepsilon} \right)_{\vec{G}' - \vec{G}} (\vec{k} + \vec{G}') \times (\vec{k} + \vec{G}) \times \vec{u}_{\vec{k}, \vec{G}} \right) = 0, \quad \forall \vec{G}' \in \Gamma. \quad (3.4)$$

Hierbei handelt es sich immer noch um eine unendlich-dimensionale Gleichung, die ohne weiteres nicht lösbar ist. Nimmt man aber an, dass die Beiträge mit steigendem Betrag von \vec{G} bzw. \vec{G}' immer kleinere Beträge liefern, so kann man (3.4) dadurch annähern, dass man nur ein endliches Teilgitter $\Gamma' \subset \Gamma$ betrachtet. Aus (3.4) wird dann:

$$\left(\frac{\omega^2}{c^2} \vec{u}_{\vec{k}, \vec{G}'} + \sum_{\vec{G} \in \Gamma'} \left(\frac{1}{\varepsilon} \right)_{\vec{G}' - \vec{G}} (\vec{k} + \vec{G}') \times (\vec{k} + \vec{G}) \times \vec{u}_{\vec{k}, \vec{G}} \right) = 0, \quad \forall \vec{G}' \in \Gamma'. \quad (3.5)$$

Der entscheidende Unterschied ist hierbei, dass die Anzahl der Gleichungen sowie die Summen nun endlich sind. Man betrachtet (3.5) nun für jedes \vec{k} als ein Matrix-Gleichungssystem mit den Unbekannten $\vec{u}_{\vec{k}, \vec{G}}$. Da es sich um ein homogenes lineares Gleichungssystem handelt, gibt es nicht-triviale Lösungen (und nur diese sind interessant) genau dann, wenn die Determinante der Matrix des Gleichungssystems 0 ist. Somit kann man für ein gegebenes \vec{k} die verschiedenen Lösungen $\omega_n(\vec{k})$ der Bandstruktur berechnen, wobei n ein Index für die diskreten Lösungen ist und die Bänder nummeriert. (Statt die Determinante zu berechnen, kann man natürlich auch einfach das Gleichungssystem lösen.)

Einer der großen Vorteile der Plane-Wave-Methode ist sicherlich die direkte

Implementierbarkeit, da man es effektiv zwar mit großen, aber durchaus noch beherrschbaren Standardproblemen der linearen Algebra zu tun hat. Bei der Lösung dieser Systeme können auch noch Eigenschaften, wie die Hermitezität, oder die Tatsache, dass das zu lösende System für $\varepsilon > 0$ positiv definit ist, verwendet werden. Der Vorteil hierbei ist, dass es für positiv definite hermitesche Systeme sehr gute und effiziente Standardverfahren gibt. Für genauere Details einer möglichen effizienten Implementierung sei hier auf [23] verwiesen. Diese Implementierung wurde in dieser Arbeit auch verwendet wenn Vergleichsrechnungen mittels eines “unmodifizierten Plane-Wave-Verfahrens” durchgeführt wurden.

3.1.3 Dispersion und ebene-Wellen-Verfahren

Implementierung

Im Rahmen dieser Arbeit wurde keine Implementierung des selbstkonsistenten ebene-Wellen-Verfahrens durchgeführt um damit auch Bandstrukturen von Systemen mit Dispersion zu berechnen, jedoch soll trotzdem kurz aufgezeigt werden, wie dies prinzipiell möglich ist.

Um die Dispersion in das Plane-Wave-Verfahren einzubinden, sollen hier zwei ähnliche Verfahren kurz angerissen werden. Das erste Verfahren ist in Abb. 3.1 schematisch dargestellt. Das Problem, das sich bei der Berechnung mittels Plane-Wave-Verfahren ergibt, ist, dass man den Wert für die Dielektrizitätskonstante ε erst kennt, wenn die Frequenz der Lösung bekannt ist, also das System bereits gelöst ist. Man benötigt allerdings ε auch zum Lösen des Systems.

Das führt dazu, dass man das Problem selbstkonsistent lösen muss. Das heißt man muss eine Lösung finden, bei der bei vorgegebenem ε eine Frequenz ω errechnet wird, so dass anhand der Dispersion $\varepsilon(\omega)$ wieder der ursprüngliche Wert für ε herauskommt. Praktisch bedeutet dies in der Rechnung, dass man unterscheiden muss zwischen ε_{Var} , das hier als vorgegebener Parameter verstanden werden soll, und das dem willkürlich vorgegebenen Wert entspricht, und $\varepsilon_{Dispersion}$, das mittels der Frequenz ω aus der konkreten Dispersionsrelation $\varepsilon_{Dispersion}(\omega)$ bestimmt wird. $\varepsilon_{Dispersion}$ übernimmt hier also die Rolle einer gegebenen Funktion (der Dispersion) und ε_{Var} die Funktion einer Variablen.

Eine selbstkonsistente Lösung hat man also gefunden, wenn gilt:

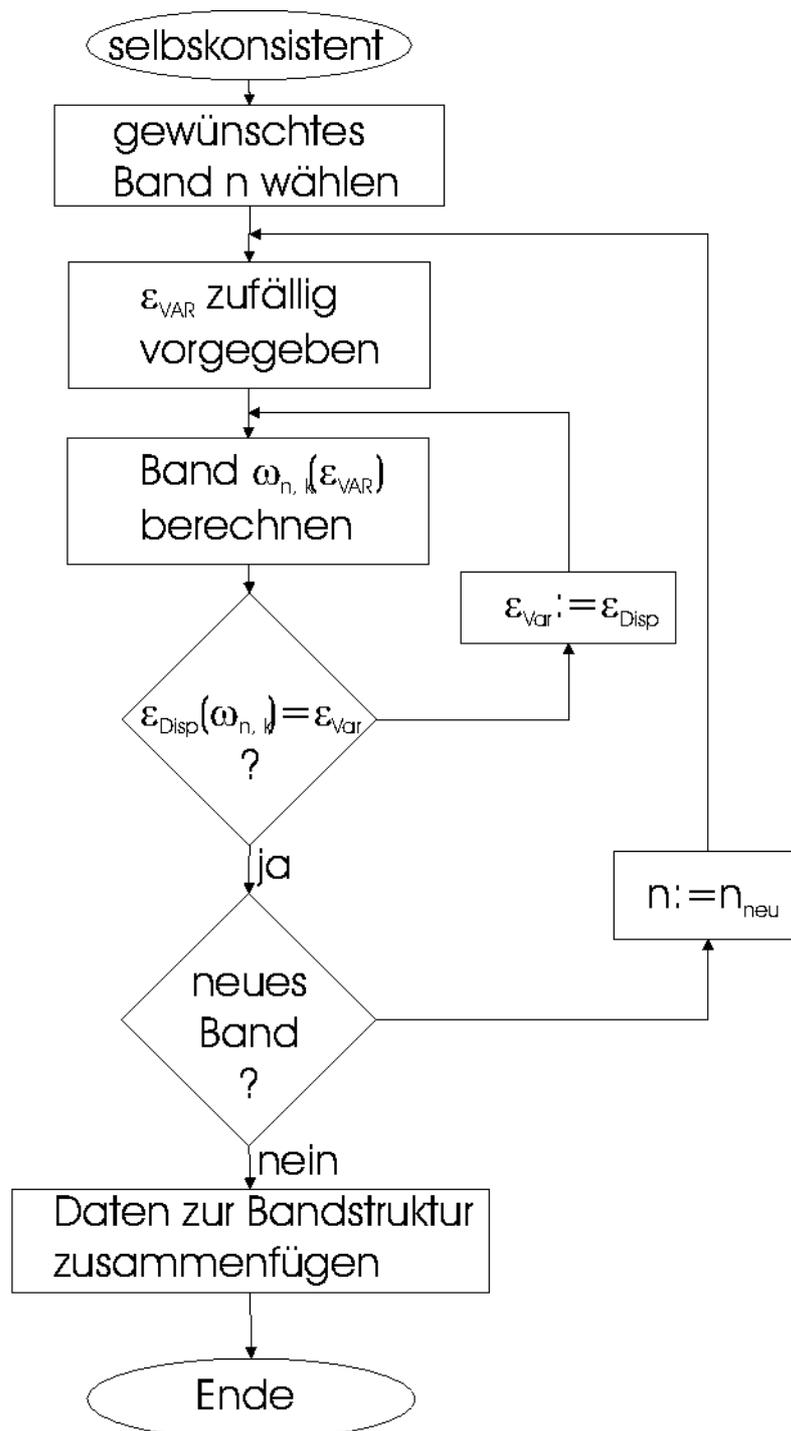


Abbildung 3.1: Flussdiagramm zur selbstkonsistenten Bestimmung der Bandstruktur mittels des Plane-Wave-Verfahrens bei Vorhandensein einer Dispersion $\varepsilon(\omega)$.

$$\varepsilon_{Dispersion}(\omega(\varepsilon_{Var})) = \varepsilon_{Var}, \quad (3.6)$$

wobei $\varepsilon_{Dispersion}$ der gegebenen Dispersion des Materials entspricht und $\omega(\varepsilon_{Var})$ eine numerisch durch das Plane-Wave-Verfahren gegebene Funktion darstellt. Praktisch kann man so vorgehen, dass man für ein bestimmtes Band n , das man berechnen möchte, und gegebenes \vec{k} mit einem Startwert ε_{Var} beginnt. Mittels des Plane-Wave-Verfahrens berechnet man $\omega_{n,\vec{k}}$ und anschließend anhand der Dispersionsrelation $\varepsilon_{Dispersion}(\omega_{n,\vec{k}})$. Stimmt $\varepsilon_{Dispersion}(\omega_{n,\vec{k}})$ innerhalb einer gegebenen Genauigkeit mit ε_{Var} überein, so hat man eine selbstkonsistente Lösung gefunden. Ansonsten startet man einen neuen Durchlauf mit dem neuen Startwert, der üblicherweise dem berechneten Wert für $\varepsilon_{Dispersion}$ entspricht.

Dies entspricht der programmiertechnisch einfachsten (aber nicht notwendigerweise effizientesten) Suche nach der Lösung. Selbstverständlich können auch andere Verfahren verwendet werden, da es sich eigentlich lediglich um die Nullstellensuche der Funktion

$$f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R} \quad (3.7)$$

$$\varepsilon_{Var} \mapsto \varepsilon_{Dispersion}(\omega_{n,\vec{k}}(\varepsilon_{Var})) - \varepsilon_{Var} \quad (3.8)$$

handelt. D.h., man kann prinzipiell auch jedes andere Verfahren zur Nullstellenbestimmung verwenden. Dabei bieten sich hier die Verfahren an, bei denen man mit den wenigstens Berechnungen $\omega_{n,\vec{k}}(\varepsilon_{Var})$ auskommt, da es sich dabei um den numerischen aufwendigsten Teil handelt.

Eine leicht abgeänderte Variante ist in Abb. 3.2 dargestellt. Hier unterscheidet sich das Vorgehen hauptsächlich darin, dass zunächst für einen vorher passend gewählten Bereich von ε die Funktion $\omega_{n,\vec{k}}$ für das n -te Band berechnet wird. Danach wird anhand der berechneten Werte die Nullstelle von (3.7) ermittelt. Diese 2. Methode bietet sich allerdings nur dann an, wenn man verschiedene Dispersionsrelationen (z.B. bedingt durch verschiedene Materialien) berechnen will. Man legt sich somit eine Art Bibliothek von Bandstrukturen für unterschiedliche ε an, die man dann anhand der gegebenen Dispersionsrelation auswertet. Betrachtet man nur eine Dispersionsrelation, so ist das erste Verfahren i.a. deutlich günstiger.

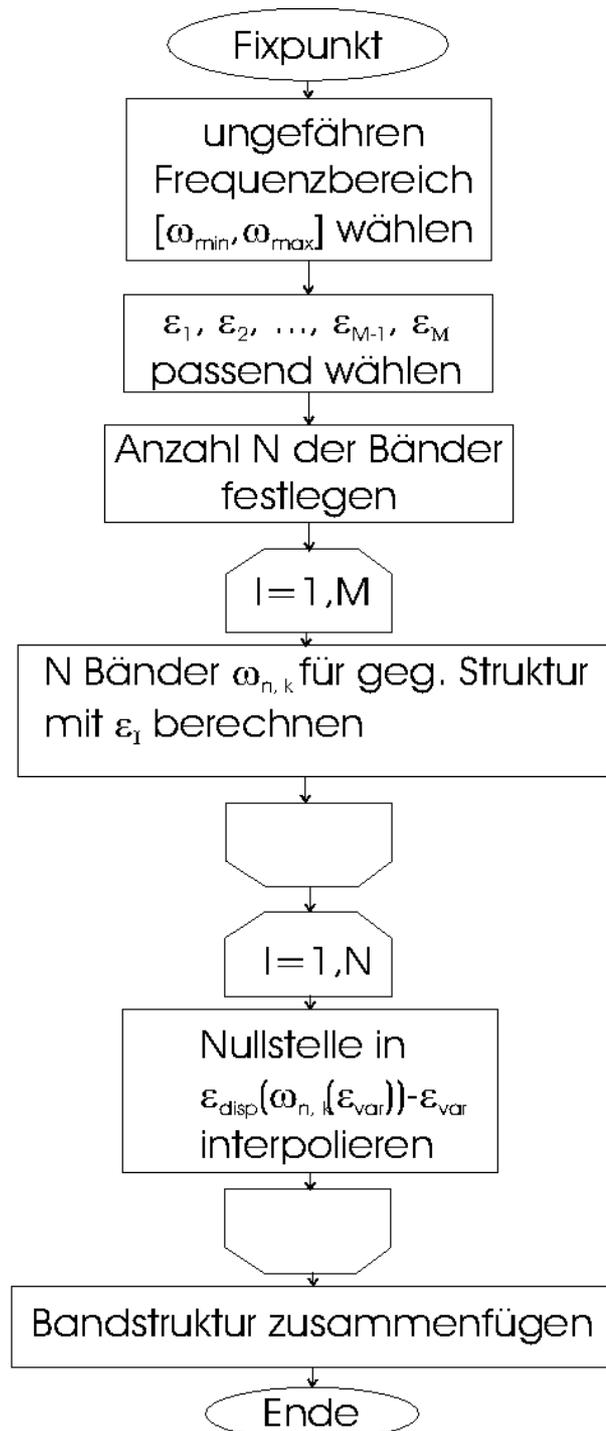


Abbildung 3.2: Flussdiagramm zur Bestimmung der Bandstruktur mittels des ebenen-Wellen-Verfahrens bei Vorhandensein einer Dispersion $\varepsilon(\omega)$. Dazu berechnet man Bandstrukturen für verschiedene ε_{Var} ohne Dispersion und löst anschließend damit numerisch die Fixpunktgleichung $\varepsilon_{Dispersion}(\omega(\varepsilon_{Var})) = \varepsilon_{Var}$.

Auftretende Probleme

Wie bereits in Abschnitt 2.3.2 darauf hingewiesen wurde, bietet dieses Verfahren jedoch einige Probleme, wenn man versucht die Dispersion und die Absorption zu berücksichtigen. Wie gezeigt ist es zwar durchaus möglich, die Dispersion zu integrieren. Aus praktischer Sicht wird dies leider sehr unhandlich, wenn man eine Struktur betrachtet, die nicht nur Dispersion besitzt, sondern auch sowohl Bereiche mit $\varepsilon < 0$ also auch $\varepsilon > 0$. Dann ist der Operator \hat{O} des Systems nicht mehr positiv definit und kann somit auch negative Eigenwerte besitzen. Dadurch treten auch Lösungen mit $\omega^2 < 0$ auf, welche aber hier nicht interessant sind, da sie nicht zur Bandstruktur beitragen. Allerdings zeigt bei der Verwendung des ebenen-Wellen-Verfahrens, dass in dem hier interessanten Fall, nämlich um die Nullstelle in ε , eben genau diese Lösungen immer häufiger auftauchen. Um dies zu umgehen, müsste die Anzahl der betrachteten Lösungen deutlich erhöht werden. Dies trägt allerdings auch nicht zu einer substantiellen Verbesserung der Situation bei und die benötigte Rechenzeit wird deutlich erhöht.

Dies ist jedoch nicht das einzige Problem. Insbesondere wenn – durch die Dispersion bedingt – auch noch eine Nullstelle in ε vorliegt, (genau solche Bereiche sind für die Untersuchungen dieser Arbeit aber entscheidend) wird der Rechenaufwand mittels des Plane-Wave-Verfahrens immer größer, je näher man der Nullstelle kommt. Auch die Stabilität nimmt dabei stark ab. Hier zeigt sich das Problem, dass die Matrix, die durch (3.5) gegeben wird, eine schlechte Konditionierung besitzt. Dies wird hauptsächlich durch den Term $(\frac{1}{\varepsilon})_{\vec{C}'-\vec{C}}$ verursacht. Dieser divergiert, wenn $\omega \rightarrow \omega_{Plasma}$ geht und dadurch wird die Gleichung (3.5) numerisch deutlich schwieriger zu lösen. Dies bedeutet einen um so höheren Rechenaufwand, je mehr sich ε an 0 annähert.

Trotz der genannten Probleme ist es durchaus möglich, die Dispersion im Rahmen eines Plane-Wave-Verfahrens zu behandeln. Und dies wird für Metalle auch teilweise getan ([17], [32]), dann allerdings ohne Berücksichtigung der vorhandenen Absorption.

3.1.4 Absorption

Wie bereits in Abschnitt 2.3.3 angedeutet wurde gilt, dass nicht nur die Dispersion ein Problem darstellt, sondern auch die Tatsache, dass Metalle (insbesondere

auch im Bereich um die Plasmafrequenz ω_{Plasma}) eine nicht zu vernachlässigende Absorption besitzen. Eine Absorption äußert sich durch ein komplexes ε , was wiederum dazu führt, dass der Operator \hat{O} aus (2.6) nicht mehr hermitesch ist. Daraus folgt wiederum, dass die Eigenwerte der Gleichung (2.5) nicht notwendigerweise reell sind (genauer: Teile des Spektrums von \hat{O} müssen auch nicht-reell sein, sonst wäre \hat{O} hermitesch). Damit wird ω i.A. komplex, was physikalisch zeitlich an-, bzw. abschwellenden Lösungen entspricht, von denen aufgrund der Energie nur die zeitlich abschwellenden physikalisch relevant sind. Genauso wie man ein komplexes ω erhalten kann, kann man auch einen komplexen Wellenvektor \vec{k} vorgeben, was dann räumlich anwachsenden, bzw. abfallenden Lösungen entspricht. Solche Lösungen kann man auch für Photonische Kristalle mit Fehlstellen bekommen, bei denen diese dann den räumlich lokalisierten Lösungen entsprechen. Man müsste also, um bei einer einfachen Beschreibung mittels Bandstruktur zu bleiben, sowohl \vec{k} als auch ω als komplex betrachten. Zusätzlich hätte man nur zeitlich stabile (nicht auf- oder abklingende) Moden, wenn $\omega \in \mathbb{R}$ ist, und nur räumlich stabile (nicht auf- oder abklingende) Moden, wenn \vec{k} reell ist. im Allgemeinen empfiehlt es sich allerdings für eine Betrachtung der Absorption zu anderen, später aufgezeigten Verfahren überzugehen.

Aufgrund dieser Probleme und der unter “Dispersion” aufgeführten Probleme wurden keine ausführlicheren Untersuchungen mit Hilfe des ebenen-Wellen-Verfahrens durchgeführt. Allerdings gibt es auch sehr aktuelle Untersuchungen Photonischer Kristalle auch mittels ebener-Wellen-Verfahren [32].

3.2 Modifiziertes Plane-Wave-Verfahren

3.2.1 Motivation

Wie wir im vorherigen Kapitel sehen konnten, ist es mittels des normalen Plane-Wave-Verfahrens durchaus möglich eine Dispersion zu betrachten. Dies ist jedoch nur indirekt möglich. In [24] wird ein Verfahren vorgestellt, das es ermöglicht die Dispersion direkt in ein Plane-Wave-Verfahren zu integrieren. Dieses Verfahren wurde im Rahmen dieser Arbeit nachvollzogen und nachprogrammiert um Untersuchungen damit durchführen zu können.

Der Ansatz besteht darin, aus dem Problem, $\omega(k)$ zu berechnen, ein Problem zu formulieren, bei dem man $k(\omega)$ berechnet. Somit ist schon zu Beginn der

Rechnung die Frequenz und somit auch ε bekannt. Dies gelingt, indem man in (3.5) eine Richtung willkürlich auswählt, etwa die z -Richtung, und dann das Gleichungssystem als ein quadratisches Eigenwertproblem in k_z auffasst. Der Nachteil, mit dem man sich dies erkaufte ist, dass man ein Eigenwertproblem der doppelten Größe des ursprünglichen Problems lösen muss, das auch keine Symmetrie mehr besitzt. Für Details dieses Verfahren sei auf den Anhang A verwiesen.

3.2.2 Testrechnungen

Um zu prüfen, ob das Verfahren funktioniert und korrekt implementiert wurde, wurden einige Beispielrechnungen durchgeführt. Dazu wurden nur Strukturen ohne Dispersion betrachtet, um einen direkten Vergleich mit dem in diesen Fällen gut funktionierenden unmodifizierten ebene-Wellen-Verfahren (dem bereits erwähnten Verfahren von Johnson und Joannopoulos [23]) zu ermöglichen. Eine zusätzlich betrachtete Dispersion bedeutet für das modifizierte Plane-Wave-Verfahren kein zusätzliches Problem oder keinen zusätzlichen Rechenaufwand.

Vakuum

Das einfachste Problem, das auch analytisch lösbar ist, ist das Vakuum. In diesem Fall gilt, dass $\omega = c\|\vec{k}\|$ ist. Somit erhält man die Bandstruktur durch den Schnitt mit dem Kegel, der durch $\omega = c\|\vec{k}\|$ gegeben ist, und der immer wieder in die Brillouin-Zone gefaltet wird.

Die Berechnung mittels des modifizierten Plane-Wave-Verfahrens wurde in alle Raumrichtungen mit den ersten 4 k -Werten durchgeführt, was eine ausreichende Genauigkeit ergab.

Die Ergebnisse dieser Berechnung sind in Abb. 3.3 dargestellt. Wie man sieht, ergibt sich eine sehr gute Übereinstimmung der berechneten Werte mit dem exakten Ergebnis. Dies ist allerdings nicht weiter erstaunlich, da es sich um ein ebene-Wellen-Verfahren handelt, mit dem man die Vakuumlösungen natürlich sehr gut beschreiben kann. Mathematisch äußert sich dies darin, dass die Fouriertransformierte von $\frac{1}{\varepsilon}$ nur den konstanten Beitrag enthält und sich die zu lösenden Gleichungen des Verfahrens damit sehr stark vereinfachen.

Man erkennt aber hier schon sehr gut, warum dieses Verfahren Probleme mit sehr flachen Bändern hat. Da eine sehr kleine Änderung in ω bei einem

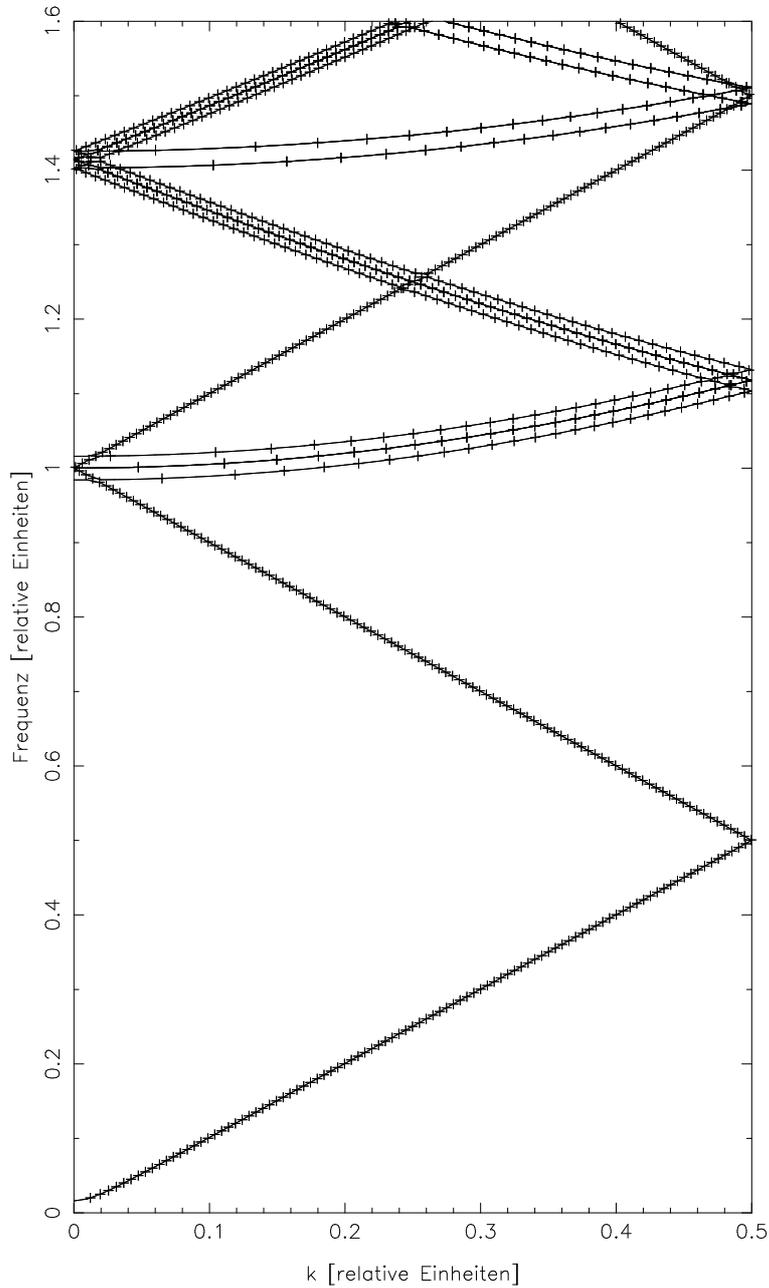


Abbildung 3.3: 3-dimensionale Bandstruktur entlang der Geraden $(\frac{0,1}{2\pi}; 0; k)$. (Da k_x und k_y bei diesem Verfahren nicht beide gleich null sein dürfen, wurde die Gerade leicht in k_x vom Ursprung verschoben.) Die durchgehende Linie ist die exakte Lösung. Die Kreuze entsprechen den mittels des modifizierten Plane-Wave-Verfahrens berechneten Werten.

flachen Band schon eine sehr große Änderung in k_z bewirkt, erhält man bei einem konstanten Raster in ω verhältnismäßig wenig Punkte, die auf flachen Bändern liegen. Man muss also, um flache Bänder gut zu beschreiben, die Berechnungen für ein sehr feines Raster in der Frequenz ω durchführen.

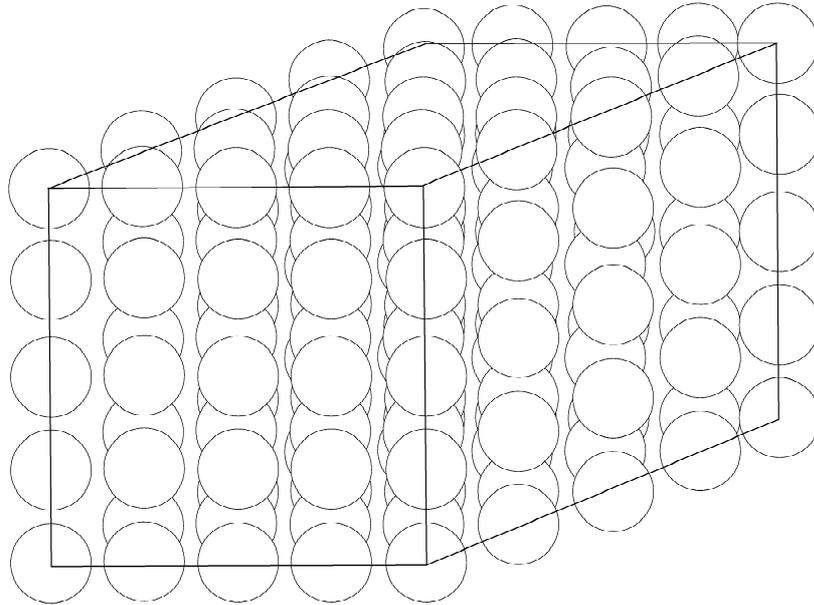


Abbildung 3.4: Kugeln in einer einfach-kubischen Anordnung. ($5 \times 5 \times 5$ Einheitszellen)

Einfach-kubische Struktur

Als nächster Testfall soll nun eine volle 3-dimensionale Struktur betrachtet werden. Damit die Rechnung allerdings nicht zu rechenzeitintensiv wird, wurde hier eine einfach kubische Struktur (Abb 3.4) mit Länge a der Einheitszelle und einer Sphäre mit Radius $r = 0,25a$ und $\varepsilon = 8,9$ im Mittelpunkt der Einheitszelle verwendet. Für die Rechenverfahren bildet dies schon eine ausreichend komplizierte Struktur, um zu testen, ob das Verfahren die richtigen Ergebnisse liefert. Das System ist für ein volles 3-dimensionales System jedoch eines der denkbar einfachsten nicht-trivialen Systeme. Allerdings gibts es schon keine analytischen Ergebnisse mehr, weswegen der Vergleich mit dem unmodifizierten ebenen-Wellen-Verfahren [23] erfolgen soll.

Es ist nicht trivial, mittels dieses Verfahrens eine komplette Bandstruktur zu berechnen. Man weiß vor der eigentlichen Rechnung nie, welcher Wert für k_z bei der Rechnung bestimmt wird, da nur k_x und k_y festgelegt werden können. Dies lässt sich nicht vermeiden, da man die Frequenz ω vorher festgelegt hat. Man kann entweder alle Komponenten von \vec{k} vorgeben und $\omega(\vec{k})$ berechnen, oder man gibt zwei Komponenten von \vec{k} und ω vor und berechnet daraus die fehlende Komponente von \vec{k} . Im ersten Fall liegt das normale (unmodifizierte) Plane-Wave-

Verfahren vor, im zweiten das modifizierte Plane-Wave-Verfahren.

Bandstrukturen entlang der k_z -Richtung sind mittels dieses Verfahrens immer noch gut zu berechnen. Allerdings wird es in anderen Raumrichtungen (also z.B. von einem Symmetriepunkt zu einem anderen) nicht-trivial, die Bandstrukturen zu erhalten, da mit gegebenem k_x und k_y das berechnete k_z einen vorher unbekanntem Wert hat. D.h. \vec{k} liegt irgendwo auf der Geraden mit konstantem k_x und k_y und damit i.a. nicht in der betrachteten Raumrichtung. Aus diesem Grund wird hier für die Testrechnung nur das Band entlang der Richtung $(\frac{0.1}{2\pi}; 0; k)$ betrachtet. Für Bänder entlang anderer Symmetriepunkte müsste man die Bänder aus den berechneten Punkten in der Brillouin-Zone interpolieren, oder das Verfahren wie am Ende des Kapitels erwähnt noch weiter modifizieren. Da aber auch in diesem einfachen Fall der Rechenaufwand extrem groß wird und das Verfahren weitere Mängel aufweist wurde darauf verzichtet. Die wesentlichen Punkte kann man auch schon anhand dieses Teils der Bandstruktur erkennen.

In Abb. 3.5 sind die Ergebnisse der Rechnung mit cut-off-Wert $N = 4$ (also jeweils bis zum vierten \vec{G} in positiver und negativer Richtung in jeder Raumrichtung) gezeigt und mit den Ergebnissen des unmodifizierten ebenen-Wellen-Verfahrens verglichen. Die durchgezogenen Linien sind dabei die Ergebnisse des Standard-Verfahrens, die einzelnen Punkte entsprechen den Ergebnissen des modifizierten ebenen-Wellen-Verfahrens. Auf den Frequenzbereich unterhalb von 0.7 wurde bei der Berechnung verzichtet, da dieser Bereich nur bedingt interessant ist und somit die Punkte im berechneten Bereich mit einem engeren Frequenzraster bei gleicher Rechenzeit gelegt werden können. (Für niedrige Frequenzen nähert sich das Problem immer mehr dem der Ausbreitung im homogenen Medium mit gemitteltem ε an, was im Prinzip ein in der Frequenz umskaliertes Vakuum-Problem ist). Dieser Bereich der Bandstruktur ist zum einen physikalisch nicht sehr interessant und zum anderen funktioniert das Verfahren für diesen Bereich recht zuverlässig. (Es handelt sich genähert immer mehr um eine Vakuum-Berechnung, je niedriger die Frequenz wird.)

Das unterste (abgebildete) Band selbst kann nur zu hoch berechnet werden. Da hier in der gesamten Einheitszelle $\varepsilon > 0$ ist, wird das Energiefunktional $E[\vec{H}]$ für den Grundzustand (also das unterste Band), wie in Abschnitt 2.1.2 gezeigt wurde, minimiert. D.h. die exakte Lösung besitzt die niedrigste Frequenz und eine Näherungslösung muss oberhalb des exakten Grundzustandes liegen.

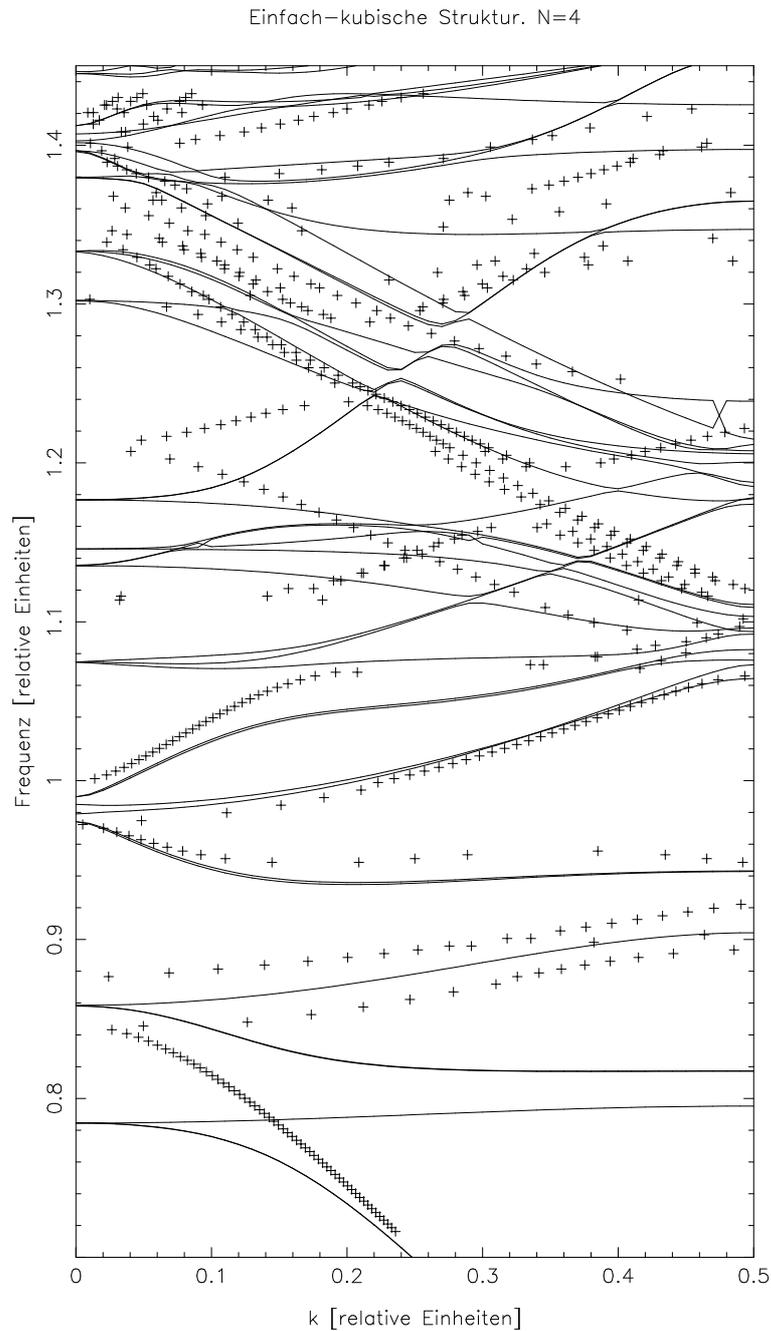


Abbildung 3.5: 3-dimensionale Bandstruktur entlang der Geraden $(\frac{0,1}{2\pi}; 0; k)$ für eine einfach-kubische Struktur mit der Länge a Einheitszelle und einer Sphäre mit Radius $r = 0,25a$ und $\varepsilon = 8,9$ im Zentrum der Einheitszelle. Der cut-off in alle Raumrichtungen des reziproken Gitters beträgt $N = 4$. Es wurden also knapp 1500 ebene Wellen berücksichtigt. Die Linien entsprechen der Berechnung mittels des unmodifizierten ebenen-Wellen-Verfahrens, die Kreuze den Berechnung mittels des implementierten modifizierten Plane-Wave-Verfahrens.

Das zweite. Band, welches das unterste in Abb. 3.5 ist, liegt aber gerade für kleine Werte von k relativ weit oberhalb der mittels des Standardverfahrens bestimmten Werte (in relativen Einheiten ca. 0,06, was einem relativen Fehler von ca. 8% entspricht). Auch dies ist nicht weiter verwunderlich, da der unterste nicht-triviale Zustand am Ursprung der Brillouin-Zone (dem Γ -Punkt) einem sehr stark lokalisierten Zustand innerhalb der dielektrischen Sphäre entspricht. Um diesen mittels ebener Wellen darzustellen, braucht man sehr viele auch stark oszillierende ebene Wellen. Für die höher liegenden Bänder gibt es allerdings keine so einfachen Erklärungen, warum sie bei der Rechnung höher oder auch tiefer als das Ergebnis des Standardverfahrens liegen.

Die nächsthöher liegenden Bänder haben eine zu hoch berechnete Frequenz, auch wenn die Abweichung etwas geringer als bei den beiden untersten abgebildeten Bändern ist. Der Standard-Rechnung am nächsten kommen allerdings die Bänder, die bei ca. $\omega_{rel} = 0,96 - 1$ die Achse $k = 0$ schneiden. Die Bänder, die noch weiter oberhalb liegen, wurden sehr unzureichend beschrieben. Die mittels des modifizierten Plane-Wave-Verfahrens berechneten Bänder liegen teilweise deutlich neben den mittels des Standard-Verfahrens berechneten Bändern. Meistens liegen die berechneten Werte oberhalb der Vergleichsrechnung, in manchen Fällen ist es auch nicht wirklich möglich, die Bänder einander zuzuordnen, da die Struktur der Bänder schwierig zu erkennen ist. Dies liegt daran, dass die höheren Bänder i.a. sehr flach verlaufen, und da das Verfahren diese mittels Schnitten mit $\omega = konst$ bestimmt, erhält man bei sehr flachen Bändern üblicherweise nur wenige und sehr weit auseinanderliegende Punkte eines Bandes. Da aber auch noch gleichzeitig sehr viele Bänder in einem engen Bereich liegen, wird die Zuordnung äußerst schwierig. Um dies zu umgehen, müsste man ein sehr viel dichteres Raster in ω bei der Berechnung verwenden. Allerdings erkennt man auch so schon, dass oberhalb von $\omega \approx 1$ die berechnete Bandstruktur deutlich von der Vergleichsstruktur abweicht. Auch das ist nicht weiter verwunderlich, da man für die Beschreibung höherer Frequenzen mehr ebene Wellen benötigt und somit für höhere Frequenzen die Ergebnisse immer ungenauer werden.

In Abb. 3.6 ist die gleiche Rechnung, allerdings mit einem höheren cut-off, nämlich $N = 6$, gezeigt. Man erkennt hier deutlich, dass das Ergebnis schon viel näher an der Vergleichsrechnung liegt, allerdings noch nicht ganz konvergiert ist.

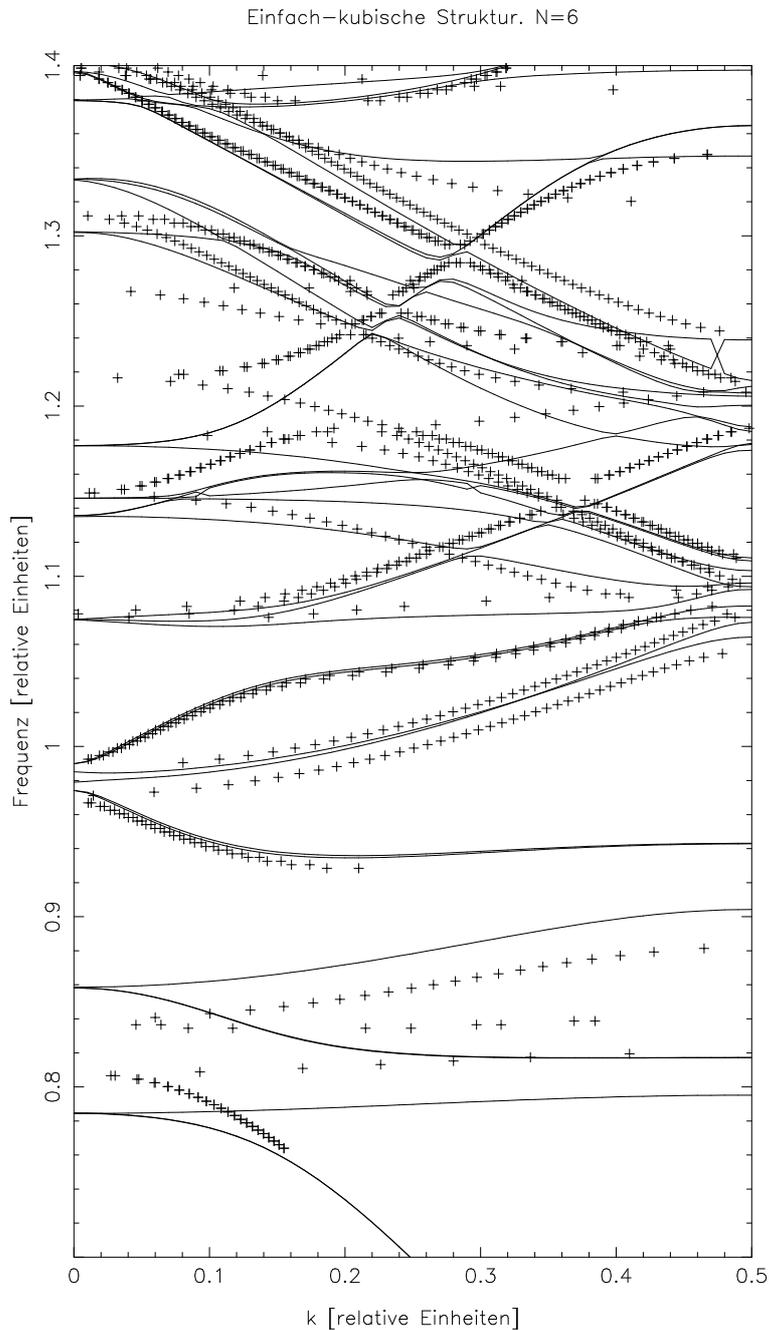


Abbildung 3.6: 3-dimensionale Bandstruktur entlang der Geraden $(\frac{0,1}{2\pi}; 0; k)$ für eine einfach-kubischen Struktur mit Einheitszelle der Länge a und einer Sphäre mit Radius $r = 0,25a$ und $\varepsilon = 8,9$ im Zentrum der Einheitszelle. Der cut-off in alle Raumrichtungen des reziproken Gitters beträgt $N = 6$. Es wurden knapp 4400 ebene Wellen berücksichtigt. Die Linien entsprechen der Berechnung mittels des Plane-Wave-Verfahrens. Die Kreuze entsprechen der Berechnung mittels des modifizierten Plane-Wave-Verfahrens.

Das unterste abgebildete Band liegt immer noch etwas zu hoch, allerdings nur noch ca. um 0,02 relative Einheiten. Die nächsten drei flachen Bänder sind jetzt auch deutlich zu erkennen, auch wenn sie insgesamt noch deutlich verschoben sind und die oberen beiden dieser Bänder noch etwas eng zusammenliegen.

Die Bänder, die $k = 0$ knapp unterhalb von 1 schneiden zeigen schon eine sehr gute Übereinstimmung. Dass die rechte Hälfte des untersten dieser Bänder fehlt, liegt daran, dass dieses Band fast horizontal verläuft und somit mit dieser Methode nur sehr schwer zu erfassen ist. Einen deutlichen Unterschied kann man auch bei den Bändern oberhalb von ca. $\omega = 1,08$ erkennen. Hier ist die Übereinstimmung mit der Vergleichsrechnung zumindestens so gut, dass man die meisten Bänder gut zuordnen kann und diese auch oft schon nah an der Vergleichsrechnung liegen. Allerdings erkennt man auch, dass die Rechnung noch nicht konvergiert ist und eigentlich noch mehr ebene Wellen notwendig wären. Allerdings war die benötigte Zeitdauer für diese Berechnung schon so hoch (> 2 Monate CPU-Zeit), dass auf eine weitere Erhöhung der Zahl der ebenen Wellen verzichtet wurde. Wie bei der Besprechung des Verfahrens im Anhang A gezeigt wird, skaliert die CPU-Zeit mit $O(N^9)$, was bei einem Sprung von $N = 6$ auf $N = 7$ in etwa eine Vervierfachung der Rechendauer erwarten lässt. Weiterhin ist zu vermuten, dass auch mit $N = 7$ das Verfahren noch nicht ausreichend konvergiert ist. Aber auch ohne diese weitergehenden Rechnungen erkennt man, dass das Verfahren prinzipiell funktioniert und in den Bereichen in denen es schon konvergiert ist, gute Übereinstimmungen mit dem Standard-Verfahren liefert.

3.2.3 Zusammenfassung und Ausblick

Es zeigt sich also, dass das Verfahren [24] prinzipiell funktioniert. Um vollständig sicher zu gehen würde man das System noch an weiteren Beispiel-Systemen testen, es zeigt sich jedoch, dass auch diese Alternative zur Betrachtung metallischer Photonischer Kristalle nur bedingt geeignet ist. Zum einen, da Bandstrukturen für die Fragestellung dieser Arbeit nur unzureichend geeignet sind, und da dieses Verfahren im Vergleich zum unmodifizierten ebenen-Wellen-Verfahren sehr zeitintensiv ist und insbesondere auch sehr ungünstig skaliert ($O(N^6)$).

Schon das 3-dimensionale einfach-kubische System sehr rechenzeit-aufwändig. Kompliziertere Systeme lassen den Anspruch an die Anzahl der benötigten ebenen Wellen, und somit der benötigten CPU-Zeit, noch weiter steigen. Dieses Problem

könnte man angehen, indem man versucht auf andere Verfahren zur Berechnung der Eigenwerte auszuweichen. Dies wurde im Rahmen dieser Arbeit mittels IRAM ("implicitly restarted Arnoldi method") [25] versucht. Dieses Verfahren erlaubt es, gezielt Eigenwerte in bestimmten Bereichen (etwa mit kleinstem Betrag oder auf der reellen Achse) zu bestimmen. Leider wird auch dieses Verfahren durch die dichte Besetzung der Matrix, deren Eigenwerte man bestimmen will, sehr zeitintensiv. Die Effizienz dieses Verfahrens hängt sehr stark mit dem verwendeten Preconditioner (einer "Vorbereitungsmatrix", die das Problem hinsichtlich möglichst effektiver Konvergenz transformiert) des Systems zusammen. Dieser bestimmt, wie schnell das System auf die Eigenwerte des betrachteten Bereichs in der komplexen Ebene konvergiert. Es ist leider nicht gelungen einen Preconditioner für dieses Problem zu finden, so dass IRAM eine Alternative zur Berechnung der Eigenwerte darstellt. Die getesteten Standard-Preconditioner führten zu keinem zufriedenstellendem Ergebnis. Einen geeigneten Preconditioner zu finden ist i.a. eine mathematisch untriviale Aufgabe und bedürfte in diesem Fall einer ausführlichen mathematischen Betrachtung. Aufgrund der weiteren Unzulänglichkeiten des Verfahrens (Bandstrukturen geben das Absorptionsverhalten nicht brauchbar wieder) wurde auf diese Untersuchung verzichtet und stattdessen die Zeit in die Umsetzung des FDFD-Verfahrens investiert. (Die Standard-Preconditioner waren für dieses Problem sogar so ungeeignet, dass die mittels IRAM durchgeführten Rechnungen noch zeitintensiver als die Rechnungen mittels einer Standard-Eigenwert-Berechnung waren.)

Es gibt auch noch ein zusätzliches Problem, welches bereits angedeutet wurde: Will man eine volle Bandstruktur rechnen, also nicht nur entlang der k_z -Achse, so ergibt sich das Problem, dass die berechneten Eigenwerte i.a. eben nicht auf der üblicherweise betrachteten Gerade zwischen zwei Symmetriepunkten liegen. Um dieses Problem zu umgehen wären zwei verschiedene Ansätze möglich. Zum einen könnte man ω so variieren, dass der Abstand von $k_z(\omega)$ zu der betrachteten Gerade minimal wird, oder man berechnet die Eigenwerte für ein Raster von Werten k_x , k_y und ω und interpoliert aus den gegebenen Punkten auf die gesuchte Gerade. Dabei ist es allerdings schwierig sicherzustellen, dass man Lösungen in der Nähe des gesuchten Punktes in der Brillouin-Zone erhält.

Eine anderer möglicher Ausweg ist, die Gleichungen nicht willkürlich in die k_z -Richtung aufzulösen. Der entscheidende Punkt, um die Dispersion in das Ver-

fahren einbauen zu können, ist, dass man aus den vier Freiheitsgraden von \vec{k} und ω drei (einer davon ω) festlegt und dann in \vec{k} ein Freiheitsgrad übrig bleibt. Anhand dieses Freiheitsgrades schreibt man das Problem in ein Eigenwertproblem eines größeren Systems um. Allerdings muss dies nicht in den kartesischen Koordinaten k_x , k_y und k_z geschehen. Denkbar wäre auch, die Bandstruktur entlang einer Linie zu berechnen, die zwei Punkte in der Brillouin-Zone, \vec{k}_1 und \vec{k}_2 , linear verbindet. Dann wäre in den jeweiligen Gleichungen

$$\vec{k} = \vec{k}_1 + t(\vec{k}_2 - \vec{k}_1), \quad (3.9)$$

mit dem Parameter t , der dann zwischen 0 und 1 variiert.

Allerdings ist es in diesem Fall etwas komplizierter die Divergenzgleichung $\vec{\nabla} \cdot \vec{H}$ in die Gleichungen wieder einzusetzen. Man kann alternativ allerdings auch statt diese Einsetzung durchzuführen, die Gleichungen wie in (A.6) und (A.7) gegeben betrachten. In diesen tritt der Parameter t bis zu Termen zweiten Ordnung auf (da \vec{k} bis zur zweiten Ordnung auftritt). Die zusätzliche Bedingung $\vec{\nabla} \cdot \vec{H} = 0$ kann dann als zusätzliche Gleichungen betrachtet werden. In dieser Gleichung tritt t auch nur bis zur ersten Ordnung auf, d.h. insgesamt könnten die Gleichungen wieder in der Form

$$0 = Au + tBu - t^2Cu \quad (3.10)$$

geschrieben werden (vgl. Appendix A) und somit mit dem gezeigten Verfahren gelöst werden. Auf diese Weise sollte es möglich sein auch die Bandstruktur entlang anderer Raumrichtungen zu berechnen. Allerdings wird das betrachtete Gleichungssystem dadurch wiederum größer. Statt zwei Komponenten von $\vec{u}_{\vec{k}, \vec{G}}$ müssen drei Komponenten betrachtet werden. Die Anzahl der Gleichungen und Unbekannten steigt also im Vergleich zu der vorgestellten Variante noch einmal um die Hälfte. Das Verfahren wird somit deutlich ineffizienter. Aufgrund des Skalierungsverhaltens $O(N^9)$ der benötigten Rechenzeit mit dem cut-off N (vgl. Appendix A) bedeutet diese Steigerung von N um die Hälfte für die benötigte Rechendauer eine Steigerung um einen Faktor von ca. 40 und eine Steigerung des Speicherbedarfs (Skalierungsverhalten $O(N^6)$) um den Faktor 10.

Für eine noch durchführbare Rechnung müsste man folglich eine Verbindung der beiden Varianten finden, in der man sowohl den freien Parameter von \vec{k} wie

oben wählt, allerdings auch die Divergenzgleichung wieder in die anderen Gleichungen einsetzen kann und die quadratische Struktur der Gleichungen nicht verändert. Ähnlich wie bei der Frage nach einem passenden Preconditioner wurde dies im Rahmen dieser Arbeit nicht versucht, stattdessen wurde ein passenderes Verfahren (FDFD) auf die Photonischen Kristalle übertragen.

Eine Dispersion einzubauen wäre bei diesem Verfahren allerdings sehr einfach, da für jede Einzelrechnung immer der Wert von ω vorgegeben ist. Somit ist auch ε bekannt. Trotzdem erscheint dieses Verfahren nur sehr bedingt geeignet um das vorliegende Problem zu betrachten, denn auch bei diesem Verfahren handelt es sich um eine Plane-Wave-Verfahren, bei dem die Bandstruktur bestimmt werden soll. Im Falle einer Absorption (die bei metallischen Systemen zu erwarten ist) ist eine Bandstruktur nur eine bedingt brauchbare Beschreibung des Systems. Entweder vernachlässigt man dabei die Absorption, oder man muss komplexe Bandstrukturen betrachten, was allerdings auch nur ein unzureichendes Mittel darstellt. Aus diesem Grund sollen auch im Folgenden ebene-Wellen-Verfahren zur Beschreibung metallischer Systeme in dieser Arbeit nicht mehr betrachtet werden.

Weiterhin ist auch hier das Problem nicht gelöst, dass das Verfahren numerisch mit $\varepsilon \approx 0$ Probleme besitzt, da in den Matrizen $\frac{1}{\varepsilon}$ auftaucht, und somit die Matrizen in diesem Bereich schlecht konditioniert sind.

Aus den genannten Gründen sollen andere Methoden betrachtet werden, die nicht auf dem ebene-Wellen-Verfahren beruhen und bei denen auch die Absorption betrachtet werden kann. Zwei dieser Verfahren sollen in den nachfolgenden Kapiteln vorgestellt und diskutiert werden.

Kapitel 4

Transfer-Matrix-Methode

4.1 Motivation und Einführung

Wie in den vorherigen Kapiteln gezeigt wurde, eignen sich Plane-Wave-Verfahren nicht sehr gut, um die physikalischen Eigenschaften von photonischen Kristallen mit Dispersion und Absorption zu beschreiben. Das bekannte und auch verwendete Verfahren, das für diesen Fall eigentlich genau in Frage käme ist die die Transfer-Matrix-Methode [27],[22],[26]. Die Grundidee dieser Methode besteht darin, dass man die Maxwell-Gleichungen im Orts-Frequenz-Raum diskretisiert und dann die Einheitszelle des photonischen Kristalls als Anfangswertproblem in z -Richtung beschreibt.

In dieser Arbeit wurde dabei eine Programm-Version von Pendry als Grundlage verwendet und an die betrachteten Probleme leicht angepasst um die durchgeführten Untersuchungen zu ermöglichen.

Der Vorteil dieses Verfahrens besteht darin, dass die Dispersion ähnlich wie bei dem modifizierten Plane-Wave-Verfahren kein Problem darstellt, da die Rechnung auch hier mit gegebener Frequenz ω durchgeführt wird. Ein weiterer Vorteil besteht darin, dass man mittels der Transfer-Matrix-Methode auch die messtechnisch einfacher zugängliche Größe der Transmission/Reflexion einer endlichen Schichtdicke bestimmen kann. Für die Transfer-Matrix-Methode ist es prinzipiell möglich, die Absorption sehr einfach in die Rechnungen zu integrieren, da diese dadurch realisiert werden kann, dass ε zur komplexen Größe wird.

Auch eine Bandstruktur kann mittels dieses Verfahrens berechnet werden, allerdings gilt auch hier wieder, dass das Absorptionsverhalten des Photonischen

Kristalls nur bedingt mittels einer Bandstruktur beschrieben werden kann.

Das Transfer-Matrix-Verfahren hat jedoch schwerwiegende numerische Probleme, die nur mittels einiger numerischer Manipulation teilweise behoben werden können. In der Literatur wird die Transfer-Matrix-Methode häufig als Verfahren dargestellt, welche das hier gegebene Problem lösen kann (z.B. [32]). In dieser Arbeit wird gezeigt, dass die Transfer-Matrix-Methode jedoch auch schon für nicht absorbierende Systeme numerisch Instabil ist. Für eine Betrachtung eines Systems mit vorhandener Absorption erscheint das Verfahren aus Gründen, die in diesem Kapitel dargelegt werden, gänzlich unbrauchbar.

Zunächst soll das Verfahren kurz vorgestellt werden. Danach wird anhand einer 2-dimensionalen Testrechnung die numerische Instabilität und ihre Auswirkungen auf die Ergebnisse aufgezeigt.

4.2 Die Transfer-Matrix-Methode

Die Grundidee des Verfahrens besteht darin, dass man die betrachtete Einheitszelle im Ortsraum diskretisiert und bei gegebener Frequenz ω an einer Seite ($z = 0$) eine beliebige Feldverteilung vorgibt. Daraus kann man dann für die benachbarte Fläche mit $z = konst$ die Felder mittels der diskretisierten Maxwell-Gleichungen berechnen und so Ebene für Ebene die Felder der Einheitszelle berechnen, bis man nach N Schritten auf der anderen Seite angelangt ist. Zerlegt man jetzt das vorgegebene Feld und das Feld auf der anderen Seite der Einheitszelle, so kann man daraus eine Matrix aufstellen, die sogenannte Transfer-Matrix, die die Felder auf beiden Seiten in Beziehung zueinander setzt. Aus dieser Transfer-Matrix kann man z.B. (mit ebenen Wellen als Basisfunktionen) die Transmission und Reflexion des photonischen Kristalls bestimmen.

Ausgangspunkt sind auch hier wieder die beiden Rotationsgleichungen der Maxwell-Gleichungen (2.1b) (allerdings in einem anderen Einheitensystem, so dass hier die Faktoren μ_0 und ε_0 auftauchen), die nun komponentenweise betrachtet werden:

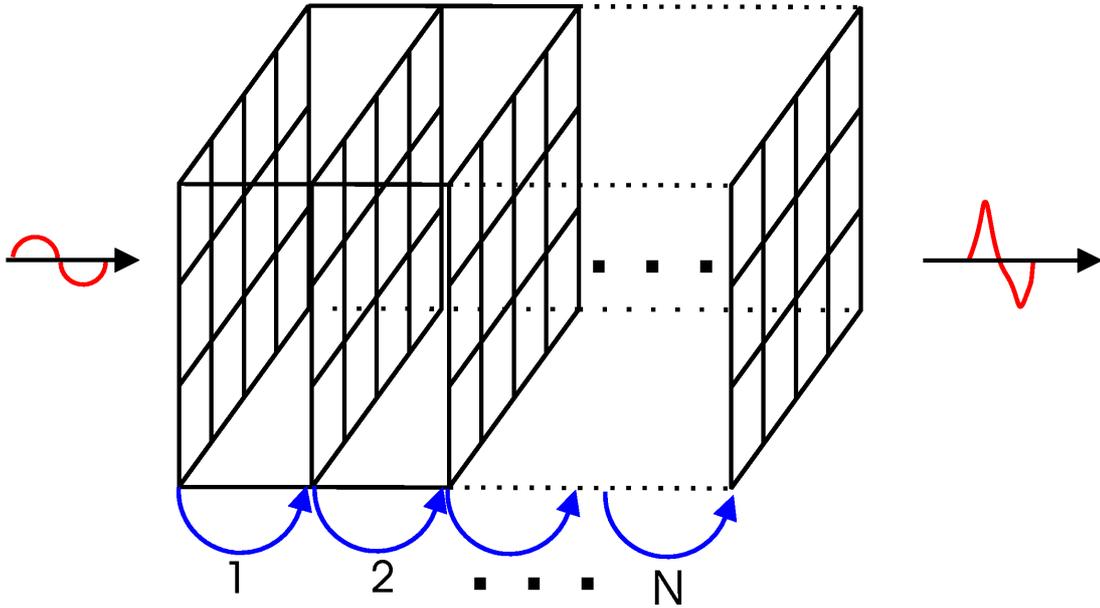


Abbildung 4.1: Die Transfer-Matrix-Methode: An einem Ende der Zelle ($z = 0$) wird ein Feld vorgegeben und dann jeweils daraus das Feld der nächsten Ebene mit $z = \text{konst}$ berechnet. Aus dem Vergleich der Felder an den beiden Enden der Zelle kann die Transmission/Reflexion oder auch die Bandstruktur berechnet werden.

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} = -\mu_0 \mu(\vec{r}) \frac{\partial}{\partial t} \vec{H}(\vec{r}, t) \quad (4.1)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{H} = \varepsilon_0 \varepsilon(\vec{r}) \frac{\partial}{\partial t} \vec{E}(\vec{r}, t). \quad (4.2)$$

Die Felder $\vec{H}(\vec{r}, t)$ und $\vec{E}(\vec{r}, t)$ werden in Fourier-Moden zerlegt

$$\vec{H}(\vec{r}, t) = \vec{H}(\vec{r}) e^{-i\omega t} \quad (4.3)$$

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \vec{E}(\vec{r}) e^{-i\omega t} \quad (4.4)$$

und damit erhält man aus den Rotationsgleichungen komponentenweise:

$$\begin{aligned}
\partial_y E_z - \partial_z E_y &= i\omega\mu_0\mu(\vec{r})H_x(\vec{r}) \\
\partial_z E_x - \partial_x E_z &= i\omega\mu_0\mu(\vec{r})H_y(\vec{r}) \\
\partial_x E_y - \partial_y E_x &= i\omega\mu_0\mu(\vec{r})H_z(\vec{r})
\end{aligned} \tag{4.5}$$

$$\begin{aligned}
\partial_y H_z - \partial_z H_y &= -i\omega\varepsilon_0\varepsilon(\vec{r})E_x(\vec{r}) \\
\partial_z H_x - \partial_x H_z &= -i\omega\varepsilon_0\varepsilon(\vec{r})E_y(\vec{r}) \\
\partial_x H_y - \partial_y H_x &= -i\omega\varepsilon_0\varepsilon(\vec{r})E_z(\vec{r}).
\end{aligned} \tag{4.6}$$

Die Gleichungen (4.5) bzw. (4.6) kann man nun nach H_z , bzw. E_z umstellen und erhält damit:

$$\begin{aligned}
H_z &= \frac{1}{i\omega\mu_0\mu(\vec{r})} (\partial_x E_y - \partial_y E_x) \\
E_z &= -\frac{1}{i\omega\varepsilon_0\varepsilon(\vec{r})} (\partial_x H_y - \partial_y H_x).
\end{aligned}$$

Dies setzt man nun wieder in die übrigen Gleichungen ein und löst nach den partiellen Ableitungen in z -Richtung auf. Dann erhält man:

$$\begin{aligned}
\partial_z E_y &= \partial_y \left(-\frac{1}{i\omega\varepsilon_0\varepsilon(\vec{r})} (\partial_x H_y - \partial_y H_x) \right) - i\omega\mu_0\mu(\vec{r})H_x(\vec{r}) \\
\partial_z E_x &= \partial_x \left(-\frac{1}{i\omega\varepsilon_0\varepsilon(\vec{r})} (\partial_x H_y - \partial_y H_x) \right) + i\omega\mu_0\mu(\vec{r})H_y(\vec{r}) \\
\partial_z H_y &= \partial_y \left(-\frac{1}{i\omega\mu_0\mu(\vec{r})} (\partial_x E_y - \partial_y E_x) \right) + i\omega\varepsilon_0\varepsilon(\vec{r})E_x(\vec{r}) \\
\partial_z H_x &= \partial_x \left(-\frac{1}{i\omega\mu_0\mu(\vec{r})} (\partial_x E_y - \partial_y E_x) \right) - i\omega\varepsilon_0\varepsilon(\vec{r})E_y(\vec{r}).
\end{aligned}$$

Betrachtet man diese Gleichungen genauer, so erkennt man, dass man nun quasi die Maxwell-Gleichungen in eine Evolutionsgleichung des Vierervektors (E_x, E_y, H_x, H_y) in z -Richtung umgeschrieben hat. Auf der rechten Seite kommen nur Ableitungen in x - oder y -Richtung vor, so dass man, wenn man die Felder auf einer Fläche mit $z = konst$ kennt, die Gleichungen als Anfangswertproblem betrachten und in z -Richtung lösen kann.

Bei der Transfer-Matrix-Methode geschieht dies dadurch, dass man das Problem auf einem endlichen Gitter betrachtet und die Ableitungen auf diesem Gitter diskretisiert. Für die weiteren Betrachtungen gehen wir von einem rechtwinkligen Gitter (und somit auch einer rechtwinkligen Einheitszelle) aus. Dies sieht zwar auf den ersten Blick wie eine Einschränkung aus, allerdings kann man viele Probleme (solche mit einer Gitter-Topologie, die der des rechtwinkligen Gitters entspricht) auf ein Problem mit rechtwinkligem Gitter transformieren. (Siehe hierzu z.B. [26]) Für die im Rahmen dieser Arbeit betrachteten Probleme spielt dies allerdings auch keine Rolle, da es sich bei den betrachteten Problemen um solche mit rechtwinkliger Einheitszelle handelt.

Für eine genauere Erläuterung der konkreten Diskretisierung der Gleichungen sei ebenfalls auf [26] verwiesen und es sei nur das Ergebnis zitiert. Mit den Vektoren \vec{g}_x , \vec{g}_y und \vec{g}_z sei der Verbindungsvektor zwischen zwei benachbarten Gitterpunkten in die x -, y -, bzw. z -Richtung bezeichnet und l_x , l_y bzw. l_z sei der Abstand zwischen zwei benachbarten Gitterpunkten in der jeweiligen Raumrichtung. Weiter führt man das reduzierte Magnetfeld

$$\vec{H}' = \frac{i}{l_x \omega \varepsilon_o} \vec{H}$$

ein und erhält so die Gleichungen:

$$\begin{aligned} E_x(\vec{r} + \vec{g}_z) = & E_x(\vec{r}) + \frac{l_z^2 \omega^2}{c^2} \mu(\vec{r}) H'_y(\vec{r}) \\ & + \frac{l_z^2}{l_x \varepsilon(\vec{r})} \left(\frac{H'_y(\vec{r} - \vec{g}_x) - H'_y(\vec{r})}{l_x} - \frac{H'_x(\vec{r} - \vec{g}_y) - H'_x(\vec{r})}{l_y} \right) \\ & - \frac{l_z^2}{l_x \varepsilon(\vec{r} + \vec{g}_x)} \left(\frac{H'_y(\vec{r}) - H'_y(\vec{r} + \vec{g}_x)}{l_x} \right. \\ & \quad \left. - \frac{H'_x(\vec{r} + \vec{g}_x - \vec{g}_y) - H'_x(\vec{r} + \vec{g}_x)}{l_y} \right) \end{aligned} \quad (4.7)$$

$$\begin{aligned}
E_y(\vec{r} + \vec{g}_z) = & E_y(\vec{r}) - \frac{l_z^2 \omega^2}{c^2} \mu(\vec{r}) H_x'(\vec{r}) \\
& + \frac{l_z^2}{l_y \varepsilon(\vec{r})} \left(\frac{H_y'(\vec{r} - \vec{g}_x) - H_y'(\vec{r})}{l_x} - \frac{H_x'(\vec{r} - \vec{g}_y) - H_x'(\vec{r})}{l_y} \right) \\
& - \frac{l_z^2}{l_y \varepsilon(\vec{r} + \vec{g}_y)} \left(\frac{H_y'(\vec{r} - \vec{g}_x + \vec{g}_y) - H_y'(\vec{r} + \vec{g}_y)}{l_x} \right. \\
& \quad \left. - \frac{H_x'(\vec{r}) - H_x'(\vec{r} + \vec{g}_y)}{l_y} \right)
\end{aligned} \tag{4.8}$$

$$\begin{aligned}
H_x'(\vec{r} + \vec{g}_z) = & H_x(\vec{r}) + \varepsilon(\vec{r} + \vec{g}_z) E_y(\vec{r} + \vec{g}_z) \\
& - \frac{c^2}{l_x \omega^2 \mu(\vec{r} - \vec{g}_x + \vec{g}_z)} \left(\frac{E_y(\vec{r} + \vec{g}_z) - E_y(\vec{r} - \vec{g}_x + \vec{g}_z)}{l_x} \right. \\
& \quad \left. - \frac{E_x(\vec{r} - \vec{g}_x + \vec{g}_y + \vec{g}_z) - E_x(\vec{r} - \vec{g}_x + \vec{g}_z)}{l_y} \right) \\
& + \frac{c^2}{l_x \omega^2 \mu(\vec{r} + \vec{g}_z)} \left(\frac{E_y(\vec{r} + \vec{g}_x + \vec{g}_z) - E_y(\vec{r} + \vec{g}_z)}{l_x} \right. \\
& \quad \left. - \frac{E_x(\vec{r} + \vec{g}_y + \vec{g}_z) - E_x(\vec{r} + \vec{g}_z)}{l_y} \right)
\end{aligned} \tag{4.9}$$

$$\begin{aligned}
H_y'(\vec{r} + \vec{g}_z) = & H_y(\vec{r}) - \varepsilon(\vec{r} + \vec{g}_z) E_x(\vec{r} + \vec{g}_z) \\
& - \frac{c^2}{l_y \omega^2 \mu(\vec{r} - \vec{g}_y + \vec{g}_z)} \left(\frac{E_y(\vec{r} + \vec{g}_x - \vec{g}_y + \vec{g}_z) - E_y(\vec{r} - \vec{g}_y + \vec{g}_z)}{l_x} \right. \\
& \quad \left. - \frac{E_x(\vec{r} + \vec{g}_z) - E_x(\vec{r} - \vec{g}_y + \vec{g}_z)}{l_y} \right) \\
& + \frac{c^2}{l_y \omega^2 \mu(\vec{r} + \vec{g}_z)} \left(\frac{E_y(\vec{r} + \vec{g}_x + \vec{g}_z) - E_y(\vec{r} + \vec{g}_z)}{l_x} \right. \\
& \quad \left. - \frac{E_x(\vec{r} + \vec{g}_y + \vec{g}_z) - E_x(\vec{r} + \vec{g}_z)}{l_y} \right).
\end{aligned} \tag{4.10}$$

In dem normalerweise betrachteten Fall, dass $\mu(\vec{r}) = 1$ ist, vereinfachen sich die Formeln für $H_x(\vec{r} + \vec{g}_z)$ und $H_y(\vec{r} + \vec{g}_z)$.

Betrachtet man die Formeln, so erkennt man, dass man bei gegebenen Feldern auf einer Ebene mit $z = konst$ das elektrische Feld im benachbarten Punkt in z -Richtung anhand des elektrischen Feldes an diesem Punkt und den magnetischen Feldern auf der gegebenen Ebene explizit berechnen kann. Das magnetische Feld eines in z -Richtung benachbarten Punktes kann man anhand des magnetischen Feldes des Ausgangspunktes und den elektrischen Feldern der Zielebene berechnen.

Das Vorgehen ist so, dass man bei gegebenen Feldern auf der Anfangsebene senkrecht zur z -Richtung zunächst E_x und E_y auf der benachbarten Ebene berechnet. Aus diesen E_x und E_y der benachbarten Ebene und den Werten für H_x und H_y auf der Ausgangsebene wird nun H_x und H_y auf der benachbarten Ebene berechnet. Diese Berechnungen können durch die obigen Formeln explizit durchgeführt werden. Es müssen also keine Gleichungssysteme gelöst werden, sondern lediglich die Werte in die Formeln eingesetzt werden. Für Punkte in den Gleichungen, die dann formal in x - oder y -Richtung außerhalb der Einheitszelle liegen, verwendet man die Bloch-Bedingung in x - bzw. y -Richtung, da k_x und k_y vorgegeben und somit bekannt sind.

4.2.1 Transmission/Reflexion

Bei einer endlich dicken Schicht kann auch bei gegebener Frequenz ω die Transmission bzw. Reflexion entlang einer Raumrichtung aus der Transfer-Matrix berechnet werden. Dazu gibt man entsprechend der Vakuumausbreitung k_x und k_y vor. Im Falle des senkrechten Einfalls entlang der z -Richtung ist dies z.B. $k_x = k_y = 0$. Man hat nun einen einfallenden Lichtstrahl und daraus ergibt sich das reflektierte und transmittierte Licht. In Abb. 4.2 ist die Bezeichnung schematisch dargestellt. Man unterscheidet ob das Licht von $z = -\infty$ oder $z = +\infty$ kommt und bei normiertem Lichteinfall erhält man daraus die entsprechenden Matrixgrößen TMM, TMP, TPM und TPP. Diese Matrix-Größen kann man sich Teilmatrizen einer endlichen Streumatrix vorstellen. Dabei bezeichnet der zweite Buchstabe die Orientierung (nach $+z$: **P**(lus) oder nach $-z$: **M**(inus)) des gestreuten Lichtes. Analog dazu gibt der letzte Buchstabe die Orientierung der einlaufenden Welle an.

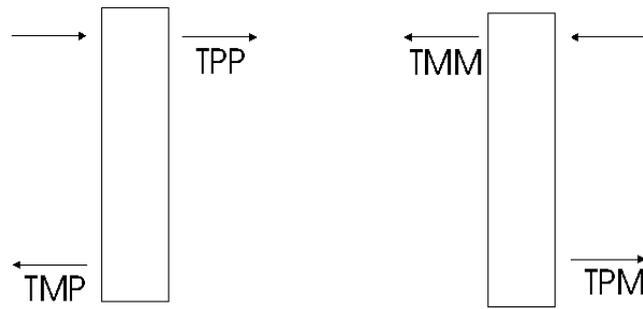


Abbildung 4.2: Schematische Aufteilung und Bezeichnung der reflektierten bzw. transmittierten Moden bei jeweils vorgegebener einlaufender Welle.

Die Berechnung dieser Größen wird aber üblicherweise so durchgeführt, dass man TPP bzw. TMM als eine auslaufende ebene Welle vorgibt, und mittels der Gleichungen (4.7) - (4.10) rechnet man nun quasi "rückwärts" durch die gegebene Schicht und erhält stattdessen die Matrixgrößen TPP^{-1} , $TPP^{-1}TMP$, TMM^{-1} und $TMM^{-1}TPM$, aus denen man dann wiederum TMM , TPM , TMP und TPP bestimmen kann (siehe Abb 4.3). Aus diesen kann man wiederum bei geeigneter Wahl der Basisfunktionen (ebene Wellen) die Transmission/Reflexion in der entsprechenden Richtung ablesen.

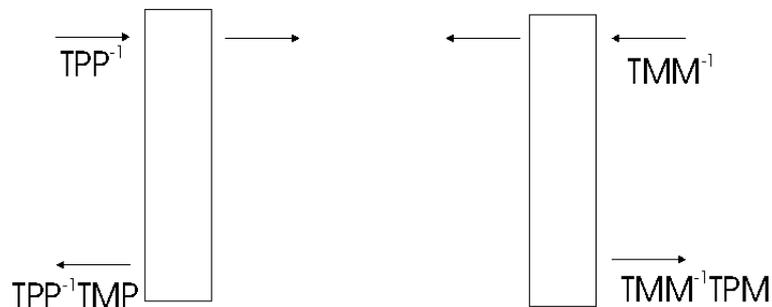


Abbildung 4.3: Schematische Aufteilung und Bezeichnung der reflektierten, bzw. transmittierten Moden bei jeweils vorgegebener auslaufender Welle.

Der Vorteil, die Schicht rückwärts zu durchlaufen und die daraus erhaltenen Matrizen zu invertieren, ist, dass numerisch anwachsende Moden damit beim Invertieren zu numerisch abklingenden Moden werden. Allerdings funktioniert auch dies nur bedingt, wie noch genauer gezeigt werden soll. Problematisch wird dies jedoch im Falle einer echten Absorption, da hier ja gerade das exponentielle Auf- bzw. Abklingen von Interesse ist.

Bedingt durch diese numerisch ansteigenden Moden ist es nur möglich eine

begrenzte Schichtdicke zu betrachten. Deshalb wird für größere Schichtdicken die Transmission/Reflexion berechnet, indem man die Schichtdicke verdoppelt, indem man zweimal eine Schicht mit bekannter Transmission/Reflexion betrachtet und dann mittels Mehrfach-Reflexionen der beiden Schichten daraus die Transmission/Reflexion der gesamten Schicht berechnet. So erhält man z.B. aus einer Schicht mit einer Einheitszelle durch dreio Verdopplungen bereits die Reflexion/Transmission für eine Schichtdicke von acht Einheitszellen.

4.3 Beispielrechnung

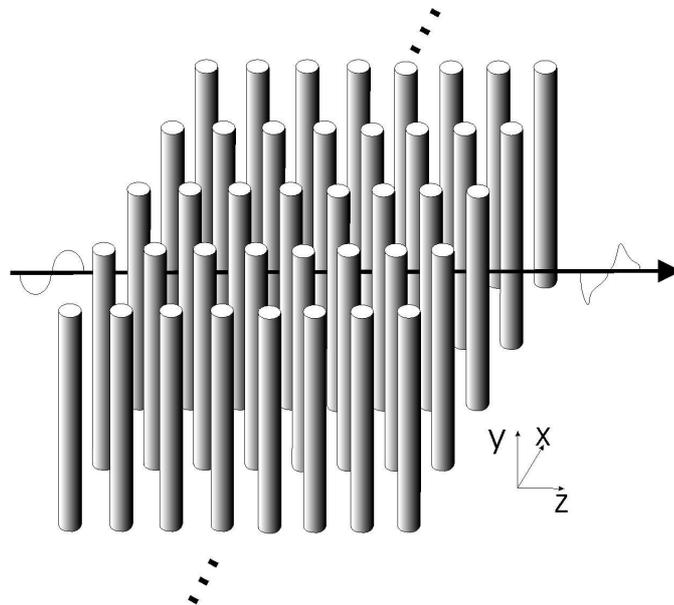


Abbildung 4.4: Struktur des 2-dimensionalen Photonischen Kristalls mit quadratisch angeordneten Zylindern und mit einer Schichtdicke von acht Schichten in z -Richtung. (In x -Richtung sind fünf Einheitszellen gezeigt.)

Für die Berechnungen mittels der Transfer-Matrix-Methode wird hier ein 2-dimensionaler Photonischer Kristall mit einer quadratischen Anordnung von Zylindern mit $\varepsilon = 8,9$ in Luft und mit Verhältnis $\frac{r}{a} = 0,2$ zwischen Radius r und Abstand a der Zylinder verwendet (Abb. 4.4). Für das Diskretisierungsgitter wurde ein $25 \times 1 \times 25$ Gitter verwendet.

Das Ergebnis dieser Rechnung ist in Abb. 4.5 und Abb. 4.6 gezeigt. Dabei ist jeweils das Transmissionsspektrum in z -Richtung für eine Schicht in z -Richtung

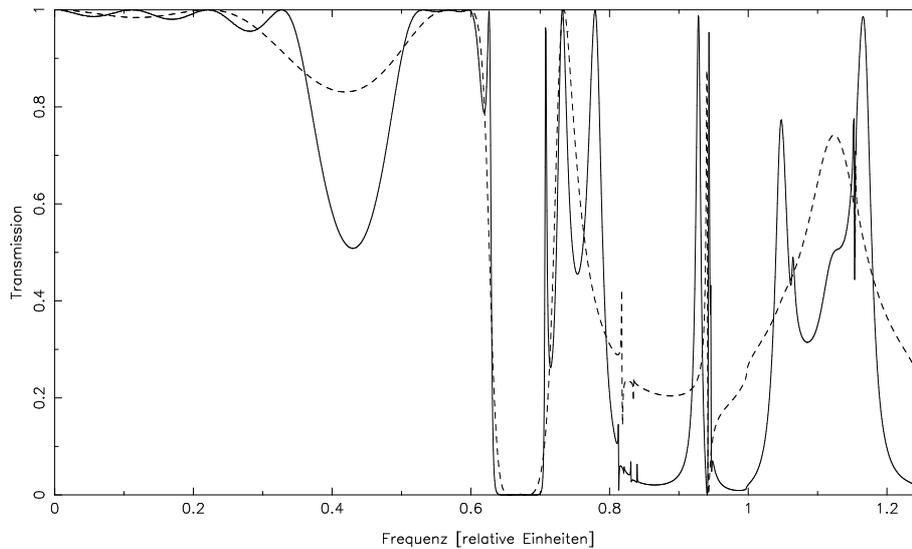


Abbildung 4.5: Transmissionspektrum der S-Polarisationsrichtung (\vec{E} senkrecht zu den Zylindern) der Struktur aus Abb. 4.4 berechnet mit einem $25 \times 1 \times 25$ -Gitter. Die gestrichelte Linie entspricht einer Schicht, die durchgehende Linie acht Schichten.

(gepunktet), sowie für 8 Schichten in z -Richtung (durchgezogene Linie) gezeigt. Abb. 4.5 zeigt dabei die S-Polarisation und Abb. 4.6 die P-Polarisation. In den Spektren für 8 Schichten erkennt man deutlich mehr Struktur und mehr Minima und Maxima. Dies liegt an der deutlich erhöhten Zahl der Mehrfachreflexionen. Ebenso erkennt man, dass die Minima deutlicher ausgeprägt sind, als bei nur einer Schicht. Dies hat die Ursache darin, dass eine Frequenz, die sich im unendlichen Kristall nicht ausbreiten kann, in einem endlichen Kristall eine endliche Eindringtiefe besitzt. D.h. je dünner der Kristall, desto höher ist der Feldanteil, der der anderen Seite noch ankommt.

Es wurden weiterhin für die meisten Rechnungen 8 Schichten Dicke gewählt, da dies eine Zahl ist, die sich einfach durch mehrfaches Verdoppeln erreichen lässt (drei Verdopplungen) und 8 Schichten bereits dick genug sind um die meisten abklingenden Moden bereits fast vollständig, oder zumindestens sehr deutlich verschwinden zu lassen, aber nicht so Dick, dass man nicht mehr unterscheiden kann wie stark die Minima (und damit die Bandlücken) ausgeprägt sind. Weiterhin wird bei zu häufiger Verdopplung auch das Verfahren der Berechnung der Mehrfachstreuung irgendwann instabil, da sich numerisches Rauschen immer weiter aufschaukelt. Betrachtet man sich unterschiedlich Dicke Schichten, so sind die

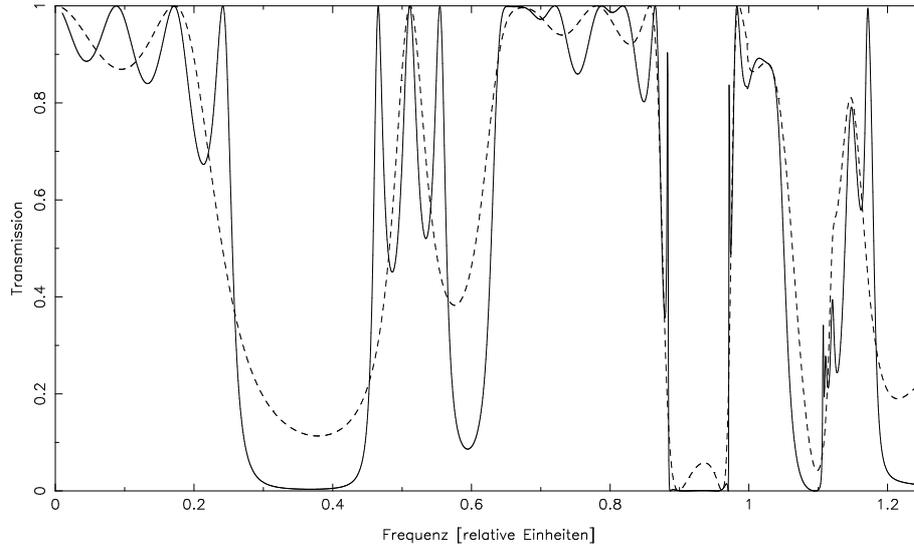


Abbildung 4.6: Transmissionspektrum der P-Polarisationsrichtung (\vec{E} parallel zu den Zylindern) der Struktur aus Abb 4.4 berechnet mit einem $25 \times 1 \times 25$ Gitter. Die gestrichelte Linie entspricht einer Schicht, die durchgehende Linie acht Schichten.

Unterschiede der Spektren sowieso eher in den Details zu suchen. Es ändern sich eigentlich nur die Modulationen in den Peaks und wie stark die Minima ausgeprägt sind. Dies kann auch schon im Vergleich einer Schicht mit 8 Schichten erkennen.

Die Minima liegen dort, wo die Bandstruktur entlang der z -Achse Lücken besitzt. Bei der P-Polarisation (\vec{E} senkrecht zu den Zylindern, also \vec{E} in x -Richtung) ist das erste tiefe Minimum bei $\omega_{rel} \approx 0,3 - 0,4$ tiefer, breiter und auch bei einer niedrigeren Frequenz als bei der S-Polarisation. Das kann man anhand der Bandstruktur auch erwarten, da dieses Band tiefer liegt und die Bandstruktur auch eine breitere Lücke aufweist. Dies führt dazu, dass die Frequenzen in dieser Lücke weit von Bändern entfernt sind und somit auch i.a. sehr schnell abklingen. Dabei besitzen diese Frequenzen somit eine sehr niedrige Transmission besitzen.

Messungen zu einer solchen Struktur wurden in [29] durchgeführt, allerdings entspricht die Auflösung dieser Messung gerade der Lage der ersten beiden Minima, welche in absolute Einheiten umgerechnet auch relativ gut übereinstimmen. Einen Vergleich findet man in [26]. Allerdings ist anzumerken, dass anhand der Auflösung der Mikrowellen-Messung nur die ungefähre Lage der beiden niedrigsten Minima (z.B. bei der S-Polarisation $\omega_{rel} \approx 0,4$ und $\omega_{rel} \approx 0,65$). Dabei

konnte in der Messung die Modulation nicht wirklich aufgelöst werden und durch die Ungenauigkeit ist außer der groben Lage bei den relativen Frequenzen und dem Vergleich wie stark diese Minima in den Polarisierungen jeweils ausgeprägt sind kein weiterer Vergleich möglich. Sowohl die Lage der Minima als auch die Ausprägung stimmt innerhalb des von der Messgenauigkeit vorgegebenen Rahmens gut überein. Eine genauere Betrachtung ist anhand der Messung in [29] nicht sinnvoll und es soll deshalb darauf verzichtet werden.

4.4 Numerische Instabilität

Im Prinzip hätte man mit der Transfer-Matrix-Methode ein Verfahren, welches sich für die gegebene Problemstellung sehr gut verwenden ließe. Die Vorteile des Verfahrens sind, dass man eine relativ direkt zugängliche Messgröße berechnet, man endliche Schichten betrachten kann, die Frequenz bei jeder Rechnung gegeben ist und man so ohne Probleme auch Materialien mit Dispersion betrachten kann.

Lediglich eine Nullstelle in der Dispersionsrelation $\varepsilon(\omega)$ ist problematisch, da in den Gleichungen ε im Nenner auftritt und somit diese für $\varepsilon = 0$ nicht mehr definiert sind bzw. für ein sehr kleines ε die numerischen Eigenschaften sehr schlecht werden. Allerdings gibt es auch noch ein viel gravierenderes Problem dieses Verfahrens. Dieses Problem erkennt man bei dem Versuch zu testen, ob das in Abb. 4.5 und 4.6 gezeigte Spektrum bereits konvergiert ist, oder ob man das Raumgitter weiter verfeinern muss.

Betrachtet man das Spektrum für die S-Polarisation und erhöht nun die Anzahl der Raum-Gitter-Punkte, so würde man erwarten, dass die Genauigkeit der Rechnungen sich insbesondere für hohe Frequenzen verbessert, da die Näherung der Ableitungen durch finite Differenzen immer genauer wird. Allerdings beobachtet man hier etwas völlig anderes, wie man in Abb 4.7 erkennen kann.

Insbesondere bei niedrigen Frequenzen (bis ca. $\omega_{rel} = 0,6$), aber auch bei höheren Frequenzen ($\omega_{rel} \approx 1.1$) wird das Ergebnis von einem Rauschen überlagert. Dieses Rauschen wird um so stärker, je weiter man die Zahl der Gitterpunkte erhöht. Betrachtet man das gleiche Spektrum für ein $29 \times 1 \times 29$ Gitter (Abb 4.8), so ist das Spektrum nur noch zu erahnen und die Transmissionswerte sind teilweise deutlich größer als 1 (was physikalisch nicht möglich ist). Noch stärker

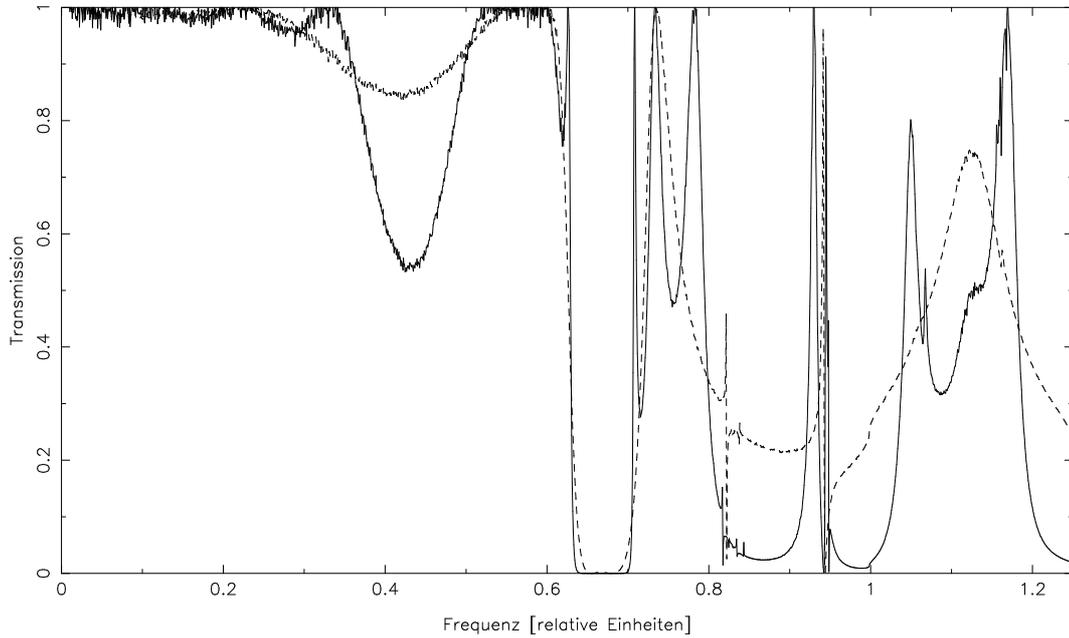


Abbildung 4.7: Transmissionspektrum der S-Polarisationsrichtung (\vec{E} senkrecht zu den Zylindern) der Struktur aus Abb 4.4 berechnet mit einem $27 \times 1 \times 27$ -Gitter. Die gestrichelte Linie entspricht einer Schicht, die durchgehende Linie acht Schichten.

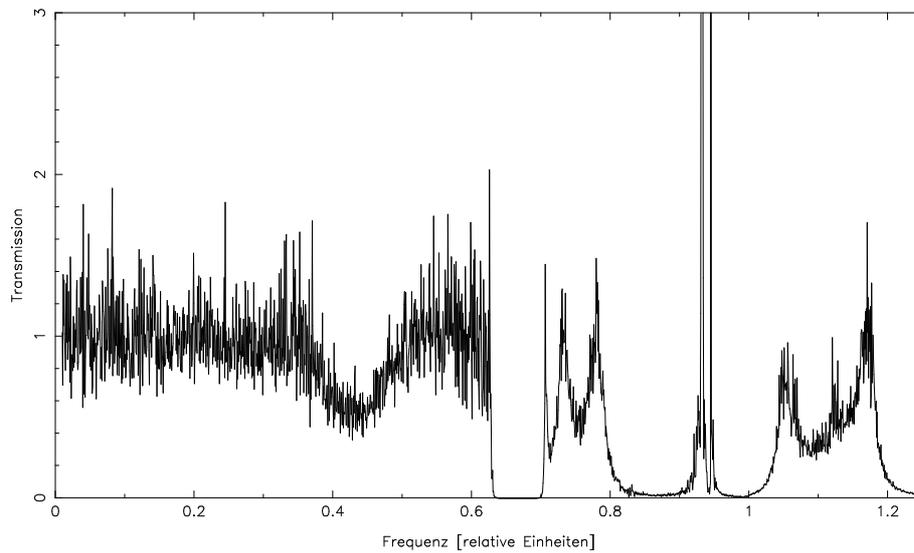


Abbildung 4.8: Transmissionspektrum der S-Polarisationsrichtung (\vec{E} senkrecht zu den Zylindern) der Struktur aus Abb 4.4 berechnet mit einem $29 \times 1 \times 29$ -Gitter und einer Schichtdicke von acht Schichten.

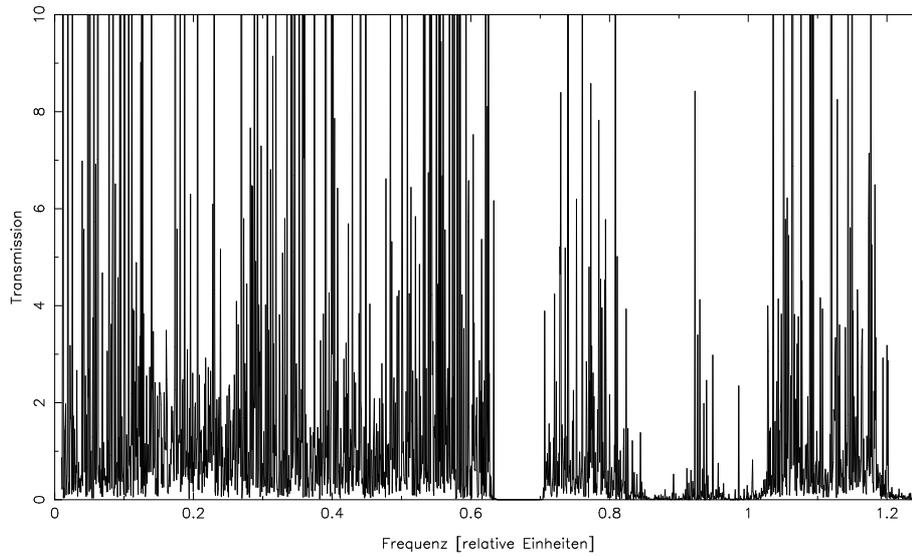


Abbildung 4.9: Transmissionspektrum der S-Polarisationsrichtung (\vec{E} senkrecht zu den Zylindern) der Struktur aus Abb 4.4 berechnet mit einem $30 \times 1 \times 30$ -Gitter und einer Schichtdicke von acht Schichten.

wird dies sogar, wenn man das Gitter auf $30 \times 1 \times 30$ vergrößert (Abb. 4.9). Bei diesem Spektrum ist eigentlich fast nur noch ein immer stärker werdendes numerisches Rauschen und die breiten Minima zu erkennen.

Die Spektren der P-Polarisation (\vec{E} parallel zu den Zylindern) zeigen bei einer Gittergröße von $27 \times 1 \times 27$ noch kein Rauschen, allerdings taucht auch hier bei nur unwesentlich größeren Gittern das gleiche Problem auf. Bei dem Gitter mit $32 \times 1 \times 32$ Gitterpunkten ist schon ein leichtes Rauschen zu erkennen und bei einem $36 \times 1 \times 36$ -Gitter ist auch hier das Spektrum schon so verrauscht, dass es quasi nicht mehr zu erkennen ist. (Abb 4.10)

Um zu verstehen, wieso das Verfahren bei größer werdender Anzahl Gitterpunkte zusammenbricht, statt genauer zu werden, muss man betrachten, wie sich die Felder mittels der Gleichungen innerhalb der Einheitszelle verhalten. Dazu betrachtet man der Einfachheit halber den Fall, dass ein ebene Welle entlang der z -Richtung ($k_x = k_y = 0$) und \vec{E} in x -Richtung (also senkrecht zu den Zylindern) als Basisfunktion an einem Ende der Einheitszelle angelegt wird. D.h. dort ist das Feld für $z = konst$ konstant (da diese Ebene komplett im Vakuum-Bereich liegt).

Betrachtet man die Evolutionsgleichungen (4.7) - (4.10), so erkennt man, dass für die nächsten berechneten Ebenen mit $z = konst$ E_x konstant bleibt, solange

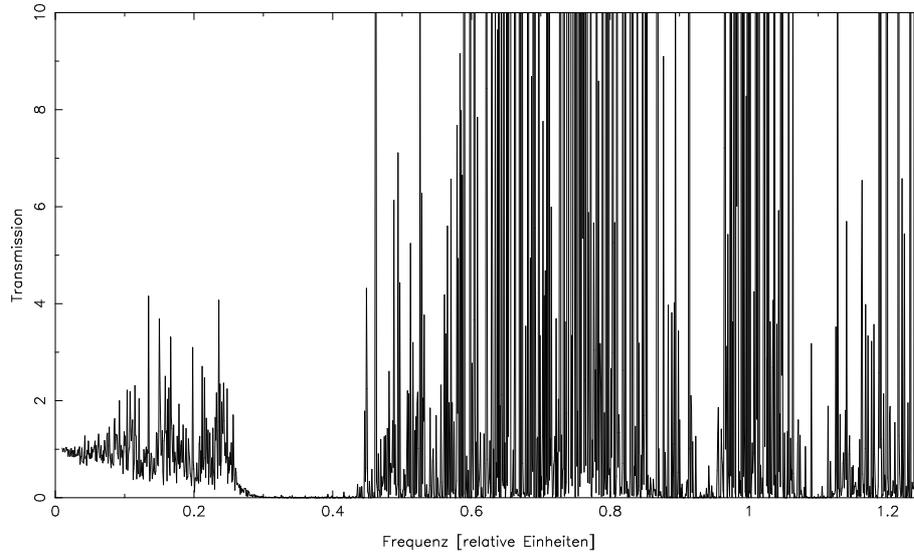


Abbildung 4.10: Transmissionspektrum der P-Polarisationsrichtung (\vec{E} parallel zu den Zylindern) der Struktur aus Abb 4.4 berechnet mit einem $36 \times 1 \times 36$ -Gitter und einer Schichtdicke von acht Schichten.

ε auf dieser Ebene konstant bleibt. Dies ändert sich erst, wenn die Iteration so weit in die Einheitszelle vorgedrungen ist, dass die Ebene $z = konst$ den Zylinder schneidet.

Dafür betrachtet man exemplarisch den Fall eines $35 \times 1 \times 35$ Gitters. Hier ist die zwölfte z -Ebene die letzte Ebene, bei welcher der Zylinder nicht geschnitten wird. Betrachtet man diese Ebene und die beiden nachfolgenden Ebenen, so verhält sich der Realteil von E_x gemäß Abb. 4.11.

Es bildet sich eine Oszillation zwischen den benachbarten Punkten aus, die sich weiter nach außen ausbreitet. Dies wird noch deutlicher, wenn man auch die nachfolgenden Ebenen in Abb. 4.12 betrachtet. (Zu beachten ist der geänderte Maßstab.) Mit jeder Ebene wird die beobachtete Oszillation stärker und breitet sich weiter zu den Rändern der Einheitszelle hin aus, bis sie die ganze Zelle ausfüllt. Diese Oszillation schaukelt sich von Ebene zu Ebene weiter auf, bis die numerischen Iterationen das Ende der Einheitszelle erreichen.

Um dies zu veranschaulichen, betrachten wir den Realteil von E_x für Schnitte durch die Einheitszelle mit $x = konst$, also längs der z -Richtung für verschiedene x -Werte. Dabei wurden hierbei willkürlich die Ebenen 1, 3, 5, 7, 9, 11, 13 und 15 ausgewählt und in Abb. 4.13 aufgetragen. Das Ergebnis sieht für alle anderen Schnitte qualitativ gleich aus.

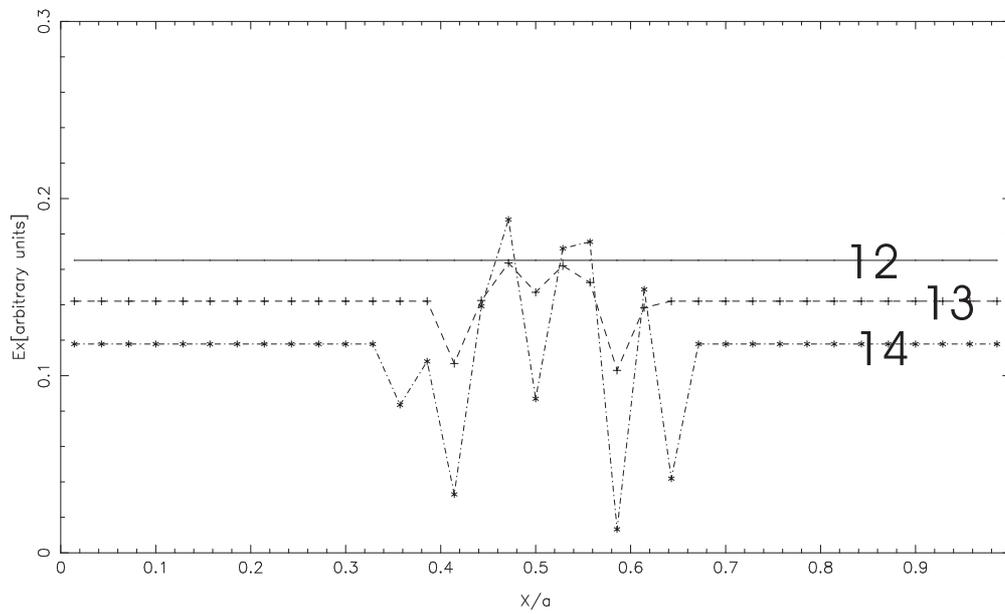


Abbildung 4.11: Realteil von E_x für die 12., 13. und 14. z -Ebene im Schnitt quer durch die Einheitszelle.

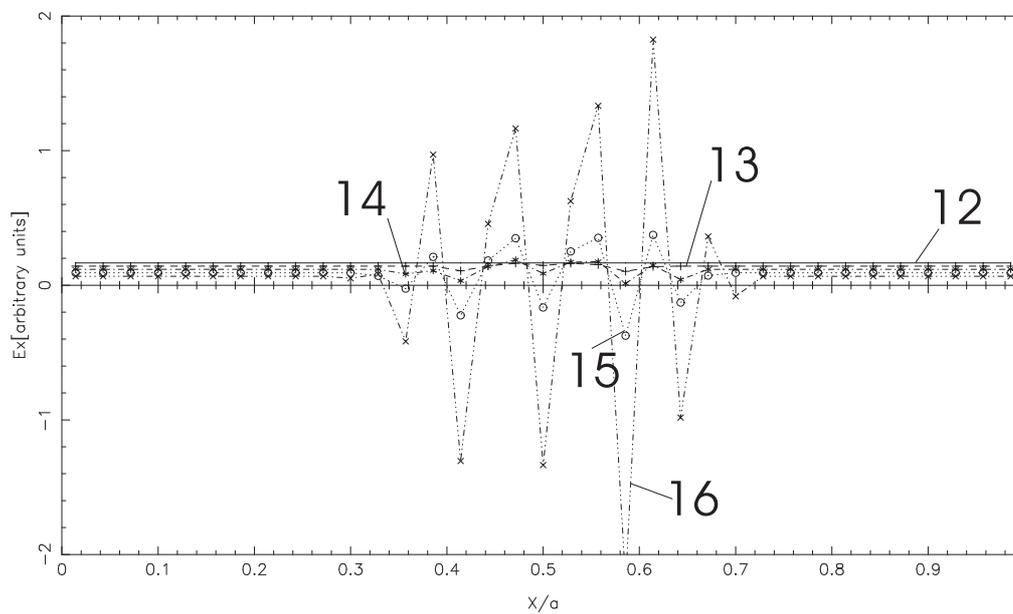


Abbildung 4.12: Realteil von E_x für die 12. bis 16. z -Ebene. Zu beachten ist der geänderte Maßstab im Vergleich zu Abb. 4.11.

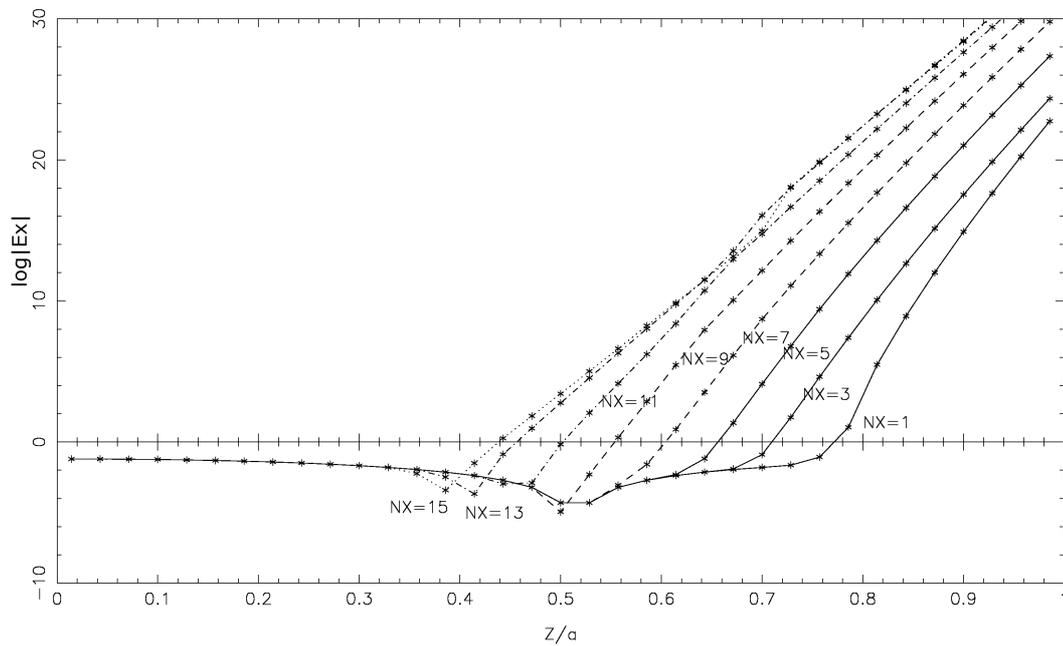


Abbildung 4.13: Halblogarithmische Auftragung des Betrags von E_x gegen z für verschiedene Schnitte entlang der z -Richtung. Dabei wurden die Felder für unterschiedliche Positionen quer zur z -Richtung gezeichnet. D.h. $NX = 1$ entspricht einem Schnitt entlang der z -Richtung entlang des Randes der Einheitszelle, während der Schnitt für $NX = 15$ etwa in der Mitte der Einheitszelle liegt.

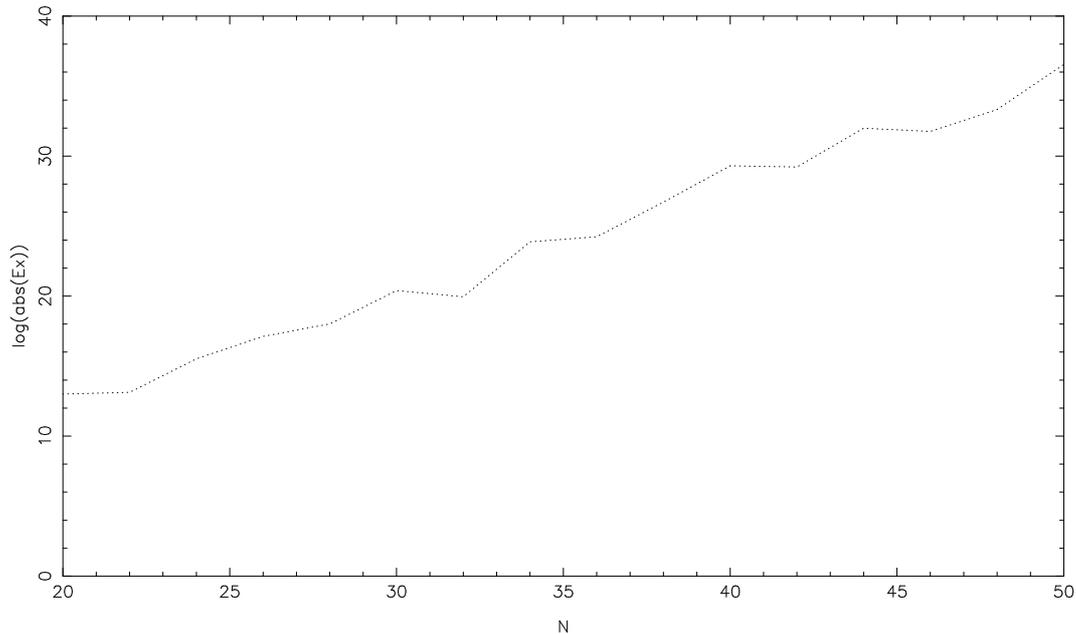


Abbildung 4.14: Halblogarithmische Auftragung des Betrags von E_x auf letzten Ebene der Iteration und am Rand der Einheitszelle in Abhängigkeit von der verwendeten Anzahl der Stützstellen N der Diskretisierung des Gitters. (Betrachtet wurden jeweils $N \times 1 \times N$ -Gitter.)

Zu erkennen ist, dass zunächst alle Kurven gleich verlaufen (da für $z = \text{konst}$ E_x konstant ist, bis die Iterationen den Zylinder erreichen) und nacheinander für die Schnitte der Betrag des Realteils von E_x exponentiell zu wachsen beginnt (erkennbar am linearen Anwachsen in der halblogarithmischen Auftragung). Je näher am Rand der Einheitszelle der Schnitt liegt, desto später beginnt dieses exponentielle Wachstum. Dies liegt daran, dass sich aufgrund der Struktur der Gleichungen eine “Störung”, wie sie sich durch das Auftreffen auf den Zylinder ergibt, bei der Iteration von einer z -Ebene auf die nächste nur um einen Gitterpunkt in x -Richtung ausbreiten kann.

Bei diesem exponentiellen Ansteigen handelt es sich jedoch nicht um einen physikalischen Effekt (etwa eine ansteigende Mode). Dies erkennt man, wenn man für Gitter der Größe $N \times 1 \times N$ betrachtet, wie sich das Feld nach der Iteration durch die Einheitszelle verhält. Dazu betrachtet man exemplarisch den Wert am Rand der Einheitszelle und trägt den Betrag von $\log(|E_x|)$ gegen die Anzahl der verwendeten Gitterpunkt auf, während alle anderen Parameter der Rechnung fest gehalten werden.

In Abb. 4.14 sieht man, dass mit zunehmender Größe N des Gitters der Wert für $\log(|E_x|)$ ansteigt, also auch die Felder nach der Iteration durch die Einheitszelle exponentiell mit der Gittergröße wachsen, was deutlich zeigt, dass es sich hierbei nicht um ein physikalisches Problem, sondern um einen rein numerischen Effekt handelt. Dieses hier exemplarisch gezeigte Verhalten ist jedoch keine Ausnahme, es gilt auch nicht nur für E_x , sondern auch für alle anderen Feldkomponenten und Strukturen.

In begrenztem Rahmen lässt sich dieses Problem jedoch umgehen. Dies wird üblicherweise getan, indem man so rechnet, als hätte man quasi rückwärts durch die Einheitszelle iteriert (vgl. Abschnitt 4.2.1). D.h., man betrachtet für die weitere Rechnung das Ergebnis der Iteration als den Ausgangspunkt und die vorgegebenen Felder als das Ergebnis der Iteration. Dadurch hat man zwar zu Beginn eine riesige numerische Störung in der Rechnung, diese “verschwindet” aber quasi bei der Iteration durch die Einheitszelle. Aus der exponentiell aufklingenden Mode wird eine exponentiell abklingende Mode. Nur durch diese numerische Umformulierung ist es überhaupt möglich, mittels der Transfer-Matrix-Methode ein Transmissionsspektrum zu berechnen.

Allerdings funktioniert dieses Vorgehen nur begrenzt, da durch die riesige Störung im nun “vorgegebenen” Feld die zu invertierende Matrix mit steigender Gittergröße immer schlechter konditioniert ist. Könnte man die Matrizen numerisch exakt invertieren, wäre dies kein Problem. Durch die endliche Rechengenauigkeit ergibt sich jedoch irgendwann eine Gittergröße, ab der die physikalischen Ergebnisse im numerischen Rauschen der Störung untergehen.

Daher verwandeln sich die Spektren bei nur kleiner Änderung der Gittergröße extrem schnell in numerisches Rauschen, da diese Störung exponentiell mit der Anzahl der Gitterpunkte anwächst (siehe Abb. 4.14). Ferner ist somit zu erwarten, dass der Punkt, an dem es nicht mehr möglich ist ein Spektrum zu berechnen, nur von der Genauigkeit der durchgeführten Matrix-Invertierung und damit von der Rechengenauigkeit, abhängt. Allerdings wird dieser Punkt unweigerlich durch das exponentielle Wachstum schon sehr früh auftreten. (Da, umgekehrt betrachtet, die Gittergröße, bei der das Zusammenbrechen der Methode eintritt, mit dem Logarithmus der Rechengenauigkeit skaliert.)

4.5 Zusammenfassung und Ausblick

Insgesamt zeigt sich, dass die Transfer-Matrix-Methode nur bedingt brauchbar für das betrachtete Problem ist, da sie ab einer gewissen Gittergröße unweigerlich numerisch instabil wird und somit Bedarf an einer echten Alternative zu diesem Verfahren besteht.

Auch die Felder selbst können nicht wirklich berechnet werden, da sie von der exponentiell ansteigenden Störung überdeckt werden. Bis zu einem gewissen Grad ist es jedoch möglich, auch mit diesem Verfahren Transmissionsspektren (oder sogar Bandstrukturen) zu berechnen. Es wurde in dieser Arbeit gezeigt, dass die Transfer-Matrix-Methode für komplexere Aufgaben allerdings ungeeignet ist. So wäre zum Beispiel eine "supercell"-Rechnung, bei der $n \times n$ Einheitszellen betrachtet werden, nicht mehr möglich, denn die Anzahl der Gitterpunkte müsste so klein gewählt werden, dass das Ergebnis nicht mehr brauchbar ist.

Ebenfalls ist das Verfahren aufgrund der notwendigen Behandlung der exponentiellen Moden insbesondere ungeeignet für die Betrachtung der Absorption, da eben genau dort die exponentiellen Moden eine entscheidende Rolle spielen. Betrachtet man die Absorption nicht, so lässt sich das Verfahren für hinreichend kleine und einfache Systeme durchaus verwenden. Da in dieser Arbeit allerdings auch genau diese Absorption untersucht werden soll zeigt sich wiederum die Notwendigkeit nach einem alternativen Verfahren.

Es konnte in diesem Kapitel gezeigt werden, dass die anwachsenden Felder ein numerisches Problem darstellen und keine physikalische Lösung des Systems. In dem Bereich, in dem das Transfer-Matrix-Verfahren jedoch funktioniert, kann man die messtechnisch gut zugängliche Größe der Transmission für eine endliche Schicht eines Photonischen Kristalls unter Verwendung der Dispersion berechnen.

Der Ursprung des numerischen Problems liegt darin, dass das Verfahren die Gleichungen explizit von einer Gitterebene zur nächsten iteriert. Somit genügt es schon auf einen Sprung in der Dispersion zu stoßen, um das exponentielle Anwachsen auszulösen. Im Rahmen dieser Arbeit wurde versucht, diese numerische Instabilität dadurch zu kontrollieren, dass statt der expliziten Iteration von einer Ebene zur nächsten implizite Varianten getestet wurden. Damit ist für jeden Schritt ein Gleichungssystem zu lösen. Aber auch diese Variationen zeigten in den Testrechnungen keine ausreichende numerische Stabilität und die Gleichungen zur Iteration von einer Ebene zur nächsten zeigten in der Singulärwertzerlegung ei-

ne starke Varianz der Singulärwerte. Auch der Versuch des Abschneidens einiger Singulärwerte zur Stabilisierung führte nicht zu einem stabilen Verfahren mit brauchbaren Ergebnissen.

Stattdessen war die grundlegende Idee um ein numerisch stabileres Verfahren zu entwickeln die, von dem Problem als Eigenwertproblem für ein Ende der Einheitszelle und der Integration durch die Einheitszelle zu einem Randwertproblem überzugehen. Dabei werden die Felder an den Endflächen in z -Richtung vorgegeben und somit wird verhindert, dass sich eine ausgeprägte exponentiell ansteigende Mode ausbildet. Mittels dieses Ansatzes soll im nächsten Kapitel ein Verfahren (das FDFD-Verfahren) aufgezeigt werden, mit dem es ebenfalls möglich ist die Transmission durch eine endliche Schicht bei vorhandener Dispersion und Absorption zu berechnen. Bei dieser Herangehensweise tritt die numerische Instabilität nicht auf.

Insgesamt kann also die Transfer-Matrix-Methode für die hier betrachtete Problemstellung als nur sehr eingeschränkt brauchbar betrachtet werden. Es wurde gezeigt, dass die Transfer-Matrix-Methode insgesamt mit sehr großer Vorsicht zu betrachten ist, da die eigentlichen physikalischen Größen von sehr großen Instabilitäten überdeckt werden.

Kapitel 5

FDFD-Verfahren

5.1 Motivation

In den vorangegangenen Kapiteln wurde gezeigt, dass in dem vorliegenden Fall eines metallischen Photonischen Kristalls alle üblicherweise verwendeten Verfahren (ebene-Wellen-Verfahren, Transfer-Matrix-Methode) versagen bzw. nicht die gewünschte Information liefern. Daraus ergab sich der Bedarf nach einer neuen Methode die Photonischen Kristalle numerisch zu behandeln. Wie bereits zu Ende des vorherigen Kapitels erwähnt diente als Grundidee der Ansatz der Transfer-Matrix-Methode eine Art Streumatrix des Systems zu bestimmen. Eine Literatur-Recherche ergab, dass es bereits seit längerer Zeit solche Verfahren für Wellenhohleiter gibt (z.B. [30], [31]). Dieses prinzipielle Verfahren wurde im Rahmen dieser Arbeit auf die Problemstellung der Photonischen Kristalle übertragen, implementiert und getestet. Diese Art von Verfahren ist für die numerische Berechnungen Photonischer Kristalle neu und ermöglicht es die metallischen System mit vollständiger Dispersion und Absorption zu beschreiben und das auch für $\varepsilon \approx 0$ keine Instabilität besitzt. Dieses Verfahren ist ein numerisches Verfahren, bei dem die Maxwell-Gleichungen im Orts-Frequenzraum durch finite Differenzen approximiert werden. Daher der Name Finite Difference Frequency Domain (FDFD). Das Verfahren selbst ist in Appendix B ausführlich erläutert.

Das Verfahren besitzt Ähnlichkeiten mit der Transfer-Matrix-Methode. Allerdings ist es numerische stabil. Die Instabilität der Transfer-Matrix-Methode ergibt sich daraus, dass die differentiellen Maxwell-Gleichungen wie ein Anfangswertproblem in z -Richtung mit Bloch-Randbedingungen in x und y betrachtet

werden. Alternativ dazu kann man auch die gesamte Einheitszelle als eine numerische “Box” betrachten und auf beiden z -Endflächen die Felder vorgeben und danach die Felder innerhalb der Einheitszelle berechnen (also sozusagen aus dem Anfangswertproblem ein Randwertproblem machen). Es stellt sich heraus, dass mittels dieses Verfahrens die Divergenz der Felder tatsächlich verhindert werden kann. Somit ist die Stabilität des Verfahrens auch bei größer werdender Stützstellenzahl gegeben und wie zu erwarten wird auch die Genauigkeit mit zunehmender Stützstellenzahl besser. Durch diesen Ansatz ist es auch möglich 2-dimensionale Wellenleiter und “super-cell”-Rechnungen zu Fehlstellen mit einer akzeptablen Anzahl an Stützstellen durchzuführen, was mit der Transfer-Matrix-Methode selbst unter der künstlichen Umgehung der Instabilität nicht möglich ist.

Es sollen nun zunächst Testrechnungen und einfache 2-dimensionale Systeme, die noch mit der Transfer-Matrix-Methode vergleichbar sind, betrachtet werden, um die Brauchbarkeit des FDFD-Verfahrens zu überprüfen.

5.2 Testrechnungen

Um zu überprüfen, dass das Verfahren korrekt funktioniert, sollen zunächst einige Testrechnungen durchgeführt werden. Dazu wird das Vakuum als der einfachste mögliche Fall betrachtet. Hierfür sind die Ergebnisse analytisch bekannt. So ergeben sich für die Lösungen lediglich freie Wellen und die Transmission für eine Mode mit k_z ist einfach durch die Phasenverschiebung $e^{ik_z L_z}$ gegeben. Danach soll als Testrechnung eine 2-dimensionale Rechnung mit quadratisch angeordneten Zylindern betrachtet werden, da hierbei ein direkter Vergleich mit den Beispielrechnungen der Transfer-Matrix-Methode aus Kapitel 4 möglich ist.

5.2.1 Vakuum

Zunächst soll das Vakuum als Testfall betrachtet werden, da es hier möglich ist die berechneten Transmissionen (und nicht vorhandene Reflexionen) mit den (trivialen) analytischen Ergebnissen zu vergleichen. In diesem Fall können auch die Felder direkt überprüft werden.

Zu Beginn sollen die Felder überprüft werden, die bei einer Lösung der numerischen Box für das Vakuum erzeugt werden. Dazu betrachtet man im einfachsten Fall die Vorgabe eines konstanten Wertes auf jeder der beiden Endflächen, also

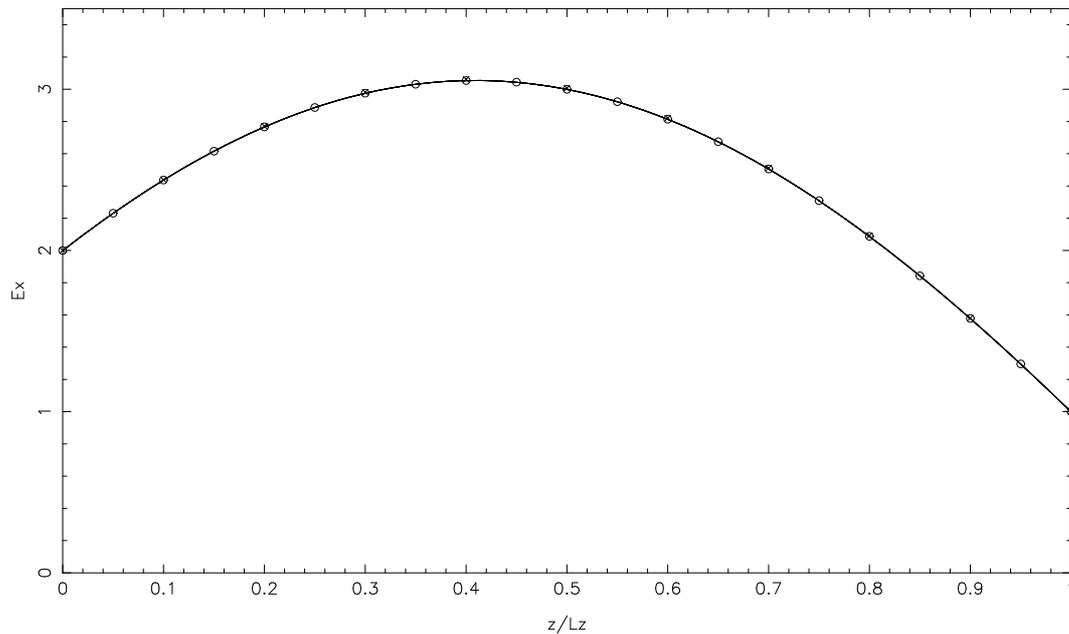


Abbildung 5.1: Abhängigkeit des elektrischen Feldes E_x von z für die Lösung der numerischen Box mit $\omega_{rel} = \frac{1}{3}$, sowie konstantem Wert $E_x(i, j, 0) = 2$ und $E_x(i, j, N_z + 1) = 1$ für $N_z = 10$ (Kreuze) und $N_z = 20$ (Kreise). Die durchgezogene Linie ist die analytische Lösung.

eine Mode, bei der $k_x^{(\nu)} = k_y^{(\nu)} = 0$ ist. Damit sollte das Feld für jeden Schnitt $z = konst$ konstant sein und in z -Richtung eine normale ebene Welle ergeben. Exemplarisch legt man nun willkürlich bei $z = 0$ konstant den Wert 2 und am Ende der Einheitszelle, bei $z = L_z = a$ den Wert 1 für E_x an. (Hierbei könnten auch beliebige andere Werte verwendet werden.) Jetzt betrachtet man die Lösung der numerischen Box für unterschiedliche Frequenzen und eine unterschiedliche Anzahl an Gitterpunkten. Es wurden exemplarisch die relativen Frequenzen $1/3$, 0.75 und 1.75 betrachtet. (Die relative Frequenz ist die durch die Länge der Einheitszelle normierte Frequenz, so dass eine relative Frequenz von 1 genau der Frequenz entspricht, bei der die Wellenlänge der Länge der Einheitszelle entspricht).

Für die relative Frequenz $\omega_{rel} = \frac{1}{3}$ ist in Abb. 5.1 die numerische Lösung sowie die analytische Lösung entlang der Einheitszelle aufgetragen. Da E_x hier entlang der x -Richtung konstant gesetzt wurde ist das Feld für jede Ebene mit $z = konst$ ebenfalls konstant. Es genügt also diese Konstante in Abhängigkeit von z zu betrachten. Man erkennt, dass schon für $N_z = 10$ die Lösung selbst bei

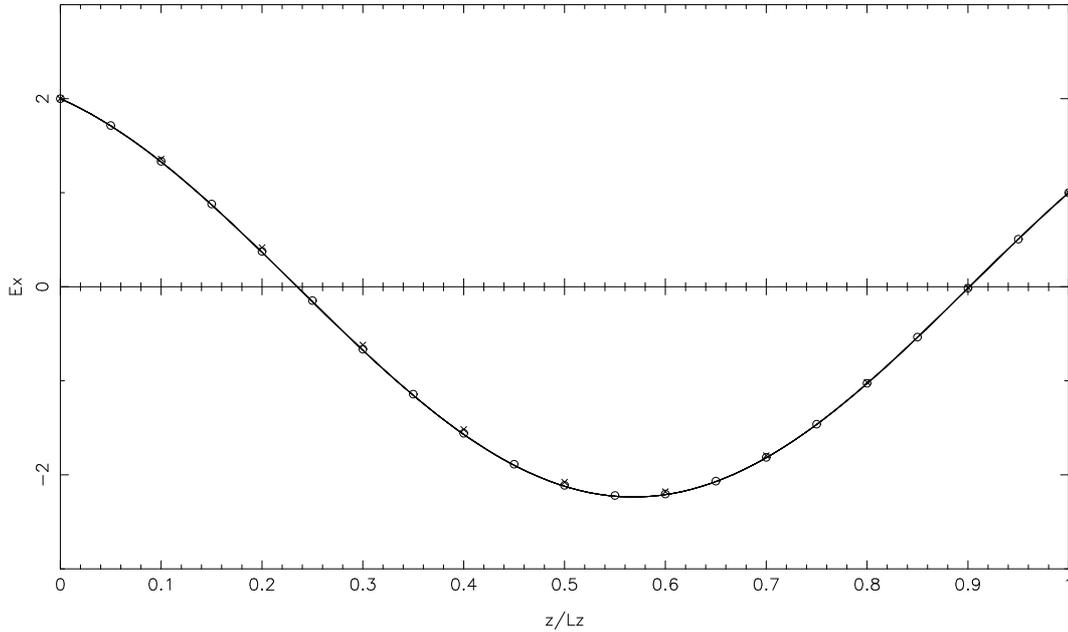


Abbildung 5.2: Abhängigkeit des elektrischen Feldes E_x von z für die Lösung der numerischen Box mit $\omega_{rel} = 0,75$, sowie konstantem Wert $E_x(i, j, 0) = 2$ und $E_x(i, j, N_z + 1) = 1$ für $N_z = 10$ (Kreuze) und $N_z = 20$ (Kreise). Die durchgezogene Linie ist die analytische Lösung.

genauer Betrachtung nur sehr wenig von der analytischen Lösung abweicht. Für $N_z = 20$ stimmt die numerische Lösung praktisch mit der analytischen überein.

Für $\omega_{rel} = 0,75$ sind die numerischen und die analytische Lösung in Abb. 5.2 gezeigt. Auch hier sind die Lösungen mit $N_z = 10$ schon eine gute Näherung der analytischen Lösung. Sie weichen jedoch noch leicht von dieser ab, während die numerische Lösung für $N_z = 20$ bereits sehr gut mit der analytischen Lösung übereinstimmen.

Für $\omega_{rel} = 1,75$ erkennt man in Abb. 5.3, dass hier jedoch die Abweichungen für $N_z = 10$ sehr stark und für $N_z = 20$ immer noch deutlich sind, während die Abweichungen für $N_z = 50$ bzw. $N_z = 75$ kaum noch auszumachen sind.

Dass für zunehmende relative Frequenz mehr Gitterpunkte benötigt werden, ist zu erwarten, da mit zunehmender relativer Frequenz ω_{rel} die Anzahl der Stützstellen pro Wellenzug abnimmt und die Änderungen von einem Gitterpunkt zum nächsten größer werden (und somit die linearen Näherungen der Integralgleichungen ungenauer werden). Insgesamt erkennt man, dass die Übereinstimmungen der analytischen und der berechneten Lösung für das Vakuum sehr gut sind.

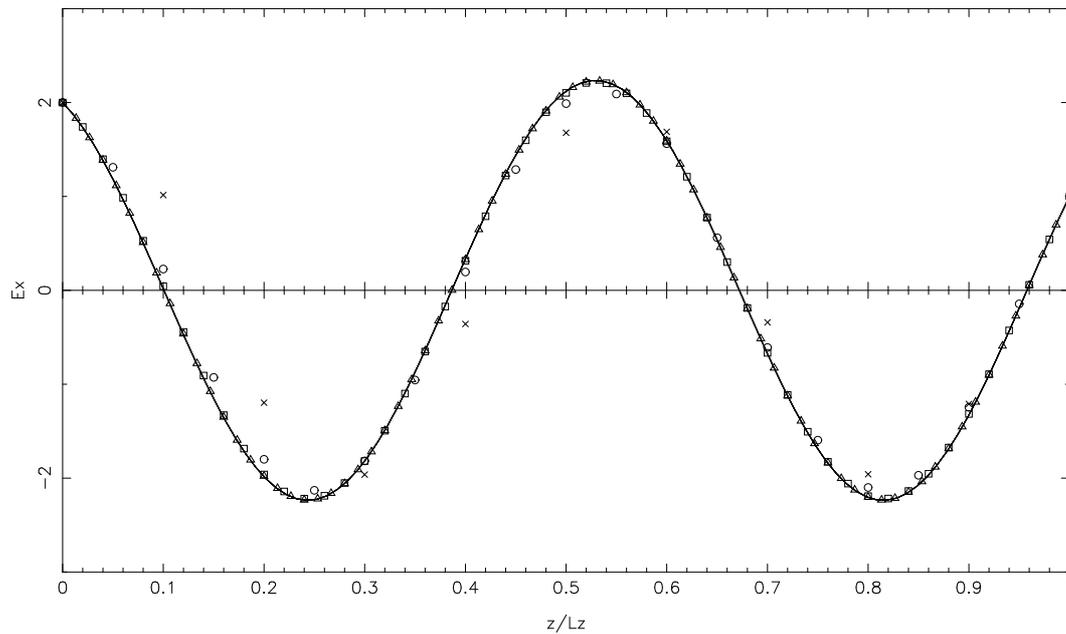


Abbildung 5.3: Abhängigkeit des elektrischen Feldes E_x von z für die Lösung der numerischen Box mit $\omega_{rel} = 1,75$, sowie konstantem Wert $E_x(i, j, 0) = 2$ und $E_x(i, j, N_z + 1) = 1$ für $N_z = 10$ (Kreuze), $N_z = 20$ (Kreise), $N_z = 50$ (Quadrate) und $N_z = 75$ (Dreiecke). Die durchgezogene Linie ist die analytische Lösung.

Allerdings gibt es auch Frequenzen, bei denen es keine Lösungen für das gegebene System gibt. Betrachtet man etwa $\omega_{rel} = 1$, so passt exakt ein Wellenzug in die Einheitszelle, d.h. unabhängig davon wie der Wellenzug verschoben wird, müsste für $k_x^{(\nu)} = k_y^{(\nu)} = 0$ an beiden Enden der numerischen Box der gleiche konstante Wert vorliegen. Durch die Diskretisierung muss dies allerdings nicht exakt der Fall sein. Die numerische Lösung dieses Problems ist in Abb. 5.4 gezeigt.

Hierbei ist zu erkennen, dass das System für zunehmende Stützstellenzahl immer größere Amplituden zeigt. Dies kann man dadurch erklären, dass durch die Diskretisierung und Rundungen das berechnete System nicht ganz mit dem exakten übereinstimmt und somit etwas von dem unlösbaren analytischen Fall $\omega_{rel} = 1$ abweicht. Die numerische Lösung kann also quasi den Unterschied der Werte an beiden Enden der numerischen Box ausgleichen, indem sie die Amplitude des Wellenzuges vergrößert. Dann werden die Werte im Vergleich zur Amplitude ≈ 0 , und somit ungefähr gleich. Je mehr Stützstellen vorhanden sind, desto eher nähert sich das berechnete System dem exakten, nicht lösbaren System und desto größer werden auch die Amplituden, wie man in Abb. 5.4 auch gut er-

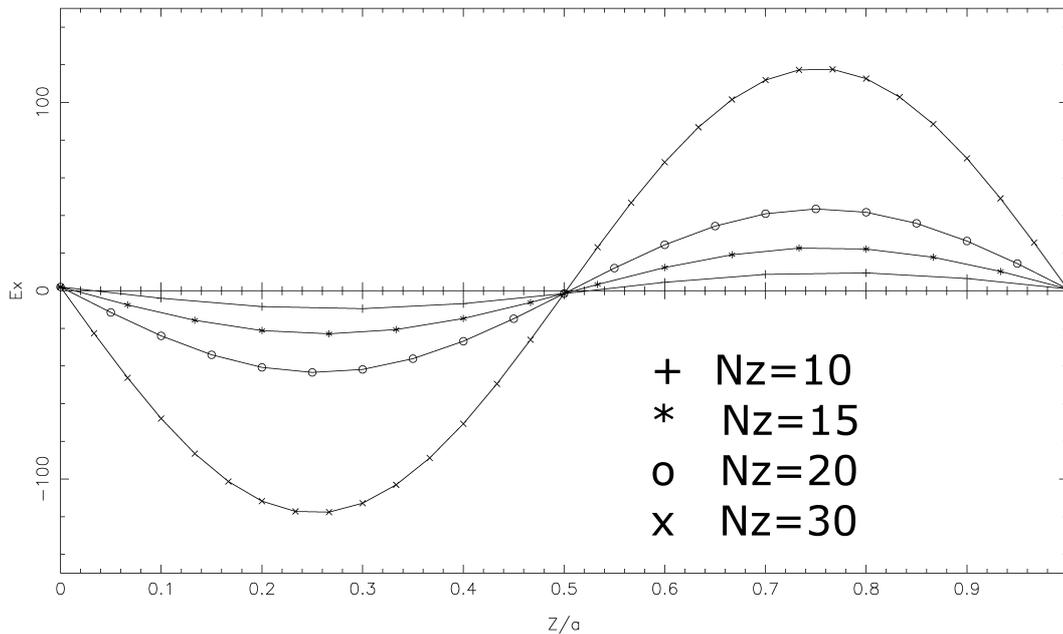


Abbildung 5.4: Abhängigkeit des elektrischen Feldes E_x von z für die Lösung der numerischen Box mit $\omega_{rel} = 1$, sowie konstantem Wert $E_x(i, j, 0) = 2$ und $E(i, j, N_z + 1) = 1$ für verschiedene Anzahl N_z Stützstellen.

kennen kann. Es bleibt allerdings festzuhalten, dass es Fälle geben kann, in denen das System nicht exakt lösbar ist, allerdings nur für diskrete Werte der relativen Frequenz. Durch eine minimale Veränderung der betrachteten Frequenz kann das Problem gelöst werden. (Allerdings können bei einer sehr kleinen Variation der relativen Frequenz die Gleichungen schlecht konditioniert sein.)

Betrachtet man nun die Streumatrix für den Fall des Vakuums, so erwartet man eine Diagonalmatrix mit Einträgen $e^{ik_z^{(\nu)}}$, da es sich um reine Wellenausbreitung handelt. Bei der numerischen Berechnung erhält man neben den Diagonalelementen üblicherweise auch Rückstreubeiträge der einfallenden Mode als reflektierte Mode. Allerdings sind diese in der Regel kleiner als 0,01, d.h. als Beitrag zu Transmissionen/Reflexionen sind diese Beiträge kleiner als 0,0001 und somit vernachlässigbar. Sie entstehen durch Rundungsfehler und die dadurch nicht exakte Trennbarkeit der Moden in ein- und auslaufende Moden, so dass ein gewisser Restanteil dieser Rückstreuung auch im Vakuum bleibt. Der Beitrag ist allerdings vernachlässigbar. Eine Ausnahme bilden hierbei die Exponential-Moden (also die auf- bzw. abklingen Moden) bei einer geringen Anzahl von Stützstellen. Der Grund hierfür ist, dass die Lösungen durch die geringe Anzahl der Git-

ω_{rel}	k_x	k_y	$S_{ii}(N_z = 10)$	$S_{ii}(N_z = 20)$	$S_{ii}(N_z = 50)$	$S_{ii}(exakt)$
$\frac{1}{3}$	0	0	-0,50211 +0,86480i	-0,49990 +0,86608i	-0,49925 +0,86646i	-0,49912 +0,86653i
$\frac{1}{3}$	$\frac{2\pi}{L_x}$	0	0,00317 (0,00844)	0,00280 (0,00301)	0,00269 (0,00059)	0,00267
0,75	0	0	0,03791 -0,99924i	0,00811 -0,99996i	-0,00058 -1,00000i	0 -1i
0,75	$\frac{2\pi}{L_x}$	0	0,01843 (0,01446)	0,01633 (0,00452)	0,01575 (0,00082)	0,01563
1	0	0	0,99553 +0,09399i	0,99976 0,02173i	1,00000 +0,00100i	1 +0i
1,5	0	0	-0,94089 -0,33765i	-0,99677 -0,08017i	-0,99996 -0,00912i	-1 +0i
1,5	$\frac{2\pi}{L_x}$	0	0,57320 +0,81936i	0,70213 +0,71204i	0,73524 +0,67780i	0,74151 +0,67094i

Tabelle 5.1: Diagonaleinträge S_{ii} der Streumatrix für Vakuum für verschiedene relative Frequenzen ω_{rel} , verschiedene Moden und eine unterschiedliche Anzahl an Stützstellen im Vergleich zur analytischen Lösung. Dabei ist bei den numerisch berechneten Matrixelementen für die abklingenden Moden in Klammern der Anteil der berechneten (aber analytisch verschwindenden) Reflexion zusätzlich angegeben.

terpunkte noch ungenau sind, kann es vorkommen, dass bei unterschiedlichen Vorgaben als Randwerte die Aufspaltung der Moden nicht für jede Lösung der numerischen Box den gleichen Diagonaleintrag haben kann. Im Gleichungssystem zur Bestimmung der Matrix S wird dies so ausgeglichen, dass stattdessen auch deutliche Beiträge in der Reflexion zu sehen sind. Diese können in der Größenordnung der eigentlichen Moden oder sogar größer werden. Tabelle 5.1 zeigt, dass dies nur für geringe Anzahl der Stützstellen gilt und dass mit steigender Stützstellenzahl diese Beiträge gegen 0 gehen.

Eine Ausnahme bildet hier der Fall $\omega_{rel} = 1$ und $k_x = \frac{2\pi}{L_x}$ (bzw. analog $k_y = \frac{2\pi}{L_y}$). Hierbei handelt es sich um eine Mode, die sich exakt parallel in x -Richtung (bzw. y -Richtung) ausbreitet. Die Felder müssten also im analytischen Fall in z -Richtung konstant und somit auch auf beiden Endflächen gleich sein. Ist $\omega_{ref} \approx 1$, so hat man zum einen das bereits erwähnte Problem, dass nicht immer eine analytische Lösung existiert, und zum anderen ist die Aufspaltung der Moden in ein- und auslaufende Moden problematisch, da in (B.19) - (B.22) $e^{ik_z^{(\nu)}\Delta z} \approx e^{-ik_z^{(\nu)}\Delta z}$ ist. Dies führt dazu, dass die Gleichungen (B.19) - (B.22) durch ständig gegebenes numerisches Rauschen unbrauchbare Ergebnisse nahe bei $\omega_{rel} = 1$ liefern. (Für $\omega_{rel} = 1$ wäre das analytische Randwertproblem nur für ganz bestimmte Randwerte lösbar, nämlich jene, bei denen die Ebenen die gleichen Werte haben. Die Aufspaltung (B.19) - (B.22) wäre wegen $k_z^{(\nu)} = 0$ auch nicht möglich.)

Tabelle 5.1 zeigt außerdem, dass die Näherungen für die Moden schon mit recht wenigen Stützstellen nahe an den exakten Werten, allerdings für die exponentiell abfallenden Moden etwas zu hoch liegen. Dies stellt jedoch auch kein Hindernis dar, da die Werte mit erhöhter Stützstellen auch in diesem Fall schnell gegen den analytischen Wert gehen. Insbesondere sind auch die Beträge der Quadrate der Diagonalelemente sich ausbreitender Moden in der Transmissionsmatrix schon bei sehr wenigen verwendeten Stützstellen nahe bei 1. Schon für $N_z = 20$ sind die Abweichungen des Betrags der Diagonalelemente sich ausbreitender Moden von 1 kleiner 10^{-3} %.

5.2.2 2-dimensionale Testrechnung

Da sich im Fall des Vakuums die Gleichungen stark vereinfachen und auch die Moden getrennt bleiben, sich also nur Diagonaleinträge in der Matrix S finden las-

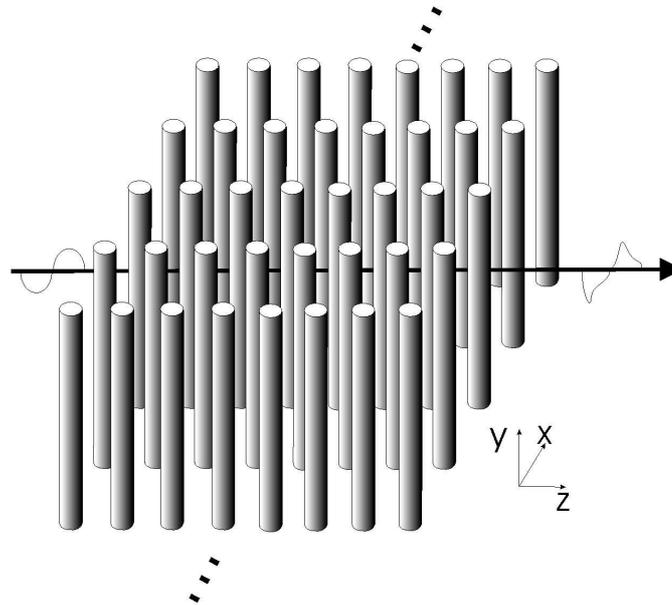


Abbildung 5.5: 2-dimensionaler Photonischer Kristall mit einer quadratischen Anordnung von Zylindern mit $\varepsilon = 8,9$ in Luft und mit Verhältnis $\frac{r}{a} = 0,2$ zwischen Radius und Abstand der Zylinder.

sen, sollte man das Verfahren auch an wesentlich komplexeren Strukturen testen. Hierzu bietet sich ein 2-dimensionaler Photonischer Kristall als Beispielrechnung an, da dieser schon die erforderliche Komplexität realistischer Probleme aufweist und der numerische Aufwand sich noch in Grenzen hält. Dazu betrachten wir die Struktur (Abb. 5.5), die in Abschnitt 4.3 als Beispielrechnung betrachtet wurde. Mit beiden Verfahren kann man die Transmissions- bzw. Reflexionsspektren berechnen und somit ist ein direkter Vergleich möglich, um das Verfahren zu testen.

In diesem Fall ist es allerdings leider nicht mehr möglich mit einer analytischen Lösung zu vergleichen. Es ist auch wenig intuitiv, sich die Felder selbst zu betrachten, da diese bei FDFD-Verfahren i.a. als eine Überlagerung etlicher Moden vorliegen. Stattdessen werden hier direkt die Transmissionspektren der beiden Verfahren verglichen. Dazu betrachtet man wie im Fall der Transfer-Matrix-Methode wieder eine Schichtdicke von 8 Schichten. Man bestimmt die Spektren für diese Schichten so, dass man das Verfahren selbst für eine Schicht durchführt und dann analog zur Transfer-Matrix-Methode aus der S -Matrix dieser einen Schicht die Transmission/Reflexion der gesamten acht Schichten durch

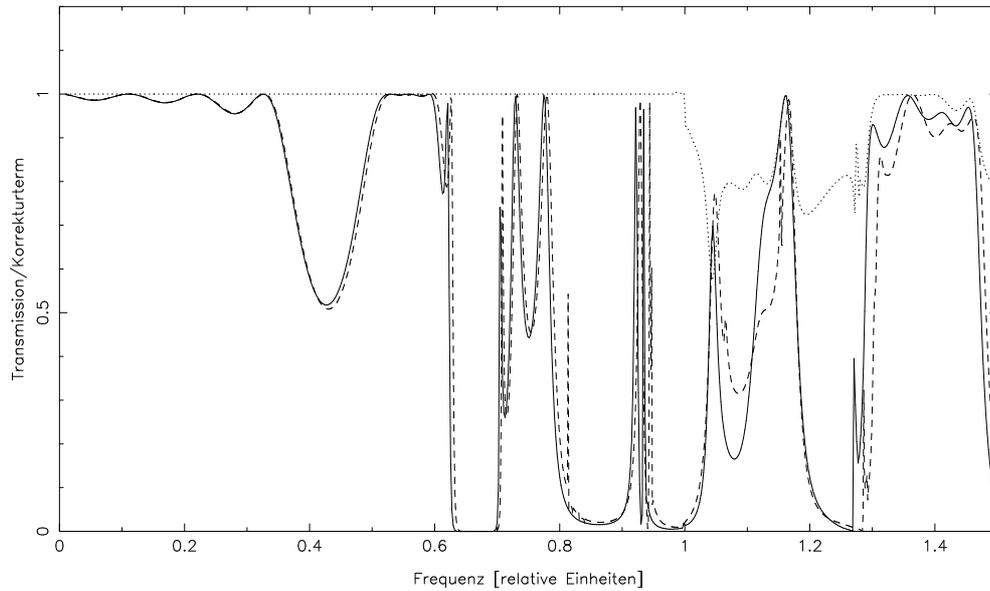


Abbildung 5.6: Vergleich der Transmissionsspektren quadratisch angeordneter Zylinder für die S-Polarisation. Dabei ist die durchgezogene Linie das mittels FDFD-Verfahren berechnete Transmissionsspektrum und die gestrichelte Linie das mittels Transfer-Matrix-Methode berechnete Transmissionsspektrum. Die gepunktete Linie ist die unkorrigierte Summe aus Reflexion und Transmission für die FDFD-Rechnung. Beide Berechnungen wurden auf einem $25 \times 1 \times 25$ -Gitter durchgeführt.

Mehrfachreflexion berechnet.

In den Berechnungen zeigt sich das Problem, dass die Summe aus Reflexion und Transmission, die im vorliegenden Falle nicht absorbierender Medien eigentlich immer 1 sein sollte ab $\omega_{rel} \approx 1$ nicht mehr bei 1 liegt, sondern für die S-Polarisation eher unterhalb von 1 liegt und für die P-Polarisation deutlich größer als 1 ist. Dies wird dadurch ausgeglichen, dass man die Werte mit der Summe von Reflexion und Transmission im Endergebnis normiert. Dabei ist es allerdings so, dass sich durch die Mehrfachreflexionen schon deutliche Korrekturterme ergeben. Auch wenn man durch die Korrektur nicht immer die exakt korrekten Werte erhalten sollte, so kommt es im Endeffekt bei der physikalischen Fragestellung darauf an, ob eine Transmission stattfindet, oder ob sie (quasi) vollständig unterdrückt ist. Beim Suchen einer Bandlücke spielen also kleine Ungenauigkeiten im absoluten Betrag der Transmission eine eher untergeordnete Rolle. Man erkennt auch in den Vergleichsrechnungen, dass mittels der Korrekturterme doch eine recht akzeptable Übereinstimmung erreicht werden konnte.

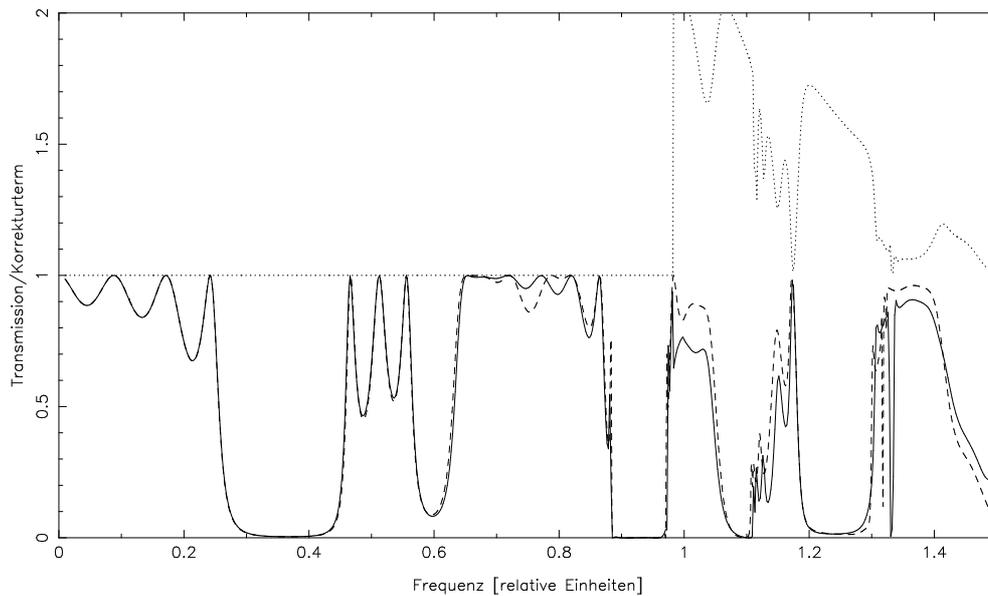


Abbildung 5.7: Vergleich der Transmissionsspektren quadratisch angeordneter Zylinder für die P-Polarisation. Dabei ist die durchgezogene Linie das mittels FDFD-Verfahren berechnete Transmissionsspektrum und die gestrichelte Linie das mittels Transfer-Matrix-Methode berechnete Transmissionsspektrum. Die gepunktete Linie ist die unkorrigierte Summe aus Reflexion und Transmission für die FDFD-Rechnung. Beide Berechnungen wurden auf einem $25 \times 1 \times 25$ -Gitter durchgeführt.

In Abb. 5.6 und 5.7 sieht man nun den Vergleich zwischen der FDFD-Rechnung (durchgezogene Linie) und der Transfer-Matrix-Methode (gestrichelte Linie). Beide Rechnungen wurden mit einem $25 \times 1 \times 25$ -Gitter durchgeführt. Bei der FDFD-Rechnung wurden die ersten 3 Vakuum-Moden berücksichtigt. Insgesamt erkennt man im Bereich bis $\omega_{rel} \approx 1$ eine sehr gute Übereinstimmung der Ergebnisse. Kleinere Unterschiede ergeben sich z.B. auch bei der S-Polarisation. So fehlt in der FDFD-Rechnung hier der sehr schmale Peak knapp oberhalb von $\omega_{rel} = 0,8$. Dies könnte durch die geringere Anzahl an berechneten Frequenzen im FDFD-Spektrum bedingt sein (nur knapp die Hälfte der Frequenzen) und durch die Tatsache, dass der Peak sehr schmal ist. (Da es sich bei der Transfer-Matrix-Methode um ein explizites Verfahren handelt, kann man damit deutlich schneller rechnen.) Allerdings ist auch bei der Transfer-Matrix-Methode nicht klar, ob es sich dabei um einen echten Peak handelt, da hier dieser Bereich bei genauerer Betrachtung auch verrauscht erscheint. Er ist bei verschiedenen Gittergrößen sowie Frequenzstützstellen unterschiedlich stark ausgeprägt. In der Bandstruktur

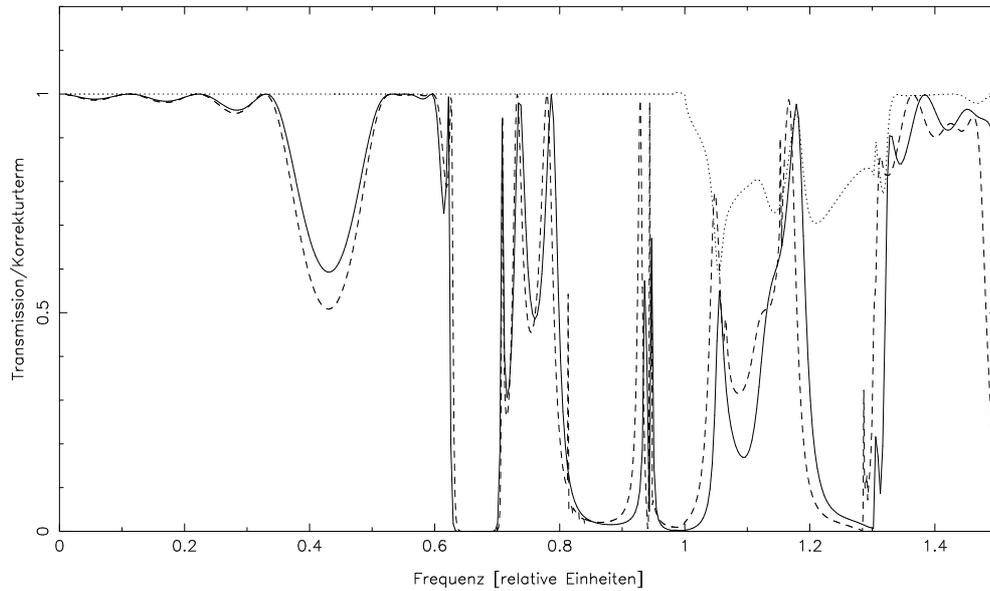


Abbildung 5.8: Vergleich der Transmissionsspektren quadratisch angeordneter Zylinder für die S-Polarisation. Dabei ist die durchgezogene Linie das mittels FDFD-Verfahren berechnete Transmissionsspektrum und die gestrichelte Linie das mittels Transfer-Matrix-Methode berechnete Transmissionsspektrum. Die gepunktete Linie ist die unkorrigierte Summe aus Reflexion und Transmission für die FDFD-Rechnung. Die Berechnungen mittels der Transfer-Matrix-Methode wurden auf einem $25 \times 1 \times 25$ -Gitter durchgeführt und die FDFD-Rechnung auf einem $63 \times 1 \times 63$ -Gitter.

müsste dieser Peak einem extrem flachen Band entsprechen. Insgesamt ist eher zu vermuten, dass es sich bei diesem Peak um eine Störung in der Rechnung mittels der Transfer-Matrix-Methode handelt.

Unterschiede erkennt man erst ab $\omega_{rel} = 1$. Aber auch hier sind die Spektren sehr ähnlich. Nur sind die Peaks zum Teil anders ausgeprägt, etwas unterschiedlich in der Höhe bzw leicht verschoben. Die Übereinstimmung der beiden Verfahren kann auch in diesem Bereich noch als sehr gut betrachtet werden. Ferner ist das Ergebnis der FDFD-Rechnung im Falle der S-Polarisation minimal zu kleineren Frequenzen verschoben, während die P-Polarisation im Vergleich zur Transfer-Matrix-Methode zu minimal höheren Frequenzen verschoben ist.

Aus den Korrekturtermen beider Polarisationen ist ersichtlich, dass dieser insbesondere für die P-Polarisation sehr ausgeprägt ist. Aber man erkennt oberhalb von $\omega_{rel} = 1$ wieder eine grobe Tendenz gegen 1. In dieser zeigen sich auch die groben Strukturen der Peaks. Dies ist dadurch zu erklären, dass die Korrektur

nach der berechneten Schichtverdopplung/Mehrfachreflexion durchgeführt wurde, die einen deutlichen Einfluss auf die konkrete Struktur hat. (Man vergleiche hierfür z.B. die Rechnungen für die Transfer-Matrix-Methode, bei denen auch die Transmissionsspektren für eine Schicht dargestellt sind.) Die Peak-Struktur selbst ist auch ohne den Korrekturterm noch vorhanden, allerdings in der Höhe verzerrt und teilweise mit Transmissionen > 1 , weshalb die Korrektur hinzugefügt wurde, die eine gute Übereinstimmung der beiden Verfahren ergibt.

Um einen weiteren Vergleich machen zu können, müsste man nun beide Verfahren mit einer höheren Anzahl Gitter-Stützstellenzahl vergleichen. Dies ist jedoch nicht möglich, da wie bereits gezeigt die Transfer-Matrix-Methode bei einer höheren Anzahl Gitter-Stützstellen zusammenbricht. Führt man diese Rechnungen allerdings für das FDFD-Verfahren mit einer höheren Anzahl Stützstellen durch, so ändert sich quantitativ nur sehr wenig. Die Lage der Peaks verschiebt sich nur minimal. (Siehe z.B. für die S-Polarisation für ein $63 \times 1 \times 63$ -Gitter in Abb. 5.8. Für die P-Polarisation ergibt sich ein ähnliches Bild.) Für die betrachtete Rechnung kann man also davon ausgehen, dass mit dem $25 \times 1 \times 25$ -Gitter der betrachtete Frequenzbereich schon ausreichend konvergiert ist und das Verfahren prinzipiell funktioniert und brauchbare Ergebnisse liefert. Also ist es für die Untersuchung metallischer Systeme im Gegensatz zu den üblicherweise angewandten Verfahren tatsächlich verwendbar und stellt damit einen brauchbaren Ersatz der Transfer-Matrix-Methode dar.

Im nächsten Kapitel soll nun das FDFD-Verfahren dazu verwendet werden, zu untersuchen, inwieweit metallische Systeme von praktischer Bedeutung sein können. Zwar besitzen sie Eigenschaften, die sie als sehr gute Kandidaten für photonische Kristalle erscheinen lassen (sehr hohe (negative) Dielektrizität bzw. Nullstelle im Realteil der Dispersion), allerdings besitzen diese Systeme auch eine deutliche Absorption und es stellt sich die Frage, ob diese Absorption die genannten Vorteile nicht unbrauchbar macht. Entscheidend ist also für die Anwendung zum einen, dass sich breite Bandlücken in den Strukturen öffnen und dass die Absorption möglichst gering (häufig sogar nahezu verschwindend) ist.

5.3 Zusammenfassung und Ausblick

In diesem Kapitel wurde gezeigt, dass das FDFD-Verfahren eine Alternative bzw. einen Ersatz zur Transfer-Matrix-Methode darstellt. Die Testrechnungen haben gezeigt, dass das Verfahren funktioniert.

Das FDFD-Verfahren selbst könnte jedoch noch weiter verbessert werden. Ungelöste Probleme sind die Ursache der Notwendigkeit der Korrektur und wie die Notwendigkeit des Korrekturterms beseitigt werden kann. Allerdings scheinen allgemein solche Normierungsprobleme bei dieser Art Verfahren typischerweise aufzutreten, trotzdem wäre es wichtig, den Einfluss dieser Ungenauigkeit möglichst gering zu halten bzw. möglichst zu beseitigen. Jedoch zeigen die Testrechnungen, dass die mit der Korrektur erhaltenen Ergebnisse sehr nahe an denen Vergleichsergebnissen sind.

Weiterhin wäre es noch zu vorteilhaft, die numerische Effizienz des Verfahrens (insbesondere der Gleichungslöser) zu erhöhen. Dazu bieten sich zwei Möglichkeiten an. Zunächst kann man vermutlich das Lösen der Gleichungssysteme für die numerischen Boxen effizienter gestalten. Dies geschieht momentan mittels GMRES (generalized minimal residual method) und einem ILU Preconditioner (incomplete LU). Dabei ist nach derzeitigem Stand die Berechnung des Preconditioners deutlich zeitintensiver als das anschließende Lösen mittels GMRES, das üblicherweise nur noch wenige (< 10) Iterationen benötigt. Es war leider nicht erfolgreich möglich mit einem weniger aufwendigen Preconditioner das iterative GMRES-Verfahren zum Konvergieren zu bringen. Ein geeigneter Preconditioner zu finden, bei dem die Hauptarbeit des Verfahrens im iterativen Schritt liegt, so könnte das Verfahren deutlich effizienter arbeiten lassen, da jeder Iterationsschritt durch die dünnbesetzte System-Matrix nur linear mit der Anzahl der Gitterpunkte ansteigt.

Eine andere Möglichkeit, das Verfahren effizienter zu gestalten, wäre, statt einer Diskretisierung mit einer Näherung erster Ordnung die Diskretisierung in vierter Ordnung durchzuführen. Damit bräuchte man deutlich weniger Gitterpunkte, um eine vergleichbar genaue Lösung zu erhalten, und die Größe der Matrix würde effektiv sinken, auch wenn man bei gleicher Anzahl von Gitterpunkten bei einem Verfahren vierter Ordnung mehr Einträge in die Matrix des Gleichungssystems bekommt, da man mehr Stützstellen für die Ableitungen benötigt als in der hier betrachteten Näherung erster Ordnung. Dadurch ändern sich die Glei-

chungen (B.9)-(B.11) und werden deutlich komplizierter. Allerdings sollte der benötigte numerische Rechenaufwand zum Lösen des Gleichungssystems für eine vergleichbare Genauigkeit sinken. Es ist aber auch zu bedenken, dass durch die diskontinuierlichen Übergänge das Gitter immer noch eine gewisse Gitterdichte benötigt, um den Sprung in ε genau genug zu beschreiben.

Kapitel 6

Untersuchung metallischer Systeme

Nachdem das FDFD-Verfahren erfolgreich getestet wurde, kann man davon ausgehen, dass das Verfahren hinreichend gute Ergebnisse liefert. Im Gegensatz zu den üblicherweise verwendeten Verfahren erlaubt uns das FDFD-Verfahren nun volle Spektren unter Verwendung eines gemessenen Absorptions und Dispersionsverhalten zu berechnen. Als metallisches System wird dabei Silber verwendet, da die niedrige Absorption unterhalb der Plasmafrequenz Silber als einen sehr guten möglichen Kandidaten anbietet.

Der Vorteil gegenüber der Transfer-Matrix-Methode besteht nun darin, dass man auch größere Raumgitter rechnen kann, ohne dass das Verfahren instabil wird und auch eine Absorption sinnvoll behandelt werden kann ist. Dies erlaubt es auch sogenannte "supercell"-Rechnungen durchzuführen, die man benötigt, um Berechnungen zu Störstellen durchzuführen. Mittels der Transfer-Matrix-Methode wäre dies nicht mehr möglich, da hier das Verfahren, wie bereits gezeigt, bei spätestens ca. 30-40 Gitterpunkten zusammenbricht. Dies wäre gerade so ausreichend um 2 Schichten in die numerische Box für die Rechnung zu packen. Für die Berechnung einer Störstelle ist dies jedoch bei weitem nicht ausreichend.

6.1 Warum metallische Systeme?

Auf den ersten Blick erscheint die Verwendung von metallischen Materialien für Photonische Kristalle nicht sinnvoll, da metallische Systeme eine Absorption besitzen, während es sehr viele dielektrische Materialien gibt, die für den verwendeten Materialbereich keine Absorption besitzen. Allerdings ist es so, dass es im

Optischen sehr schwierig ist mit diesen Materialien eine 3-dimensionale Struktur herzustellen, die eine vollständige Bandlücke besitzt. Grund dafür ist, dass die Strukturen, die z.B. einfach aus monodispersen Kügelchen hergestellt werden können (hauptsächlich fcc-Strukturen, aber auch andere sind möglich), keine vollständige Bandlücke besitzen. Die dielektrischen Materialien besitzen eine Dielektrizitätskonstante von bis zu ca. $\epsilon \approx 10$.

Ist die Bandlücke aus Symmetriegründen nicht vorhanden, so bieten nun die metallischen Materialien aus zwei verschiedenen Gründen einen möglichen Ansatz. Zum einen gibt es in der Nähe der Plasmafrequenz z.B. bei Silber einen relativ breiten Bereich mit fast vernachlässigbarer Absorption aber sehr hohen Werten des Betrages des Realteils von ϵ (siehe Abb. 6.1). Diese Werte liegen bis zu einer ganzen Größenordnung über den Werten für ϵ , die mit normalen dielektrischen Materialien möglich sind [7]. Ebenso hat der Realteil von ϵ bei der Plasmafrequenz eine Nullstelle, so dass das Verhältnis von ϵ_{Luft} zu ϵ_{Metall} in einem kleinen Bereich quasi beliebig große Werte annehmen kann. Dabei ist zu erwähnen, dass im Falle einer Dispersion die Skalierungseigenschaften gebrochen werden, da durch die Dispersion eine absolute Längenskala eingeführt wird. Das bedeutet nun auch, dass die erhaltenen Ergebnisse von der absoluten Größe der Einheitszelle abhängig werden.

In Abb. 6.1 erkennt man, dass im Bereich zwischen 1 und 4 eV ist die Absorption von Silber relativ gering (siehe Abb. 6.1). Knapp unterhalb von 4 eV liegt ein Nulldurchgang im Realteil von ϵ vor. Der deutlich höhere Kontrast (das Verhältnis zwischen den beiden dielektrischen Konstanten) eines Photonischen Kristalls aus Silber um die 4 eV ist deshalb von Bedeutung, weil das Auftreten von Bandlücken sehr eng mit dem Kontrast der Dielektrizität des Photonischen Kristalls zusammenhängt. Bandlücken treten erst bei bestimmten Werten im Kontrast auf, da dann der Unterschied der Energie/Frequenz zwischen zwei Moden groß wird und damit das Entstehen einer vollständigen Bandlücke begünstigt werden kann [9]. Bei metallischen Systemen ist es nun möglich in völlig neue Bereiche für den Kontrast in der Dielektrizität vorzudringen, allerdings mit dem Nachteil einer nun vorhandenen Absorption. Die Frage, die in diesem Kapitel unter anderem geklärt werden soll, ist, inwieweit die Absorption hier ein Hindernis darstellt. Ist der Effekt der erhöhten dielektrischen Konstante so hoch, dass die Absorption für praktische Zwecke keine Rolle spielt, oder vernichtet die Absorption alle

möglichen Vorteile, die das metallische System bietet.

Dazu wird hauptsächlich ein 2-dimensionales Testsystem betrachtet, da es von der Rechnung noch relativ einfach zu handhaben ist, aber auch gleichzeitig alle relevanten Eigenschaften besitzt, die auch für das 3-dimensionale System der Fall wären. Es sollen in diesem Kapitel dazu drei verschiedene Problemstellungen präsentiert und erläutert werden, die mittels des angepassten FDFD-Verfahrens berechnet wurden.

Zunächst soll die Berechnung für den in den Testrechnungen gerechneten Fall der quadratisch angeordneten Zylinder erweitert werden. Hierbei wird kein einfaches (dispersions- und absorptionsfreies) Dielektrikum, sondern Silber als Material mit den in [7] jeweils experimentell bestimmten Absorptionskurven und Dispersionsrelationen verwendet. Die in [7] aufgelisteten Messwerte für den komplexen Brechungsindex $n + ik$ wurden dabei über $\varepsilon = (n + ik)^2$ in die Dielektrizitätskonstante umgerechnet und für die Rechnungen wurden anhand dieser Messwerte mittels kubischer Splines die Werte für ε die zwischen den Messpunkten liegenden Werten interpoliert.

Abschließend sollen noch Rechnungen von Störstellen präsentiert werden, die nicht mittels der Transfer-Matrix-Methode möglich gewesen sind. Dabei wurde der 2-dimensionale Fall der quadratisch angeordneten Zylinder betrachtet und jeweils eine 1-dimensionale (eine Reihe Zylinder fehlt) bzw. eine 0-dimensionale Störung (ein Zylinder fehlt) berechnet. Hierbei wurde sowohl mit einem einfachen Dielektrikum wie auch mit den Dispersionsrelationen und Absorptionskurven von Silber aus [7] gerechnet.

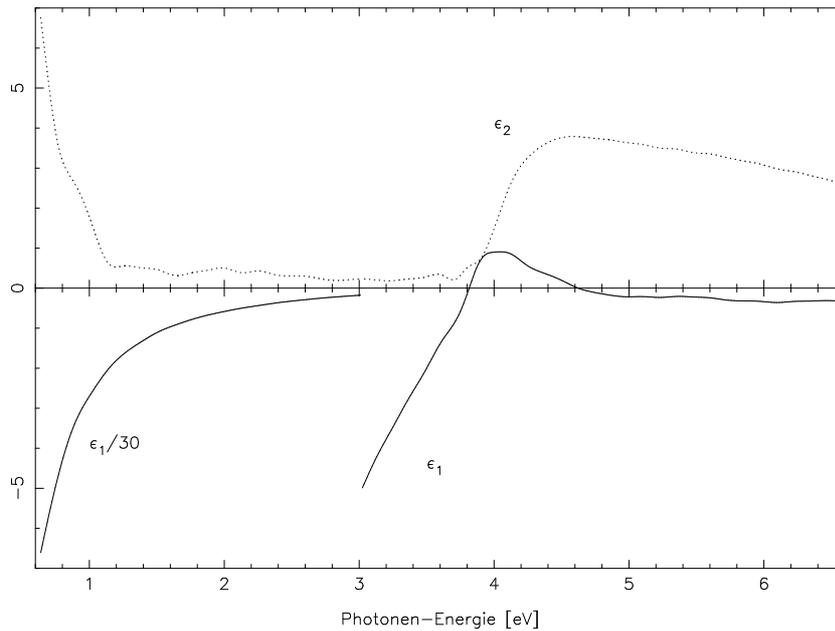


Abbildung 6.1: Aus [7] bestimmte Dispersionsrelation von Silber als Funktion der Photonischen Energie inklusive Absorption als Imaginäranteil: $\varepsilon = \varepsilon_1 + i\varepsilon_2$.

6.2 Quadratisch angeordnete Zylinder aus Silber

Am Verfahren ändert sich durch das Hinzufügen der Absorption und Dispersion zunächst nichts. Allerdings muss die im Verfahren beschriebene Korrektur getrennt betrachtet werden. Bei der üblichen Vorgehensweise wurden die Werte durch die Summe aus Reflexion und Transmission dividiert. Allerdings muss im Falle einer vorhandenen Absorption die Summe aus Transmission und Reflexion nicht mehr 1 sein. Deshalb wird zunächst eine Rechnung ohne die Absorption, aber mit der durch die Dispersionsrelation gegebenen Dielektrizität durchgeführt. Hiermit wird die Summe von Transmission und Reflexion bestimmt, die als Korrektur dient. Danach wird die Rechnung mit vorhandener Absorption durchgeführt und die Korrektur aus der ersten Rechnung verwendet.

Wie bereits erwähnt, führt das Einführen einer Dispersion dazu, dass die Skalierbarkeit der Lösungen gebrochen wird, da nun eine absolute Längenskala existiert. Dies führt dazu, dass im Gegensatz zu den bisherigen Rechnungen die absolute Größe der Einheitszelle eine Rolle spielt und man für andere Ausdehnungen der Einheitszelle veränderte Spektren bekommt. Allerdings sollen hier die Spektren weiterhin in relativen Einheiten betrachtet werden. Es wurde in den

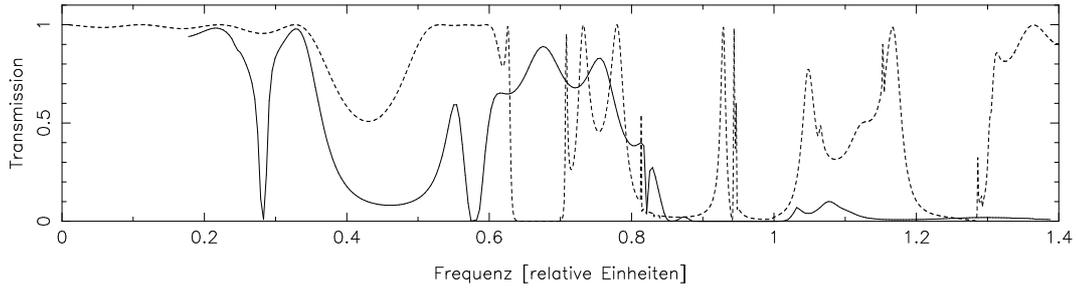


Abbildung 6.2: Vergleich der Transmissionsspektren der S-Polarisation für acht Schichten quadratisch angeordneter Zylinder mit $\varepsilon = 8,9$ (gestrichelte Linie) und Silber (durchgezogene Linie). Die niederfrequenter Nullstelle der Dispersionsrelation liegt bei $\omega_{rel} \approx 1,05$. D.h. $\omega_{rel} = 1$ entspricht ca. 3,6 eV.

Rechnungen nicht die Größe der Einheitszelle variiert, sondern stattdessen die Absorptionskurve und die Dispersionsrelation in der Frequenz skaliert, was man aber wieder in die Variation der Einheitszellengröße zurückrechnen kann.

Zunächst betrachten wir den Fall, dass die niederfrequenter Nullstelle des Realteils von ε , die bei ca. 3,8 eV liegt, in etwa bei der relativen Frequenz $\omega_{rel} \approx 1,05$ liegt. Dann geht der nicht absorbierende Frequenzbereich von Silber etwa bis $\omega_{rel} \approx 1$. Es ist interessant zu prüfen, ob es in diesem Bereich noch möglich ist, eine ausreichend geringe Absorption zu erhalten bzw. wie sich die Dispersion auf die Struktur der Spektren auswirkt. Dazu betrachtet man zunächst einfach den direkten Vergleich einer Rechnung mit festem $\varepsilon = 8,9$ und der skalierten Dispersionsrelation. Für die Berechnung wurden ein $40 \times 1 \times 40$ -Raumgitter und 3-Vakuummoden in x -Richtung verwendet. Dies sollte ausreichend sein und nur eine minimale Verschiebung der Peaks bewirken. Beide Rechnungen wurden für eine Schichtdicke von acht Schichten durchgeführt. In Abb. 6.2 sind die Ergebnisse im Vergleich zu einer Rechnung mit festem ε gezeigt.

Zwischen beiden Spektren bestehen ein deutliche Unterschiede. Ein direkter Vergleich ist daher nicht möglich. Auffällig ist jedoch für das Spektrum des Photonischen Kristalls aus Silber, dass bei $\omega_{rel} \approx 0,28$ die Transmission bis fast auf 0 absinkt, und das nachfolgende Minimum deutlich ausgeprägter ist als im Fall ohne Dispersion. Die relative Frequenz von 0,28 entspricht ca. 1 eV, dem Bereich, bei dem auch in der Dispersionskurve in Abb. 6.1 die Absorption einsetzt. Allerdings findet bei niedrigeren Energien im Kristall trotzdem keine Absorption statt, obwohl bei diesen Frequenzen die Absorption von reinem Silber noch größer wird. Eventuell liegt der Grund hierfür in dem extrem stark steigenden Betrag des Re-

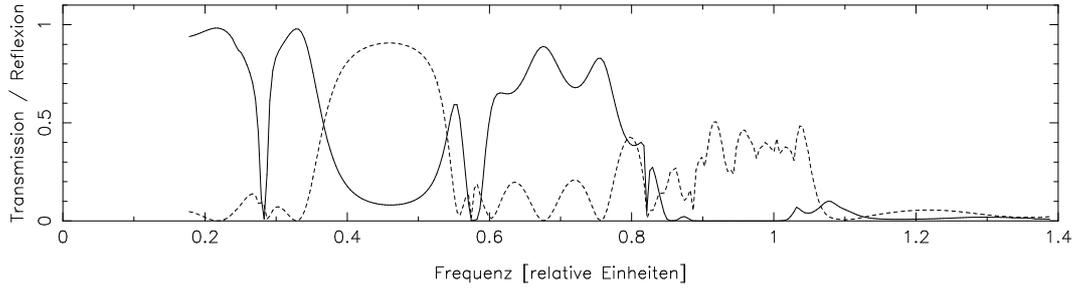


Abbildung 6.3: Transmission (durchgezogene Kurve) und Reflexion (gestrichelte Kurve) der S-Polarisation in Abhängigkeit von der relativen Frequenz für quadratisch angeordnete Zylinder aus Silber. Die niederfrequenterere Nullstelle der Dispersionsrelation liegt bei $\omega_{rel} \approx 1,05$. D.h. $\omega_{rel} = 1$ entspricht ca. 3,6 eV.

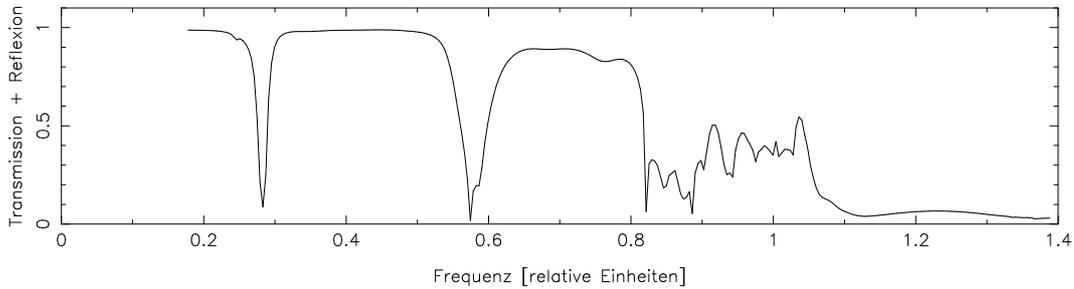


Abbildung 6.4: Summe aus Transmission und Reflexion der S-Polarisation in Abhängigkeit von der relativen Frequenz für quadratisch angeordnete Zylinder aus Silber. Die niederfrequenterere Nullstelle der Dispersionsrelation liegt bei $\omega_{rel} \approx 1,05$. D.h. $\omega_{rel} = 1$ entspricht ca. 3,6 eV.

alteils von ε , der dafür sorgt, dass die Felder stark aus den Zylindern gedrängt werden.

Die weiteren Strukturen kann man bei dieser Polarisationsrichtung zunächst nicht weiter zuordnen. Man erkennt bei höheren relativen Frequenzen (ab ca. $\omega_{rel} = 0,8$) die kaum noch ausgeprägte Transmission bei der Rechnung für Silber. Dabei stellt sich die Frage, inwieweit es sich dabei um Reflexion oder um Absorption handelt, deshalb betrachten wir im Folgenden für diese Polarisation nun Absorption und Reflexion.

In Abb. 6.3 erkennt man, dass für $0,8 < \omega_{rel} < 1,1$ noch deutlich Reflexion vorhanden ist, aber oberhalb von $\omega_{rel} = 1,1$ sind sowohl Transmission wie auch Reflexion stark unterdrückt. Das war auch zu erwarten, da oberhalb der niederfrequenteren Nullstelle des Realteils von ε die Absorption deutlich zunimmt. Betrachtet man sich die Summe aus Absorption und Reflexion (Abb. 6.4), so kann man sehr gut erkennen in welchen Frequenzbereichen viel absorbiert wird. Dabei

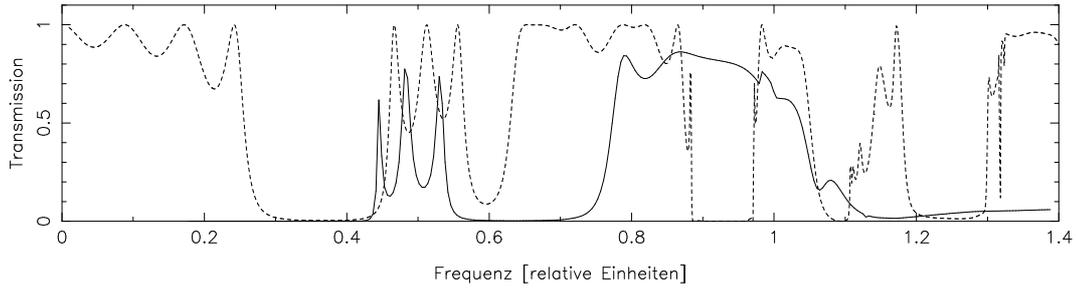


Abbildung 6.5: Vergleich der Transmissionsspektren der P-Polarisation für acht Schichten quadratisch angeordneter Zylinder mit $\varepsilon = 8,9$ (gestrichelte Linie) und Silber (durchgezogene Linie). Die niederfrequenter Nullstelle der Dispersion liegt bei $\omega_{rel} \approx 1,05$. D.h. $\omega_{rel} = 1$ entspricht ca. 3,6 eV.

erkennt man, dass es unterhalb von $\omega_{rel} = 0,8$ nur in 2 schmalen Frequenzbereichen deutliche Absorption gibt, nämlich bei $\omega_{rel} = 0,28$ und $\omega_{rel} = 0,54$. Ansonsten ist in diesem Bereich auch bei den betrachteten acht Schichten noch kaum Absorption vorhanden. Dies zeigt, dass es durchaus möglich ist, diesen Frequenzbereich zu betrachten um auch praktisch anwendbare Strukturen zu erhalten.

Die Tatsache, dass die Absorption so stark variiert, obwohl dies nicht direkt aus der Absorptionkurve hervorgeht, hängt vermutlich mit der unterschiedlichen Lokalisierung der Felder in der Einheitszelle zusammen. In der Einheitszelle ist nur der Bereich der Zylinder absorbierend. Allerdings sind die Verteilungen der Felder von der Frequenz abhängig, und somit muss die Absorption der Struktur nicht der Absorptionskurve des Materials folgen. Befinden sich Felder größtenteils außerhalb der absorbierenden Bereiche, so kann auch bei relativ hoher Absorption des Materials die effektive Absorption recht klein werden.

Betrachtet man die gleichen Aspekte für die P-Polarisation im direkten Vergleich der Rechnung mit einem nicht absorbierenden, dispersionsfreien Medium (Abb. 6.5), so erkennt man hier die Ähnlichkeit der beiden Spektren schon eher. Der Bereich zwischen $\omega_{rel} = 0,4$ und $\omega_{rel} = 0,6$ ist recht ähnlich, allerdings leicht verschoben. Im Spektrum mit Absorption und Dispersion ist das darauffolgende Minimum deutlich ausgeprägter und auch breiter. In diesem Frequenzbereich ist der Betrag des Realteils von ε sehr groß, wodurch die partiellen Bandlücken deutlich verbreitert werden. Dadurch werden im Transmissionsspektrum die Minima breiter und tiefer. Auch die nachfolgenden Peaks von ca. $\omega_{rel} = 0,8$ bis $\omega_{rel} = 1,1$ kann man dem Spektrum für $\varepsilon = 8,9$ zuordnen, allerdings sind diese zu höheren

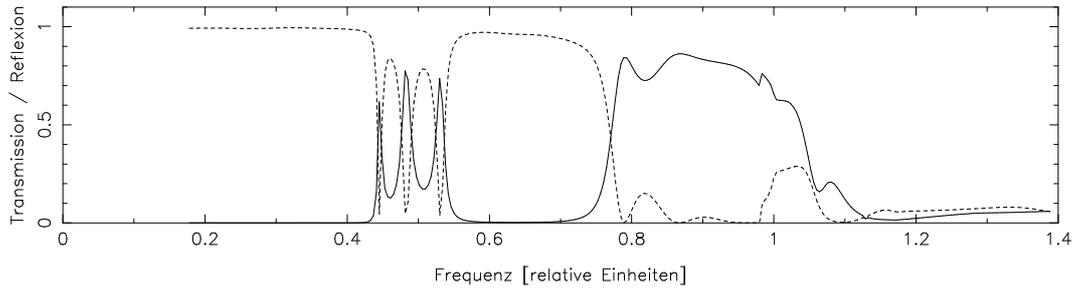


Abbildung 6.6: Transmission (durchgezogene Kurve) und Reflexion (gestrichelte Kurve) der P-Polarisation in Abhängigkeit von der relativen Frequenz für quadratisch angeordnete Zylinder aus Silber. Die niederfrequenterere Nullstelle der Dispersionsrelation liegt bei $\omega_{rel} \approx 1,05$. D.h. $\omega_{rel} = 1$ entspricht ca. 3,6 eV.

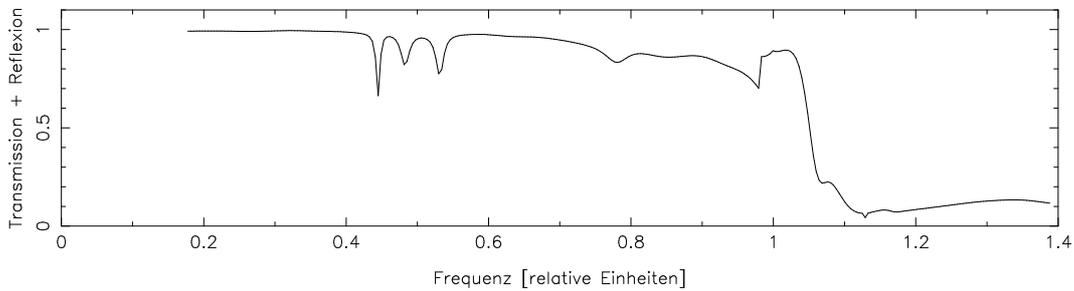


Abbildung 6.7: Summe von Transmission und Reflexion der P-Polarisation in Abhängigkeit von der relativen Frequenz für quadratisch angeordnete Zylinder aus Silber. Die niederfrequenterere Nullstelle der Dispersionsrelation liegt bei $\omega_{rel} \approx 1,05$. D.h. $\omega_{rel} = 1$ entspricht ca. 3,6 eV.

relativen Frequenzen verschoben. Oberhalb von $\omega_{rel} = 1,1$ ist auch hier kaum noch Transmission vorhanden.

Auch in diesem Fall betrachtet man Transmission und Reflexion (Abb. 6.6) bzw. die Summe aus Reflexion und Transmission (Abb. 6.7) und erkennt, dass hier bis zu dem Frequenzbereich, in dem die Absorption des Materials wieder stärker steigt ($\omega_{rel} \approx 1,05$), durch die acht Schichten des Materials kaum absorbiert wird. Wie zu erwarten, wird oberhalb dieses Bereichs auch hier wieder ein Großteil der einfallenden Strahlung absorbiert.

Im Großen und Ganzen erkennt man also für die P-Polarisation ein ähnliches Verhalten wie für die S-Polarisation. Allerdings kann man hier die Ausgangsstruktur des einfachen Dielektrikums besser erkennen. Im Bereich unterhalb des Nulldurchgangs des Realteils von ε findet deutlich weniger Absorption als bei der S-Polarisation statt. Sehr gut erkennt man, wie durch die vom Betrag großen Werte des Realteils von ε die Minima in der Transmission ausgeprägter (d.h. deutlich

breiter und auch tiefer) werden. Dies ist natürlich für die praktische Anwendung von Interesse, da zum einen Bandlücken ausgeprägter werden, oder überhaupt erst durch den hohen Kontrast entstehen, und umgekehrt auch mit relativ wenigen Schichten schon eine deutliche Reflexion bzw. eine Bandlücke Auswirkungen auf die Transmission und Reflexion vorhanden ist.

Insbesondere im Bereich der niedrigen Absorption von Silber sind sehr große Effekte in den Spektren zu erkennen, obwohl andererseits die Absorption in der gesamten Schichtdicke insgesamt eine eher untergeordnete Rolle spielt. Es tauchen zwar einzelne schmalbandige Bereiche auf, in denen die Absorption groß wird, aber insgesamt hat man in diesem Bereich trotz der eigentlich nicht verschwindenden Absorption immer noch eine fast vollständige Transmission. D.h., dass dieser Bereich von 1 eV bis ca. 3,6 eV für eventuelle Anwendungen durchaus von Interesse ist. Der Bereich der niedrigen (aber nicht verschwindenden) Absorption bei Silber besitzt also die positiven Eigenschaften, dass die Bandstruktur durch den hohen Betrag des Realteils stark ausgeprägt ist. Das bevorzugt die Bildung von Bandlücken bzw. sorgt dafür, dass verglichen mit anderen normalen dielektrischen Materialien deutlich dünnere Schichten schon ausreichen. Weiterhin ist dieser Bereich in den Transmissionsspektren bis auf schmalbandige Ausnahmen auch weitgehend absorptionsfrei. Der eventuell zu befürchtende Einfluss der immer noch vorhandenen Absorption des Silbers spielt hier fast keine Rolle. Dieser Bereich ist somit für eventuelle Anwendungen bestens geeignet. Hier empfiehlt sich die Betrachtung metallischer Systeme als Alternative zu den üblicherweise verwendeten rein dielektrischen Strukturen.

Etwas anders sieht es allerdings aus, wenn man den zweiten Fall betrachtet, der untersucht wurde, nämlich die Nullstelle des Realteils der Dispersion. Hierbei stellt sich die Frage, inwieweit der quasi beliebig große Kontrast verwendet werden kann, da im Bereich der Nullstelle auch die Absorptionskante des Materials liegt. Hier erkennt man, dass tatsächlich die Absorption eine definitiv nicht zu vernachlässigende Rolle spielt. Im Falle von Silber gibt es sogar zwei Nullstellen im Realteil der Dispersion. Betrachtet man die niederfrequenter Nullstelle, bei der noch am ehesten die Hoffnung besteht, dass die Absorption beherrschbar ist, so erkennt man, dass die Summe aus Transmission und Reflexion (also $1 - \text{Absorption}$) in diesem Bereich auf ca. $0,2 - 0,4$ (je nach Polarisation und konkreter Zellengröße) abgesunken ist. Gerade im Frequenzbereich um die niederfrequente Nullstelle

beginnt die Absorption, rapide an Bedeutung zu gewinnen. Die Nullstelle liegt in der Flanke der stark steigenden Absorption der Gesamtstruktur. Bei der zweiten Nullstelle ist die Absorption selbst bei acht Schichten schon fast vollständig, so dass diese für Anwendungen praktisch ohne Bedeutung ist.

Betrachtet man Abb. 6.1, so erkennt man, dass im Bereich der ersten Nullstelle die Absorption eigentlich nur unwesentlich größer ist als in dem bereits diskutierten Bereich zwischen 1 eV und 3,5 eV. Bei der niederfrequenten Nullstelle beginnt die Absorption eigentlich erst zu steigen. Allerdings zeigen die Rechnungen sehr deutlich, dass trotzdem die Absorption in diesem Bereich den erhofften Effekt zum größten Teil zunichte macht. Ein Großteil des eingestrahlt Lichts wird in diesem Bereich bereits von lediglich acht Schichten absorbiert. Für die Anwendungen bedeutet dies, dass eigentlich alle Anwendungen, bei denen es auf geringe Absorption ankommt (also insbesondere Anwendungen, die mit der Wellenleitung in Zusammenhang stehen), für diesen Bereich nicht in Frage kommen. Es gibt zwar in diesem Bereich noch Transmissionen bzw. Reflexionen, die deutlich oberhalb von 0 sind, aber immer nur in Verbindung mit den hohen Absorptionen. D.h. dieser Bereich kommt eigentlich nur für Anwendungen in Frage, bei denen die Struktur des Spektrums eine Rolle spielt, aber nicht das Verschwinden der Absorption. Für eigentlich fast alle möglichen Anwendungen trifft dies jedoch nicht zu. Somit ist insgesamt der Frequenzbereich um die Nullstelle der Dispersion für eine Anwendung aufgrund der Absorption nur sehr eingeschränkt verwendbar.

Da beim Vorhandensein einer Absorption die Skalierbarkeit der Systeme bezüglich Größe bzw. Energie verlorengelht, ist es natürlich von besonderem Interesse den Einfluss der Größe der Einheitszelle auf die Spektren zu untersuchen. (Bzw. äquivalent dazu kann man die Dispersionsrelation linear skalieren, was für die Rechnungen so durchgeführt wurde und äquivalent zur einer Änderung der Größe der Einheitszelle ist.) In Abb 6.8 ist ein Vergleich für den Fall der niederfrequenten Nullstelle von ε bei $\omega_{rel} = 1,05$, $\omega_{rel} = 1,52$ und $\omega_{rel} = 2$ gezeigt. (Dies entspricht größer werdenden Einheitszellen). Bei beiden Polarisierungen erkennt man, dass die Spektren bis zu dem Bereich, in dem die Absorption für die jeweilige Zellengröße relevant wird, sehr ähnlich verlaufen.

Die ungefähre Struktur der Spektren ist gleich, jedoch gibt es teilweise unterschiedliche Ausprägungen. Auffällig ist die Verschiebung des sehr schmalbandigen niederfrequenten Minimums in der Transmission. Für das Spektrum mit der Null-

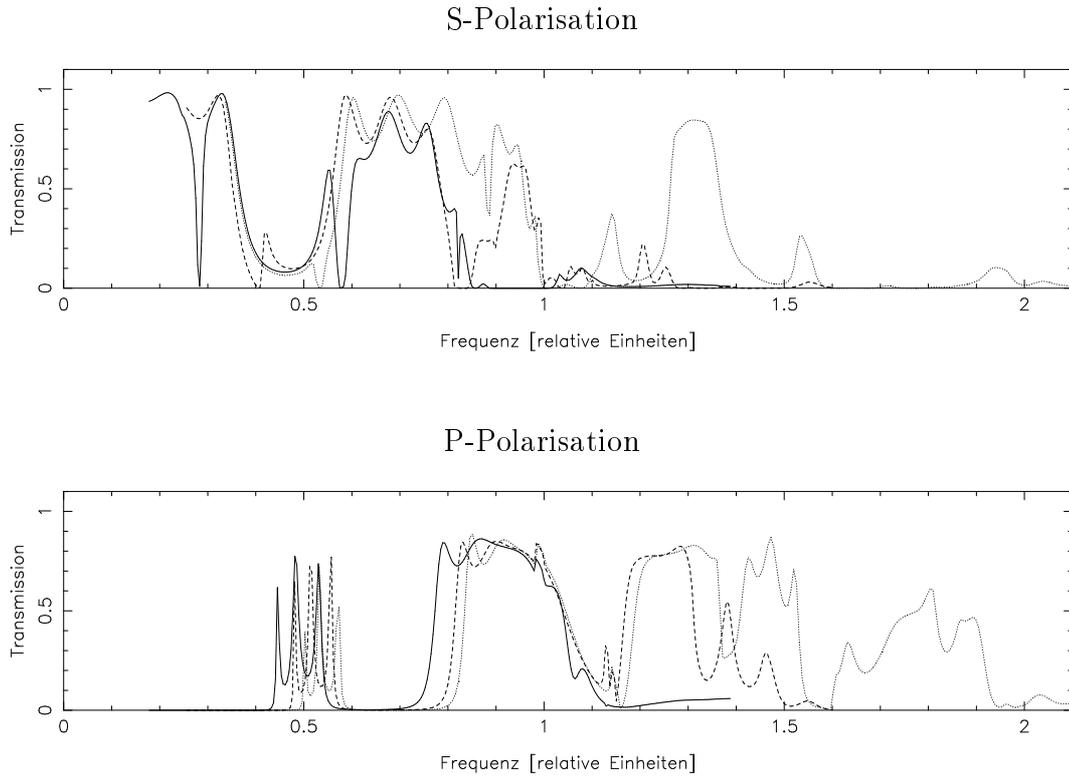


Abbildung 6.8: Transmission der S-Polarisation (oben) und P-Polarisation (unten) in Abhängigkeit von der relativen Frequenz für quadratisch angeordnete Zylinder aus Silber und verschiedene Größen der Einheitszelle: Nullstelle der Dispersionsrelation bei $\omega_{rel} \approx 1,05$ (durchgehende Linie. $\omega_{rel} = 1$ entspricht ca. 3,62 eV), Nullstelle der Dispersionsrelation bei $\omega_{rel} \approx 1,52$ (gestrichelte Linie. $\omega_{rel} = 1$ entspricht ca. 2,5 eV) und Nullstelle der Dispersionsrelation bei $\omega_{rel} \approx 2$ (punktierete Linie. $\omega_{rel} = 1$ entspricht ca. 1,8 eV).

stelle der Dispersion bei $\omega_{rel} = 1,05$ liegt diese bei $\omega_{rel} = 0,28$. Beim Spektrum mit der Nullstelle bei $\omega_{rel} = 1,52$ liegt dieses Minimum bei $\omega_{rel} = 0,41$, und für das Spektrum mit der Nullstelle bei $\omega_{rel} = 2$ liegt das Minimum bei $\omega_{rel} = 0,54$. Betrachtet man die jeweilige Skalierung der verschiedenen Spektren, so zeigt sich, dass es sich jeweils um etwa die gleiche absolute Frequenz handelt, die einer Energie von etwas mehr als 1 eV entspricht. Betrachtet man diese Frequenz in Abb. 6.1, so erkennt man, dass es sich dabei um den Bereich handelt, bei dem für kleiner werdende Frequenzen die Absorption stark ansteigt. Erstaunlich ist dabei also eher, dass im Spektrum diese Frequenz nur als relativ schmalbandiges Minimum auftritt und nicht einfach unterhalb dieser Frequenz alles absorbiert wird.

Andererseits fällt aber auch in diesem Bereich der Realteil von ε stark ab (d.h.

der Betrag wächst stark). Das deutet darauf hin, dass die Feldverteilung immer stärker von einer gleichmäßigen Verteilung wie im Fall des Vakuums abweicht und die Felder mit kleinen Frequenzen stark aus den Zylindern gedrängt werden. Wird die Frequenz erhöht, werden die Felder weniger aus den Zylindern gedrängt. Allerdings wird auch die Absorption immer kleiner. Lediglich im Bereich um 1 eV dringen die Felder tief genug in den Kristall ein und es ist ausreichend Absorption vorhanden, damit dies bemerkbar ist.

Bei der S-Polarisation sind diese Unterschiede etwas stärker ausgeprägt als bei der P-Polarisation, aber auch hier ist die unterste partielle Bandlücke bei $\omega_{rel} \approx 0,5$ in allen Fällen gut zu erkennen. Lediglich im Bereich zwischen $\omega_{rel} = 0,8$ und $\omega_{rel} = 1$ erkennt man Unterschiede, wie in den Lagen der scharfen Minima unterhalb dieser Frequenzen.

Zusammenfassend kann also festgestellt werden, dass die Spektren sich in den relativen Frequenzen trotz der Verschiebung der Dispersionrelation noch sehr ähnlich sind. Der Hauptunterschied ist hierbei in der Lage der schmalen Minima mit hoher Absorption in der S-Polarisation. Die partiellen Bandlücken unterhalb von $\omega_{rel} = 0,8$ sind in beiden Polarisationsrichtungen deutlich ausgeprägter als im Fall eines einfachen nicht-dispersiven, nicht-absorbierenden Mediums mit realistischem Wert für die Dielektrizität. Bei hohen Frequenzen, bei denen die Absorption wieder deutlich steigt, steigt auch generell die Absorption der Schichten sehr stark an. Es wird kaum noch Licht transmittiert oder reflektiert, was für praktische Anwendungen natürlich unbrauchbar ist. Hier empfiehlt es sich also, wirklich im Bereich der Dispersionskurve zu arbeiten, bei dem die Absorption sehr gering ist. (Bei Silber liegt dieser Bereich zwischen 1 eV und 3,5 eV.) Besonders interessant sind dabei der niederfrequente Abschnitt dieses Bereichs, da dort sowohl die Absorption gering, also auch der Betrag des Realteils von ε sehr groß wird.

6.3 Störstellen

Für die Anwendungen sind insbesondere immer wieder Systeme mit Störstellen von Interesse, da diese es ermöglichen, Zustände in der Bandlücke zu erhalten. Diese Zustände entsprechen dabei den Zuständen, bei denen sich das elektromagnetische Feld um die Störstelle konzentriert und sich nicht in den “regulären” Photonischen Kristall ausbreiten kann. So kann man z.B. solche 1-dimensionalen Störstellen in der Bandlücke zum verlustfreien Transport von Licht verwenden. Das Feld selbst konzentriert sich um die 1-dimensionale Störstelle (den Leiter) und kann sich im regulären Kristall selbst nicht ausbreiten, d.h. es kann verlustfrei entlang der Störstelle transportiert werden. Auch andere Konstellationen sind für die Anwendungen von Interesse, um z.B. einzelne Bauelemente aus der Halbleitertechnik im Optischen nachzubilden. Nachfolgend sollen nun die Ergebnisse der Rechnungen mittels des FDFD-Verfahrens zu Störstellen, sowohl mit einem “normalen” Dielektrikum, wie auch mit dem metallischen Äquivalent, gezeigt werden.

6.3.1 1-dimensionale Störstelle

Einfaches Dielektrikum

Als erstes Störstellensystem wird hier die 1-dimensionale Störstelle betrachtet. Diese Systeme sind insbesondere im Bereich der Wellenleitung von hohem Interesse, da diese 1-dimensionalen Störstellen einen möglichen Leiter durch den Photonischen Kristall darstellt. Insbesondere sind solche Systeme natürlich von Interesse, wenn der Photonische Kristall selbst eine Bandlücke besitzt, da sich dann außerhalb der Störstelle im Kristall keine Wellen ausbreiten können. Lediglich exponentiell abklingende Moden sind möglich. Solche 1-dimensionalen Störstellen sind also für die Anwendung von entscheidender Bedeutung und sollen deshalb auch mittels des FDFD-Verfahrens untersucht werden. Zur exemplarischen Untersuchung wird hierbei wieder ein 2-dimensionales System betrachtet. Als konkretes Problem dient ein Photonischer Kristall mit einer eindimensionalen Störstelle im 2-dimensionalen Photonischen Kristall mit quadratisch angeordneten Zylindern, bei dem in z -Richtung eine Reihe Zylinder fehlt. Die Einheitszelle des Systems kann man sich aus 5 einfachen Einheitszellen aufgebaut vorstellen, die in x -Richtung nebeneinander angeordnet sind und von denen, bis auf die

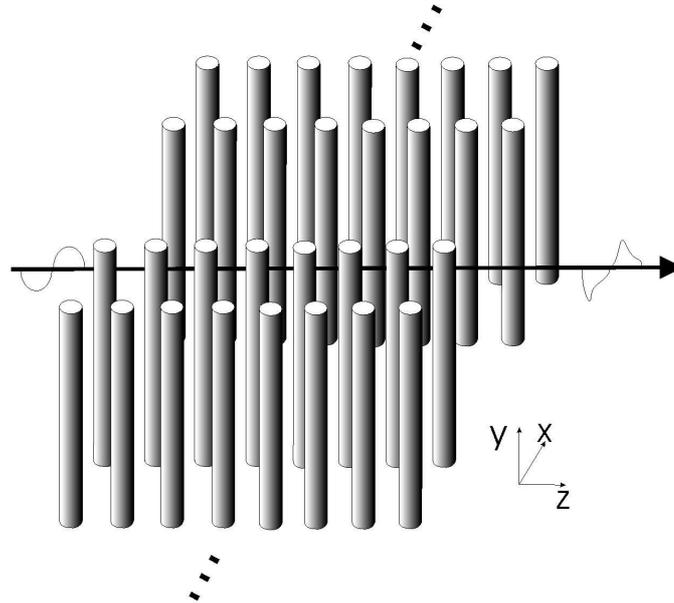


Abbildung 6.9: 2-dimensionale Struktur mit quadratisch angeordneten Zylindern mit einer 1-dimensionalen Störstelle als Wellenleiter, acht Schichten. Abgebildet sind hier eine Einheitszelle in x -Richtung und acht Einheitszellen in z -Richtung.

Mittlere, alle einen Zylinder enthalten und die mittlere Einheitszelle leer ist. Das Verhältnis von Radius des Zylinders und Dicke der einfachen Einheitszelle beträgt 0,2. Für die Zylinder ist $\varepsilon = 8,9$.

Die Rechnung wurde mit einer Schichtdicke von acht Schichten durchgeführt und mit einer regulären Rechnung ohne Störstellen verglichen. Für die Rechnung wurde ein $150 \times 1 \times 30$ -Gitter verwendet (also quasi ein $30 \times 1 \times 30$ -Gitter pro "einfacher" Einheitszelle) und es wurden drei Vakuummoden in x -Richtung betrachtet. Dabei erwartet man, dass durch die Störstelle eine Wellenleitung entsteht, also Zustände auftauchen, die in der Bandstruktur in der Bandlücke liegen.

In Abb 6.10 wird ein Vergleich zwischen dem Spektrum des Systems mit Störstelle sowie dem ungestörten System gezeigt. Dabei ist die durchgezogene Linie die des Systems mit der 1-dimensionalen Störstelle. Das ungestörte Ausgangssystem ist gestrichelt dargestellt.

Im Spektrum der S-Polarisation kann man sehr deutlich den Peak zwischen $\omega_{rel} = 0,6$ und $\omega_{rel} = 0,7$ erkennen, der sehr ausgeprägt mitten in einer lokalen Bandlücke der S-Polarisation liegt. Hierbei handelt es sich um ein typisches und stark ausgeprägtes Beispiel für die oben erwähnten "Leitungszustände" in den

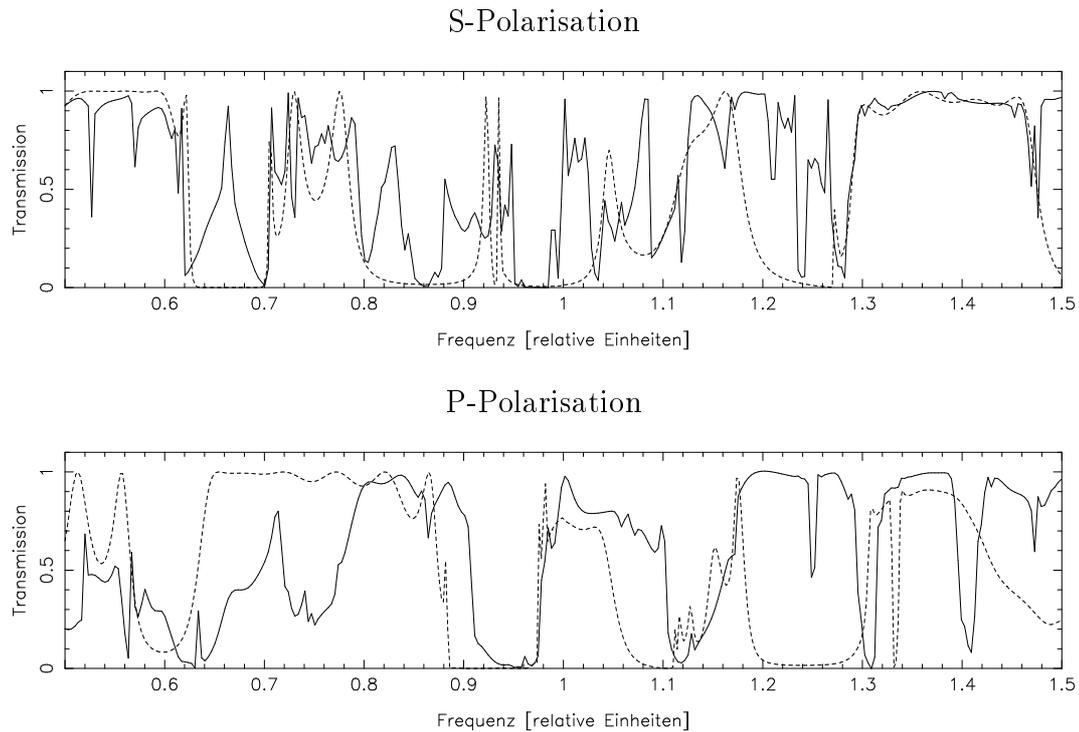


Abbildung 6.10: Transmission der S-Polarisation (oben) und P-Polarisation (unten) in Abhängigkeit von der relativen Frequenz für quadratisch angeordnete Zylinder mit acht Schichten mit $\varepsilon = 8,9$ (gestrichelt) im Vergleich mit einer Rechnung mit einer 1-dimensionalen Störstelle mit acht Schichten (durchgezogene Linie).

Bandlücken. Dieser Peak ist sogar so stark ausgeprägt, dass die Transmission fast bis auf 1 ansteigt, d.h. fast vollständige Transmission vorliegt. Aufgrund der Störstelle und des somit größeren benötigten Gitters, wurde das Frequenzraster grober gewählt als im einfachen Fall ohne Störstelle. Bei einem feineren Frequenzraster ist zu erwarten, dass der Peak im Idealfall sogar bis auf 1 ansteigt. Im unendlich ausgedehnten Fall kann die Welle sich nicht im Kristall ausbreiten. Dies stellt natürlich einen idealisierten Zustand dar, so dass im konkreten Fall der Wert etwas unterhalb von 1 liegen kann.

Etwas ober- und unterhalb dieses Leitungszustandes verhält sich das System mit der Störstelle in etwa wie das ungestörte System. Allerdings erkennt man zwischen ca. $\omega_{rel} = 0,8$ und $\omega_{rel} = 0,9$ Bereiche deutlicher Transmission, bei denen im ungestörten System eine Bandlücke vorliegt. Diese Peaks in der Bandlücke sind allerdings von der Transmission deutlich weniger ausgeprägt als der Leitungszustand bei $0,6 < \omega_{rel} < 0,7$. Jedoch erkennt man auch hier wiederum

noch eine sehr stark ausgeprägte Transmission mit Werten bis ca. 0,7. Insgesamt unterscheiden sich die Spektren des gestörten und des ungestörten Systems im Bereich $0,9 < \omega_{rel} < 1,3$ deutlich voneinander. So ist die Struktur des ungestörten Systems in diesem Bereich nur ansatzweise wiederzuerkennen. Es könnte auch bei $\omega_{rel} \approx 1$ ein stark an der Störstelle lokalisierter Zustand in der Bandlücke vorliegen, allerdings sind im Gegensatz zum Leitungszustand bei $\omega_{rel} \approx 0,65$ hier die Ränder der Bandlücke im gestörten System nicht wirklich erkennbar. Vielmehr liegt eine sehr deutliche Abweichung vom ursprünglichen System vor. Für eine eventuelle Anwendung ist die typische starke Lokalisierung um die Störstelle allerdings nicht so entscheidend, wie die Tatsache, dass hier Zustände hoher Transmission vorliegen, die im ungestörten Kristall (zumindestens fast) vollständig reflektiert werden. Zwischen $\omega_{rel} \approx 1,3$ und $\omega_{rel} \approx 1,5$ stimmen die Spektren beider Systeme sehr gut überein. Bei $\omega_{rel} = 1,5$ sieht man wiederum einen Leitungszustand angedeutet. Während im ungestörten System die Transmission gänzlich abfällt, steigt im System mit der Störstelle die Transmission auf einer breiten Basis auf fast 1 an.

Bei der P-Polarisation scheint die ungefähre Struktur des Spektrums in etwa erhalten zu bleiben, allerdings etwas verschoben zu höheren Frequenzen. Ab $\omega_{rel} \approx 1,2$ unterscheiden sich die beiden Spektren substantiell. Es ist dabei, ähnlich wie bei der S-Polarisation, nicht eindeutig bei den Frequenzbereichen hoher Transmission zwischen $\omega_{rel} = 1,2$ und $\omega_{rel} = 1,3$ von einem Leitungszustand (im Sinne eines stark um die Störstelle lokalisierten Zustandes) zu sprechen, da die Grundstruktur im gestörten System sich zu deutlich von der des ungestörten Systems unterscheidet. Allerdings ist auch hier wieder für die meisten Anwendungen entscheidend, dass es stark ausgeprägte Bereiche hoher Transmission in der Bandlücke des ungestörten Systems gibt. Interessant ist hierbei sogar, dass die Transmission auf einer sehr breiten Basis fast vollständig ist, d.h. man hat nicht nur einen sehr schmalbandigen Bereich, der genutzt werden kann, sondern die Frequenz kann sogar (bis auf einen schmalen Einbruch der Transmission) in einem relativen Bereich von 5% Abweichung ohne merklichen Verlust variiert werden.

Zusammenfassend erkennt man also in diesem System, insbesondere in der S-Polarisation, typische Leitungszustände ($\omega_{rel} \approx 0,65$ bzw. oberhalb von $\omega_{rel} \approx 0,8$). In beiden Spektren ergeben sich ausgeprägte Bereiche, in denen in lokalen

Bandlücken des ungestörten Systems deutlich ausgeprägte Transmissionen (häufig sogar fast vollständige Transmission) auftreten. Jedoch unterscheiden sich die Spektren teilweise so stark voneinander, dass man nicht unbedingt von einem “gestörten” Spektrum sprechen kann.

Silber-Zylinder

Führt man eine analoge Rechnung für Zylinder aus Silber durch, so ergibt sich ein deutlich unterscheidendes Ergebnis. In Abb. 6.11 und Abb. 6.12 sind die Spektren der gestörten Systeme im Vergleich zu den ungestörten Systemen gezeigt. Dabei genügt es im Falle des absorbierenden Mediums wiederum nicht, nur die Transmission abzubilden, da ansonsten nicht klar ist, ob der nicht-transmittierte Anteil absorbiert oder reflektiert wird. Im Prinzip würde genügen, entweder nur die Reflexion oder nur die Absorption (bzw. üblicherweise $1 - \text{Transmission}$) anzugeben, da sich die jeweils fehlende dritte Größe aus den beiden anderen errechnen lässt ($\text{Transmission} + \text{Reflexion} + \text{Absorption} = 1$). Allerdings sind der Übersichtlichkeit halber alle 3 Größen dargestellt.

Für die S-Polarisation findet man hier ähnliche Spektren für den gestörten und den ungestörten Fall, die sich jedoch in den Details deutlich unterscheiden.

Im Transmissionsspektrum der S-Polarisation erkennt man in beiden Fällen das recht breite Minimum um $\omega_{rel} = 0,4$ bis $\omega_{rel} = 0,5$. Allerdings ist dieses im Spektrum des Systems mit der 1-dimensionalen Störstelle deutlich strukturierter und es scheinen sich einzelne schwache Peaks innerhalb dieser Lücke auszubilden. Man erkennt in der Reflexion einen deutlichen Rückgang in diesem Bereich, was eventuell auf einen “Leitungszustand” (wieder im Sinne eines stark um die Störstelle lokalisierten Zustands) hindeutet. Allerdings erkennt man in der Absorption (bzw. in der Summe aus Transmission und Reflexion) deutlich, dass gerade zwischen $\omega_{rel} = 0,45$ und $\omega_{rel} = 0,5$ die Absorption stark ausgeprägt ist (die Summe von Transmission und Reflexion sehr klein wird), was auf einen Zustand hindeutet, der einen hohen Feldanteil innerhalb der Zylinder aufweist (also keinen typischen an der Störstelle konzentrierten Zustand).

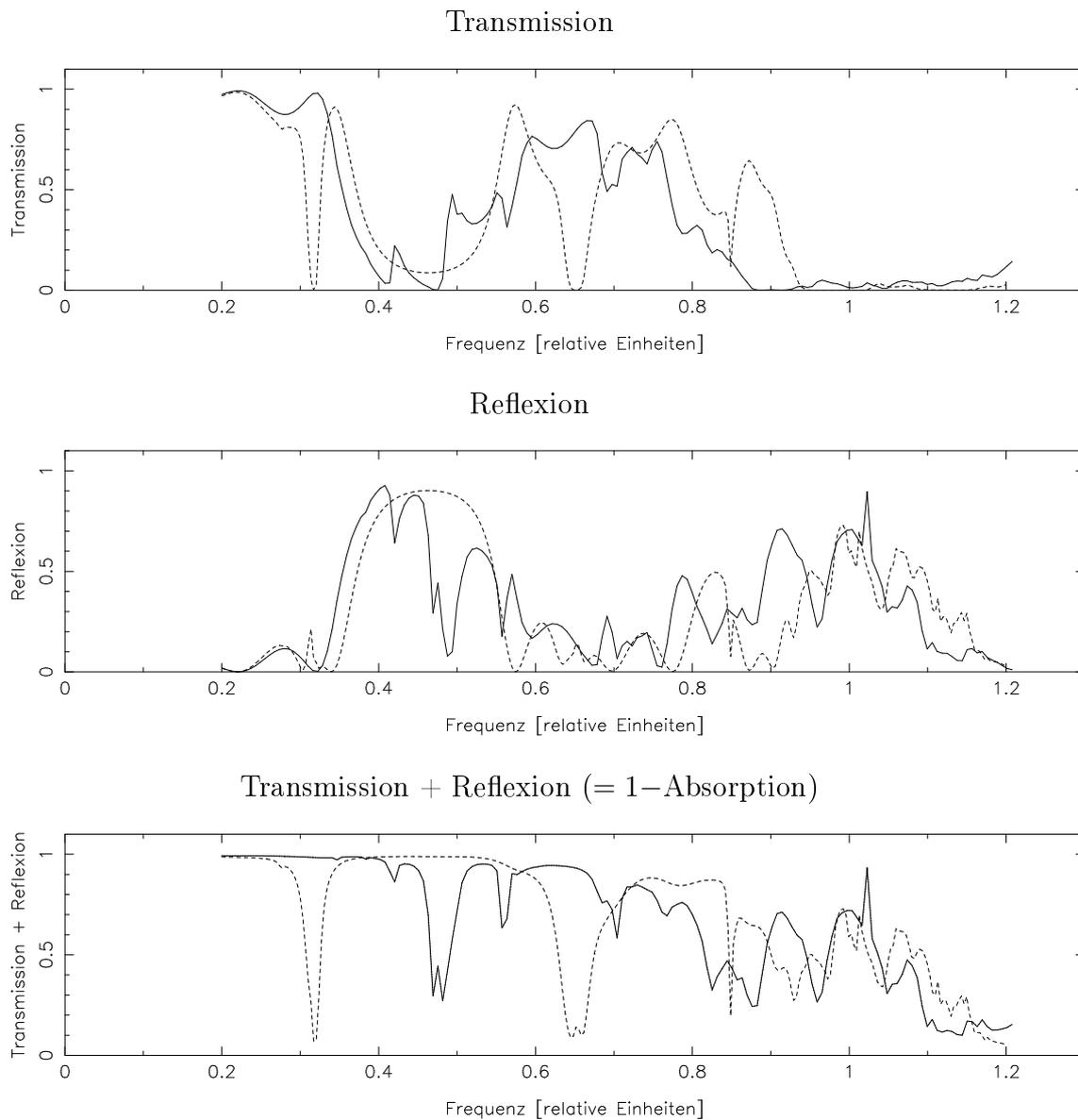


Abbildung 6.11: Transmission (oben), Reflexion (Mitte) und Transmission + Reflexion (unten) der S-Polarisation in Abhängigkeit von der relativen Frequenz für einfach quadratisch angeordnete Zylinder aus Silber ohne Störstelle (gestrichelte Linie) und mit 1-dimensionaler Störstelle (durchgezogene Linie). Beide Rechnungen sind für acht Schichten durchgeführt. In beiden Fällen ist die Skalierung der Dispersion (bzw. der Einheitszelle) so gewählt, dass die niederfrequenter Nullstelle bei $\omega_{rel} \approx 1,19$ liegt. D.h. $\omega_{rel} = 1$ entspricht ca. 3,2 eV.

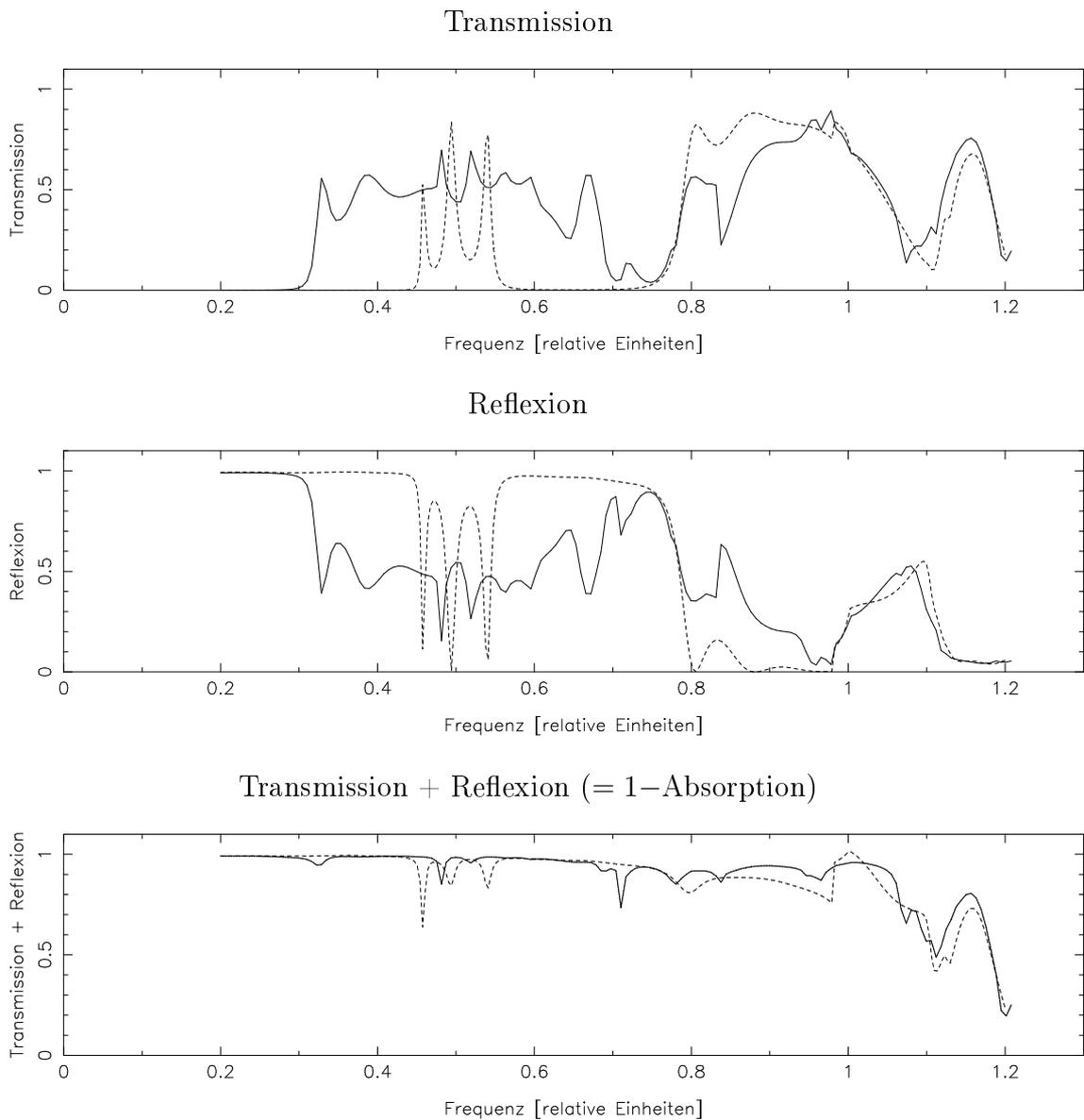


Abbildung 6.12: Transmission (oben), Reflexion (Mitte) und Transmission + Reflexion (unten) der P-Polarisation in Abhängigkeit von der relativen Frequenz für einfach quadratisch angeordnete Zylinder aus Silber ohne Störstelle (gestrichelte Linie) und mit 1-dimensionaler Störstelle (durchgezogene Linie). Beide Rechnungen sind für acht Schichten durchgeführt. In beiden Fällen ist die Skalierung der Dispersion (bzw. der Einheitszelle) so gewählt, dass die niederfrequenter Nullstelle bei $\omega_{rel} \approx 1,19$ liegt. D.h. $\omega_{rel} = 1$ entspricht ca. 3,2 eV.

Der nächste deutliche Unterschied im Transmissionsspektrum ist bei etwa $\omega_{rel} \approx 0,65$ zu erkennen. Während im ungestörten System hier quasi keine Transmission auftritt, erkennt man im gestörten System hier eine starke Transmission. Im Absorptionsspektrum zeigt sich, dass die verminderte Transmission in diesem Bereich jedoch hauptsächlich auf eine sehr starke Absorption zurückzuführen ist und nicht auf eine hohe Reflexion des Gitters. Im gestörten Fall findet in diesem Bereich fast keine Absorption statt. Insgesamt ist im Absorptionsspektrum sehr auffällig, dass die schmalbandigen Bereiche starker Absorption unterhalb von $\omega_{rel} \approx 0,8$ bei verschiedenen relativen Frequenzen auftreten, was die Vermutung nahelegt, dass das Vorhandensein der Störstelle die konkrete Lokalisierung der Felder bei den verschiedenen Frequenzen sehr stark beeinflusst, denn Absorption kann nur stattfinden, wenn die Felder beträchtliche Teile innerhalb der Zylinder aufweisen. D.h. Bereiche im Spektrum mit sehr hoher Absorption bedeuten immer auch, dass ein hoher Feldanteil innerhalb der Zylinder auftritt.

Abgesehen von den Absorptionspeaks unterhalb von $\omega_{rel} \approx 0,8$ zeigt sich, dass das Absorptionsverhalten des gestörten und des ungestörten Systems prinzipiell vergleichbar ist. Die Unterschiede zeigen sich stark in der Lage der einzelnen Bereiche starker Absorption bzw. in der konkreten Form, in der oberhalb von $\omega_{rel} \approx 0,8$ die Absorption zunimmt. Der grobe Verlauf ist jedoch vergleichbar: Bis etwa $\omega_{rel} \approx 0,8$ gibt es, abgesehen von einzelnen Frequenzbereichen mit sehr hoher Absorption, kaum Absorption. Ab $\omega_{rel} \approx 0,8$ nimmt die Absorption stark schwankend immer weiter zu bis zur fast vollständigen Absorption.

Für die P-Polarisation ergibt sich wieder ein etwas anderes Bild. Betrachtet man das Transmissionsspektrum der P-Polarisation, so erkennt man, dass oberhalb von $\omega_{rel} \approx 0,8$ das gestörte und das ungestörte System fast gleich verlaufen. Lediglich um $\omega_{rel} \approx 0,8$ ist ein kleiner Einbruch in der Transmission im System mit der Störstelle zu erkennen. Unterhalb von $\omega_{rel} \approx 0,8$ ist jedoch ein deutlicher Unterschied der Spektren zu erkennen. Während im ungestörten System nur ein kleiner Frequenzbereich mit deutlicher Transmission um $\omega_{rel} \approx 0,5$ vorliegt, ist im gestörten System für $0,3 < \omega_{rel} < 0,7$ ein Bereich mit deutlicher Transmission (um $T \approx 0,5$) zu erkennen. Auch hier hat man zwar nun Zustände in Bereichen, in denen vorher eine Bandlücke vorhanden war, aber ob man bei diesen Peaks in der Transmission wirklich von einem typischen "Leitungszustand" sprechen kann, ist anhand der Spektren nicht ohne weiteres zu klären. Dazu ist die ursprüngli-

che Struktur des ungestörten Systems zu wenig ausgeprägt. Es könnte sich dabei um die gesuchten Art von Zuständen handeln, aber es könnte auch einfach sein, dass die ungestörten Peaks um $\omega_{rel} \approx 0,8$ sich verbreitert haben. Im Allgemeinen erwartet man allerdings von den sogenannten “Leitungszuständen”, dass diese relativ schmalbandig sind, womit am ehesten noch der Peak bei ca. $\omega_{rel} = 0,67$ in Frage kommt. Da man beim FDFD-Verfahren nur Feldverteilungen für i.A. sehr komplexe Überlagerungen aus ein- und auslaufenden Moden erhält, ist es nicht trivial, Aussagen über die Feldverteilung bei einer einfachen einlaufenden Welle zu machen, die es erlauben würden zu entscheiden, ob es sich um einen stark an der Störstelle lokalisierten Zustand handelt. Allerdings stellt man im Absorptionsspektrum fest, dass es bis $\omega_{rel} \approx 1$ eigentlich fast keine Absorption, sowohl im ungestörten, wie auch im gestörten System gibt. D.h. diese Bereiche hoher Transmission in der ursprünglichen Bandlücke sind für eventuelle Anwendungen durchaus brauchbar, auch wenn die Felder eventuell nicht stark um die Störstelle lokalisiert sind, so können diese Frequenzbereiche sich trotzdem nicht als ebene Welle im restlichen Kristall ausbreiten. Als etwas ungünstig erweist sich jedoch, dass in diesem Fall alle Transmission in den Bandlücken des ungestörten Systems kleiner als 0,6 sind, d.h. ein deutlicher Anteil Reflexion vorliegt, was auf Probleme solcher Systeme beim Einkoppeln der Moden hindeutet.

Wie bereits erwähnt findet bis $\omega_{rel} \approx 1$ fast keine Absorption statt. Allerdings sind sowohl im ungestörten wie auch im gestörten Spektrum kleine Bereiche mit auftretender (wenn auch kleiner) Absorption zu erkennen. Auch hier sieht man wieder ein ähnliches Verhalten wie bei der S-Polarisation. Die Frequenzen, bei denen diese Absorptionen auftreten, verschieben sich, was wiederum auf deutlichen Veränderungen der Feldverteilung hindeutet.

Insgesamt erkennt man im Vergleich, dass die Spektren der Fehlstelle für das einfache Dielektrikum deutlich eher dem entsprechen, was man erwarten würde (schmalbandige Transmissionspeaks in den Minima/Bandlücken). Dies könnte mit dem deutlich höheren Kontrast in ε für Silber zu tun haben, welches in dem betrachteten Bereich für den Realteil von ε Werte von -20 bis -100 annehmen kann. Somit ist unter Umständen eine Beschreibung als “gestörtes System” nicht mehr wirklich zutrifft. (Weiter besitzt auch nicht jedes gestörte System Zustände in der Bandlücke.) Um dies weiter zu untersuchen, könnte man nun z.B. einen kontinuierlichen Übergang vom ungestörten zum gestörten System betrachten.

Dies wäre zum Beispiel möglich, indem man den Radius der im gestörten System fehlenden Zylinder, ausgehend vom ungestörten System, kontinuierlich verkleinert und beobachtet, wie sich die Spektren dabei verändern. Eventuell könnte man auch eine Reihe größer werdender Einheitszellen betrachten, d.h. statt einer 5×1 großen "einfachen" Einheitszellen $7 \times 1, 9 \times 1, \dots$. Es ist zu erwarten, dass bei einer Größe von 5×1 einfachen Einheitszellen noch minimale Wechselwirkungen zwischen den periodisch auftretenden Störstellen auftreten können, allerdings ist auch zu erwarten, dass diese keinen deutlichen Einfluss auf die Lösung haben, da die meisten Moden, die sich im Kristall nicht ausbreiten können nach 4 Schichten schon stark abgeklungen sind, weshalb zusammen mit dem hohen Zeitaufwand der Rechnungen auf diese verzichtet wurde.

Bei den Silber-Zylindern wird anhand der Absorptionsspektren (insbesondere der S-Polarisation) auch deutlich, dass die Betrachtung als "gestörtes" System nur eingeschränkt möglich ist. Die stark verschobenen Bereiche der Absorption (die auf stark in den Zylindern lokalisierte Felder hindeuten) zeigen, dass sich die Feldverteilung vom einfachen Kristall zum Kristall mit 1-dimensionaler Störstelle stark verändert hat.

In beiden betrachteten Fällen konnte beobachtet werden, dass sich in der Tat Zustände in der Bandlücke ausbilden. Im Fall des normalen Dielektrikums ist dies für beide Polarisationen zu beobachten, jedoch für die S-Polarisation am stärksten ausgeprägt. Für die P-Polarisation gibt es sogar breite Frequenzbereiche fast vollständiger Transmission, was für eventuelle Anwendungen von besonderem Interesse ist, da hier auch bei vielen Schichten kaum Absorptionsverluste auftreten, was insbesondere bei Anwendungen im Zusammenhang mit Wellenleitung von entscheidender Bedeutung ist.

Für das System aus Silber-Zylindern sind in der S-Polarisation solche leitenden Zustände in den Bandlücken nur schwach ausgebildet in der untersten breiten Bandlücke zu finden. In diesen Bereichen tritt auch eine deutlich erkennbare Absorption auf. Für die P-Polarisation erkennt man andererseits, wo die möglichen Vorteile der metallischen Systeme liegen können. Man hat eine extrem breite Bandlücke von etwa $\omega_{rel} = 0,55$ bis $\omega_{rel} = 0,75$ und darin treten im Falle des Systems mit Störstelle deutlich Transmissionen auf (z.B. der Peak bei $\omega_{rel} = 0,66$). Aufgrund der starken Breite der Bandlücke ist zu vermuten, dass bei einer Anwendung hier deutlich weniger Schichten für eine fast vollständige Reflexion des

ungestörten Systems benötigt werden als bei einem System aus einem einfachen dielektrischen Material. Die Tatsache, dass die Transmission hier jedoch nicht fast vollständig ist, sollte sich in der Praxis durch eine geschickte Einkopplung der Moden in das System umgehen lassen, da man auch erkennt, dass die fehlende Transmission durch Reflexion und nicht durch Absorption zustande kommt.

Abschließend sollte somit insbesondere anhand der P-Polarisation deutlich werden, dass metallische Systeme eine deutliche und interessante Alternative zu den herkömmlichen nicht-metallischen Systemen mit einem einfachen Dielektrikum ohne Dispersion (und Absorption) darstellen. Zwar kann auch hier wieder der Bereich um die Nullstelle des Realteils der Dispersion aufgrund der hohen Absorption in diesem Bereich nicht genutzt werden. Allerdings erkennt man auch hier, wie im Fall des ungestörten Kristalls, dass der stark negative Wert des Realteils sehr breite Bandlücken erzeugen kann, die in der Tat auch genutzt werden können, ohne dass es zu einer merklichen Absorption kommt.

6.3.2 0-dimensionale Störstelle

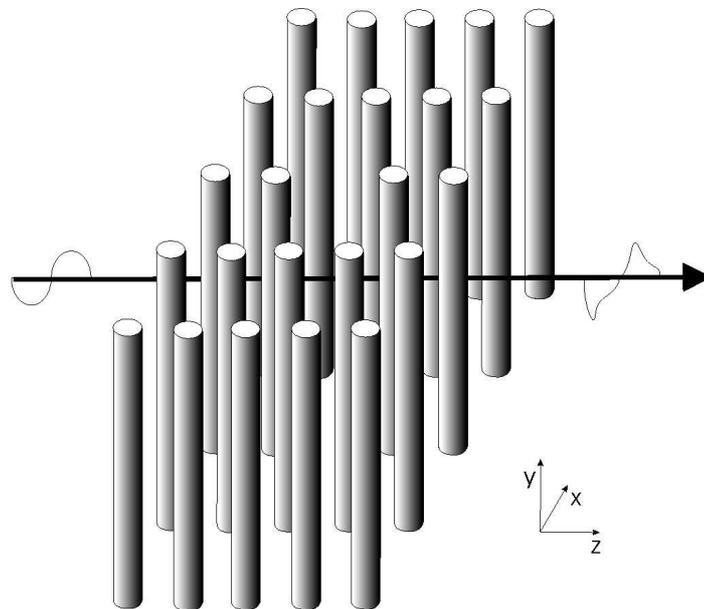


Abbildung 6.13: Einheitszelle eines 2-dimensionalen Photonischen Kristalls aus quadratisch angeordneten Zylindern mit einer 0-dimensionalen Störstelle.

Nicht nur die 1-dimensionalen Fehlstellen sind für mögliche Anwendungen wichtig, auch 0-dimensionale Fehlstellen sind, sowohl für die Anwendung, wie

auch für die Frage, wie sich Unregelmäßigkeiten im Photonischen Kristall auf dessen Eigenschaften auswirken, von Interesse. Da man eigentlich nie einen perfekten Photonischen Kristall erzeugen kann, ist die Frage entscheidend, wie sich mögliche Gitterfehler auf das Verhalten des Kristalls auswirken können. Eine solche 0-dimensionale Störstelle ist als Fehlstelle dabei eine der typischen möglichen Fehler. Für manche Anwendungen kann auch hier wieder die gezielte Störstelle von Interesse sein. Wenn man etwa einen gebundenen Atom-Photon-Zustand erzeugen will, so kann man das angeregte Atom an der Störstelle einbringen oder man kann auch Licht an einem Ort (der Störstelle) stark konzentrieren oder bei waagrecht Bändern sogar das Licht an der Störstelle “einschließen”. (Wie auch bei 1-dimensionalen Störstellen können bei bestimmten Frequenzen Lösungen auftreten, bei denen sich das Feld stark um die Störstelle lokalisiert.)

Als System mit einer 0-dimensionalen Störstelle soll hier wiederum das Ausgangssystem der quadratisch angeordneten Zylinder dienen. Man betrachtet nun eine Superzelle bestehend aus 5×5 einfache Einheitszellen, wobei der mittlere Zylinder entfernt wurde. In Abb. 6.13 ist die Einheitszelle der Superzelle abgebildet. Wie auch im Fall der 1-dimensionalen Störstelle, wurde dieses System zunächst mit Zylindern aus einem einfachen dielektrischen Material mit $\varepsilon = 8,9$ und anschließend mit Zylindern aus Silber betrachtet. Für die Berechnung wurde eine Schichtdicke von insgesamt 8 Superzellen gewählt. (Dies entspricht also 40 einfachen Einheitszellen.) Für die Diskretisierung der Superzelle wurde ein $130 \times 1 \times 130$ Gitter gewählt, und es wurden 3 Vakuummoden in x -Richtung verwendet.

Es ist darauf hinzuweisen, dass dies ein Beispiel ist, das mit der Transfer-Matrix-Methode nicht mehr in auch nur annähernd sinnvoller Weise zu berechnen ist. Wie wir in Kapitel 4 gesehen haben, brach die Transfer-Matrix-Methode (sehr optimistisch betrachtet) bei einer Anzahl von 40 Gitterpunkten in z -Richtung zusammen. Das entspräche in diesem Fall etwa acht Punkten pro primitiver Einheitszelle und es wären deutlich zu wenige Gitterpunkte, um ein halbwegs brauchbares Ergebnis zu bekommen. Aber auch bei der Verwendung von absorbierenden Materialien im Allgemeinen haben wir bereits gesehen, dass sich das Transfer-Matrix-Verfahren wegen seiner Behandlung der exponentiellen Moden als ausgesprochen ungeeignet erweist.

Einfaches Dielektrikum

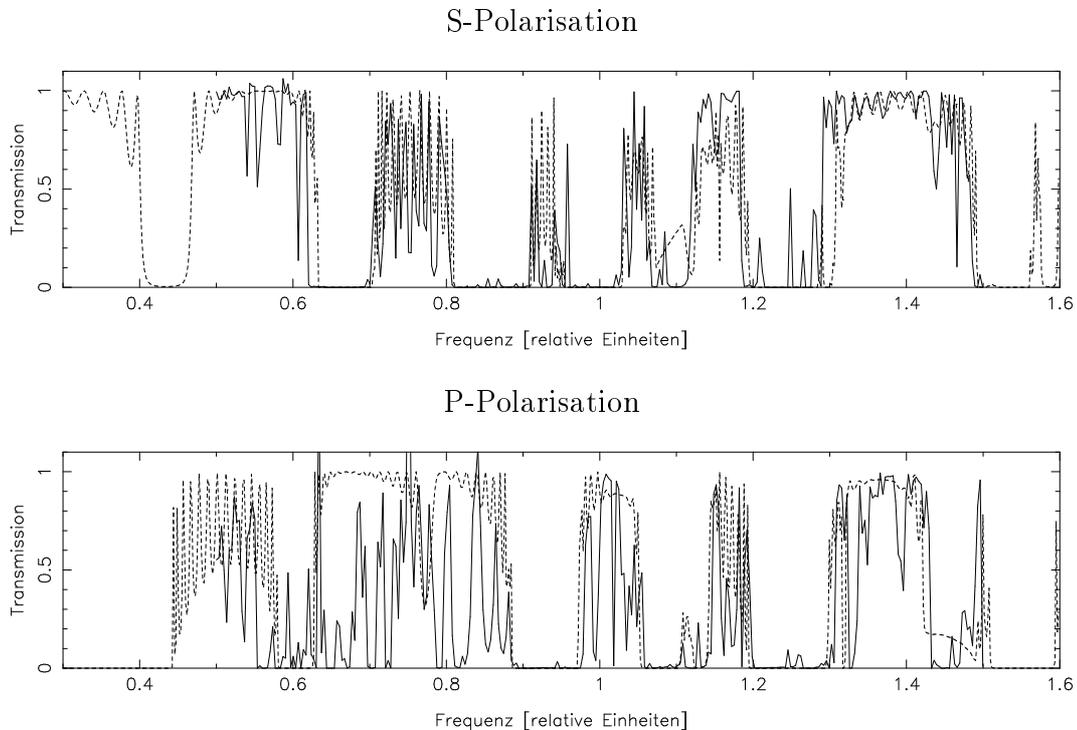


Abbildung 6.14: Transmission der S-Polarisation (oben) und P-Polarisation (unten) in Abhängigkeit von relativer Frequenz für quadratisch angeordnete Zylinder mit $\varepsilon = 8,9$ ohne Fehlstelle (gestrichelte Linie, 32 Schichten) und mit Fehlstelle (durchgezogene Linie, 8 Einheitszellen Schichtdicke was 40 normalen Schichten entspricht).

In Abb 6.14 sind die Transmissionsspektren der S- und P-Polarisation für das System mit einer Fehlstelle im Vergleich zu dem System ohne Fehlstelle gezeigt. Dabei wurde für die Vergleichsrechnung 32 Schichten verwendet, im Gegensatz zu acht Schichten für das System mit Fehlstelle. Allerdings ist jede Schicht bei der Rechnung für die Fehlstelle fünf Zylinder dick. Acht Schichten entsprechen also 40 Schichten der einfachen Einheitszelle der Vergleichsrechnung. Da üblicherweise die Schichtdicke durch wiederholtes Verdoppeln der Schicht erzeugt wird, bietet es sich an, eine Anzahl n von Schichtdicken zu wählen, die der Form 2^n entspricht. Deshalb wurden 32 Schichtdicken verwendet, was verhältnismäßig nahe an 40 Schichten kommt. Der Unterschied des Spektrums des ungestörten Kristalls für 32 und für 40 Schichten ist dabei eher im Detail zu suchen. Hauptsächlich ändert sich die Oszillation in den Bereichen vorhandener Transmission. Diese Oszillation

wird durch die Mehrfachreflexionen an den Enden der Schicht erzeugt. Insgesamt wäre auch bei der dickeren Schicht zu erwarten, dass die lokalen Bandlücken tiefer ausgeprägt sind. Allerdings ist auch bei 32 Schichten die Transmission in den lokalen Bandlücken so gering, dass sich keinen bedeutenden Unterschied mehr ergibt.

Betrachtet man nun das Transmissionsspektrum für die Rechnung mit Fehlstelle, so erkennt man eine generelle Übereinstimmung der Grundstruktur des Spektrums mit der Grundstruktur des Spektrums des Kristalls ohne Fehlstelle. Das ist auch zu erwarten, da es sich nur um eine geringe Variation handelt.

In beiden Polarisierungen erkennt man sehr gut, dass im System mit der Fehlstelle Bereiche hoher Transmission nur auftauchen, wo auch im ungestörten System deutliche Transmission vorhanden ist. Dabei ist bei der P-Polarisation dieser Bereich der Transmission im Bereich $\omega_{rel} = 0,6$ bis $\omega_{rel} = 0,7$, vergleichbar mit der 1-dimensionalen Störstelle, am wenigsten ausgeprägt.

Wie auch schon im Fall der 1-dimensionalen Störstelle ist es hier wieder wichtig, nach Transmissionen in den Bandlücken des ungestörten Systems zu suchen. Bei der S-Polarisation erkennt man einige sehr schwach ausgeprägte Bandlückenzustände im Bereich zwischen $\omega_{rel} = 0,8$ und $\omega_{rel} = 0,9$ und bereits stark ausgeprägte Transmissionen zwischen $\omega_{rel} = 1,2$ und $\omega_{rel} = 1,3$. Ebenso könnte der Peak bei $\omega_{rel} \approx 0,96$ ein solcher Transmissionspeak stark am Rand der Bandlücke sein. Der sehr stark ausgeprägte Leitungszustand der 1-dimensionalen Störstelle in der Bandlücke zwischen $\omega_{rel} = 0,6$ und $\omega_{rel} = 0,7$ ist hier komplett verschwunden.

Bei der P-Polarisation erkennt man im gestörten System Transmissionen in der Bandlücke bei $\omega_{rel} \approx 0,6$. Dies sind die am deutlichsten ausgeprägten Transmissionen innerhalb der Bandlücken. Außer diesen treten nur noch sehr schwach ausgeprägte Transmissionen in den Bandlücken auf ($\omega_{rel} \approx 0,95$, sowie zwischen $\omega_{rel} = 1,2$ und $\omega_{rel} = 1,3$).

Insgesamt wird hier im Vergleich zu den Spektren der 1-dimensionalen Störstelle deutlich, dass alle Transmissionen des gestörten Systems in den lokalen Bandlücken des ungestörten Systems sehr schmalbandig sind und insgesamt eine deutlich niedrigere Transmission-Werte aufweisen. Dies ist nicht weiter verwunderlich, da es sich im 1-dimensionalen Fall eher um "leitende" Störungen handelt, d.h. die Welle kann sich dort eher in z -Richtung ausbreiten, während sich hier

zwischen zwei Störstellen immer vier Einheitszellen des ungestörten Photonischen Kristalls befinden, in dem sich die Frequenzen der Bandlücke eben gerade nicht durch Wellenleitung ausbreiten können. Dies begründet, warum die allermeisten Transmissionen in den Bandlücken Werte $< 0,1$ besitzen. Erstaunlich groß sind dabei die Transmissionen zwischen $\omega_{rel} = 1,2$ und $\omega_{rel} = 1,3$ in der S-Polarisation und um $\omega_{rel} \approx 0,6$ in der P-Polarisation, die Werte von etwa $0,5$ erreichen.

Im Vergleich zur Rechnung mit der 1-dimensionalen Störstelle ist hier deutlich besser der Fall eines gestörten Systems zu erkennen. Das Spektrum ändert sich vom ungestörten Photonischen Kristall zu dem mit Störstelle nur unwesentlich. Einzelne Unterschiede sind zu erkennen, aber man erkennt im gestörten Spektrum (im Gegensatz zum Fall der 1-dimensionalen Störstelle) sehr gut das ungestörte Spektrum zusätzlich einiger Änderungen. Dies bedeutet auch auf die Frage hin, wie stark sich Fehlstellen auf das Verhalten des Photonischen Kristalls, insbesondere auf die Bandlücken auswirken, dass hier beim Fehlen jedes 25. Zylinders die Grundstruktur des Spektrums erhalten bleibt, jedoch teilweise schon deutlich Transmissionen in den Bandlücken auftreten können. Dabei weisen jedoch unterschiedliche Bandlücken unterschiedlich starke Transmissionen auf. In den allermeisten Fällen jedoch ist die Transmission durch den Kristall immer noch fast zu vernachlässigen.

Silber-Zylinder

Nun sei der analoge Fall für Zylinder aus Silber betrachtet. Dabei wurde die Einheitszelle so gewählt, dass die niederfrequente Nullstelle des Realteils von $\varepsilon(\omega)$ bei $\omega_{rel} \approx 1,08$ liegt.

Für die S-Polarisation erkennt man deutliche Unterschiede zwischen der Rechnung mit und ohne Fehlstelle. Dabei sind bei der Rechnung mit Fehlstelle die Minima der Transmission bei $\omega_{rel} \approx 0,3$ und $\omega_{rel} \approx 0,6$ nicht vorhanden. Bei diesen Minima findet im Gegensatz zum System ohne Störstelle keine starke Absorption statt. Stattdessen erkennt man im gestörten System, dass im Fall der Störstelle im breiten Minimum der Transmission bei $\omega_{rel} \approx 0,45$ eine starke Absorption auftritt (und auch ein kaum zu erkennender Peak bei der Transmission), während hier im ungestörten Fall fast vollständige Reflexion stattfindet. Auch im Bereich bis $\omega_{rel} \approx 1,1$ unterscheiden sich die Spektren. Ab dieser Frequenz sorgt die starke Absorption des Materials dafür, dass fast das gesamte eingestrahlte

Licht absorbiert wird. Ein Fehlstellenzustand in der Bandlücke, wie im Falle des einfachen Materials, ist hier nicht deutlich zu erkennen. Vielmehr erkennt man hier wieder, dass die Frequenzen, bei denen starke Absorption stattfindet sich im gestörten und im ungestörten System teilweise sehr deutlich unterscheiden. Dies deutet wieder auf einen deutlichen Einfluss der Störstelle auf die Lokalisation der Felder innerhalb des Kristalls hin. Die Unterschiede zeigen hier insgesamt, dass das Reflexionsspektrum des gestörten Kristalls insgesamt sehr gut mit dem des ungestörten übereinstimmt. Größter Unterschied ist hierbei der fast komplette Einbruch der Reflexion bei $\omega_{rel} \approx 0,45$. Allerdings liegt hier plötzlich eine starke Absorption vor. Das heißt es ist zu vermuten, dass durch die Störstelle hier eigentlich ein tiefes Eindringen des Lichts in den Kristall möglich ist. Allerdings führt diese durch die Absorption des Materials nicht zu einer deutlichen Transmission.

Für die P-Polarisation sind die Spektren mit und ohne Fehlstelle fast gleich. Im Bereich zwischen $\omega_{rel} = 0,8$ und $\omega_{rel} = 1$ ist für die Rechnung mit Fehlstelle eine insgesamt stärkere Absorption zu beobachten, was aber durch die Tatsache zu erklären ist, dass bei der Rechnung mit der Fehlstelle 40 "einfachen" Einheitszellen in z -Richtung auftreten, während bei der Rechnung ohne die Fehlstelle lediglich 32 einfache Einheitszellen vorliegen. Die Schicht mit der Störstelle ist also etwas dicker und somit ist auch zu erwarten, dass die Absorption etwas stärker ist.

Auffälligster Hauptunterschied ist das schmalbandige Auftreten der Absorption (bzw. ein Abfallen in der Summe aus Transmission + Reflexion) bei $\omega_{rel} \approx 0,7$. Weiterhin tritt auch genau bei dieser Frequenz im Spektrum eine sehr schwache Transmission in der Bandlücke des ungestörten Systems auf. Auch hier ist wieder zu vermuten, dass es sich um eine Frequenz handelt, die sich eigentlich durch die Störstelle im Kristall im Gegensatz zum ungestörten Fall deutlich ausbreiten kann. Das führt allerdings durch das nun tiefere Eindringen in den Photonischen Kristall zu einer deutlichen Absorption.

Im Vergleich mit dem einfachen dielektrischen Material mit $\varepsilon = 8,9$ erkennt man, dass bis zu relativ hohen Frequenzen für den Fall von Silber der Kristall in der P-Polarisation breitbandig sehr stark bis nahezu vollständig reflektierend ist. (Auf einem breiten Frequenzbereich ist die Reflexion sogar ≈ 1 .) Für das Auftauchen transmittierender Zustände in der Bandlücke ist Silber allerdings in diesem Fall zumindestens nicht geeignet. Dazu eignet sich das einfache dispersions- und absorptionsfreie dielektrische Material deutlich besser. Man erkennt zwar, dass es

wohl Zustände gibt, die transmittieren würden, die allerdings dadurch eine deutliche Absorption erzeugen. D.h. es gibt diese Zustände schon, aber die Absorption des Materials verhindert, dass diese zu einer merklichen Transmission führen.

Insgesamt erkennt man für den Fall der 0-dimensionalen Störstelle, dass hier der Begriff "Störung" im Spektrum deutlich eher angebracht ist als im Fall der 1-dimensionalen Störstelle. Bei der 0-dimensionalen Störstelle kann man auch im gestörten Spektrum die Ausgangsstruktur des ungestörten Spektrums noch deutlich erkennen. Zusätzlich tauchen auch die zu erwartenden Bereiche mit Transmissionen innerhalb der Bandlücke des ungestörten Systems auf. Dies ist insbesondere im Fall des normalen Dielektrikums zu erkennen. Im Fall der Silber-Zylinder treten zwar ansatzweise ebenfalls solche Frequenzen mit Transmissionen in der Bandlücke auf. Allerdings sind diese immer mit einer starken Absorption verbunden, was das System für direkte Anwendungen dieser Transmissionen eher unpraktikabel macht. Auffällig ist jedoch bei dem System aus Silber-Zylindern die insgesamt sehr breitbandige, fast vollständige Reflexion des Kristalls. Sie ist jedoch keine Eigenschaft des gestörten Systems, sondern tritt auch schon im ungestörten System auf, nicht jedoch im Fall der 1-dimensionalen Störung. Insgesamt deuten die Rechnungen darauf hin, dass für praktische Anwendungen mit 0-dimensionalen Störstellen die metallischen Systeme eher ungeeignet erscheinen, da gerade bei den interessanten Frequenzen in der Bandlücke auch starke Absorptionen auftreten. Hier bieten sich wohl für die meisten Anwendungen eher die regulären Dielektrika an.

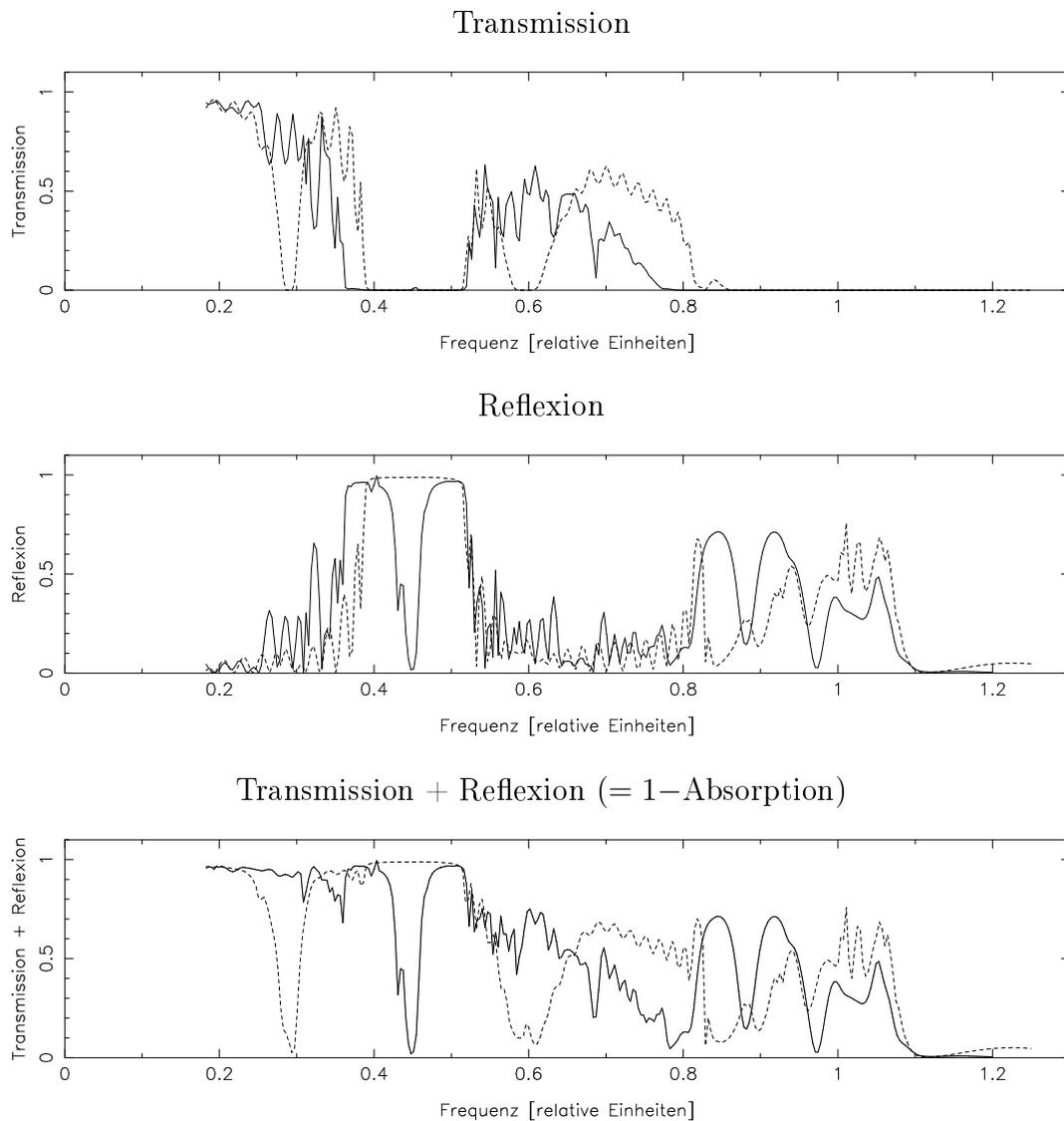


Abbildung 6.15: Transmission (oben), Reflexion (Mitte) und Transmission + Reflexion (unten) der S-Polarisation in Abhängigkeit von der relativen Frequenz für quadratisch angeordnete Zylinder aus Silber ohne Fehlstelle (gestrichelte Linie, 32 Schichten) und mit Fehlstelle (durchgezogene Linie, 8 Einheitszellen Schichtdicke, was 40 normalen Schichten entspricht). In beiden Fällen ist die Skalierung der Dispersion (bzw. der Einheitszelle) so gewählt, dass die niederfrequenter Nullstelle bei $\omega_{rel} \approx 1,08$ liegt. D.h. $\omega_{rel} = 1$ entspricht ca. 3,5 eV.

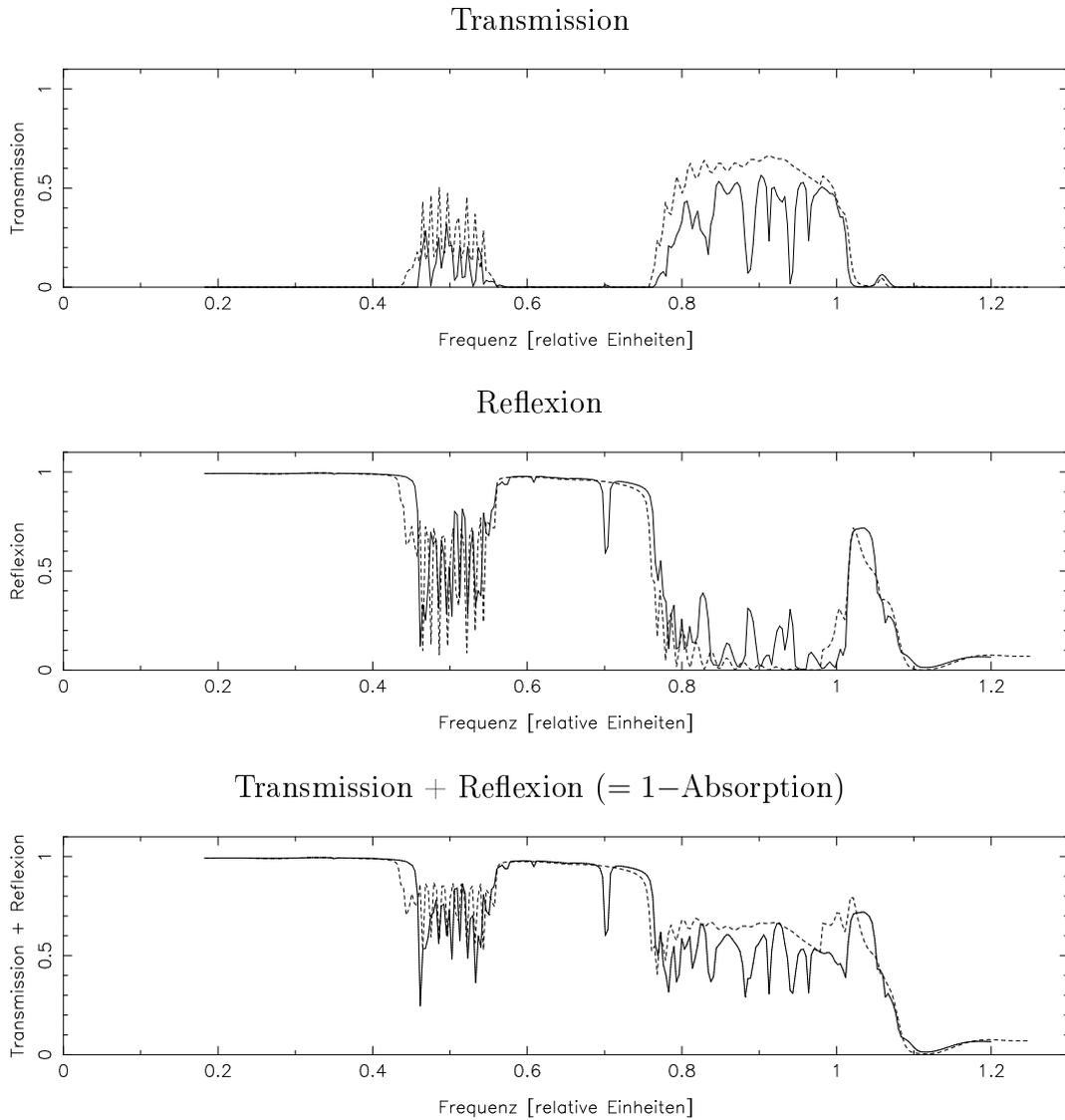


Abbildung 6.16: Transmission (oben), Reflexion (Mitte) und Transmission + Reflexion (unten) der P-Polarisation in Abhängigkeit von der relativen Frequenz für quadratisch angeordnete Zylinder aus Silber ohne Fehlstelle (gestrichelte Linie, 32 Schichten) und mit Fehlstelle (durchgezogene Linie, 8 Einheitszellen Schichtdicke, was 40 normalen Schichten entspricht). In beiden Fällen ist die Skalierung der Dispersion (bzw. der Einheitszelle) so gewählt, dass die niederfrequenter Nullstelle bei $\omega_{rel} \approx 1,08$ liegt. D.h. $\omega_{rel} = 1$ entspricht ca. 3,5 eV.

6.4 Zusammenfassung

In den drei betrachteten Fällen (einfaches (ungestörtes) metallisches System, 1-dimensionale Störstelle und 0-dimensionale Störstelle) konnte gezeigt werden, wo das Potential für metallische Systeme in der Anwendung liegt (dort wo die Absorptionen noch beherrschbar sind, bzw. wo ausgeprägte Störstellen-Zustände auftreten), und wo auch Begrenzungen dieser Anwendungen auftreten (eigentlich überall wo die Absorption zu stark wird). Dabei waren hauptsächlich zwei mögliche Unterschiede der Ausgangspunkt dieser Untersuchung. Zum einen die Nullstelle des Realteils von ε , was zu quasi beliebig großem Kontrast im Photonen Kristall führt, sowie die Ausnutzung des stark negativen Realteils von ε unterhalb der Nullstelle.

Dabei hat sich zunächst gezeigt, dass der Kontrast um die Nullstelle für einen schmalen Frequenzbereich zwar sehr hoch werden kann, allerdings kann dies in den Anwendungen nicht wirklich ausgenutzt werden, da auch bei einer Schichtdicke von nur 8 Einheitszellen schon eine Absorption $> 0,5$ auftritt. Das heißt für mögliche Anwendungen, dass nur solche überhaupt in Frage kommen, bei denen sehr dünne Schichten benötigt werden und bei denen es nicht auf die vollständige Transmission ankommt. Dies schränkt die möglichen Anwendungen sehr stark ein. Anwendungen aus dem Bereich der Wellenleitung werden damit fast vollständig ausgeschlossen.

Im Gegensatz dazu zeigen die Rechnungen jedoch, dass der Bereich, in dem die Absorption von Silber eher gering ist (1 eV bis 3,7 eV) und der Realteil von ε sehr stark negativ ist, durchaus für Anwendungen von Interesse sind. Der große Betrag von ε erlaubt es dabei, in Kontrast-Bereiche vorzudringen, die mit den regulären Dielektrika nicht zu erreichen wären. Dies zeigt sich auch in den berechneten Spektren. So sind die Spektren im Vergleich zum normalen Dielektrikum stark deformiert. Es zeigen sich im Vergleich zu dem Dielektrikum mit $\varepsilon = 8, 9$, welches schon einem sehr stark dielektrischen Material entspricht, eine sehr starke Verbreiterung der Bandlücken. Die Strukturen unterscheiden sich teilweise, aber die lokalen Bandlücken, die in den Rechnungen für Silber aufgetreten sind, waren im allgemeinen deutlich breiter als die auftretenden Bandlücken für das reguläre Dielektrikum. Weiterhin zeigt sich, dass für diesen Energiebereich auch die Absorption beherrschbar ist. D.h. es tritt zwar teilweise schmalbandig Absorption auf, aber bis zu einer Frequenz leicht unterhalb der niederfrequenten Nullstelle

der Dispersion tritt die Absorption lediglich in begrenzten Frequenzbereichen auf. Dort kann sie allerdings sehr groß werden.

Für das System der 1-dimensionalen Störstelle konnten sowohl im Fall des normalen dielektrischen Materials, wie auch im Fall von Silber-Zylindern Frequenzen mit Transmissionen in den lokalen Bandlücken des ungestörten Systems gefunden werden. Allerdings hat sich in beiden Fällen auch gezeigt, dass die Abweichung vom ungestörten System zum Teil doch beträchtlich sein können. Insbesondere in der P-Polarisation für die Silber-Zylinder konnte man deutlich die starke Auswirkung der Materialeigenschaften von Silbers erkennen. Dort findet man zwischen $\omega_{rel} = 0,55$ und $\omega_{rel} = 0,75$ eine sehr breite Bandlücke im ungestörten System mit einer deutlichen ausgeprägten Transmission im System der 1-dimensionalen Störstelle, ohne dass dabei eine merkliche Transmission auftritt, was genau der Erwartungen entspricht, die man in diese Systeme setzt. Es konnte hier also gezeigt werden, dass es durch geeignete Wahl des Systems durchaus möglich ist, den Vorteil der extrem breiten Bandlücke auch mit Transmissionen in dieser Bandlücke im gestörten System zu kombinieren, ohne dass die Absorption dies wieder zunichte macht.

Im System der 0-dimensionalen Störstelle war sowohl im Fall des einfachen dielektrischen Materials, wie auch im Fall der Silber-Zylinder das ungestörte Spektrum zu erkennen. Es bildeten sich insbesondere im Fall des einfachen dielektrischen Materials wieder im gestörten System Transmissionen in den Bandlücken des ungestörten Systems aus. Im Fall der Silber-Zylinder wurde deutlich, dass die Frequenzen mit Transmissionen in den Bandlücken des ungestörten Systems auch zu sehr starken Absorptionen führen. Dies ist dadurch zu erklären, dass diese Zustände ursprünglich reflektiert wurden, nun aber deutlich in den Kristall eindringen. Im Gegensatz zur 1-dimensionalen Störstelle gibt es hier jedoch keinen ausgedehnten Bereich in z -Richtung, bei dem keine Silber-Zylinder vorliegen. Deshalb tritt hier auch eine deutliche Konzentration der Felder in den Zylindern auf. Das führt zu einer deutlich Absorption. Bei der 0-dimensionalen Störstelle bietet sich aufgrund dieser Absorption, die bei den Störstellenzuständen auftritt, deshalb die Verwendung von Silber als Material weniger bzw. nur eingeschränkt an.

Kapitel 7

Zusammenfassung

7.1 Vergleich mit anderen Arbeiten

Abschließend soll ein Vergleich mit anderen Arbeiten auf dem Themengebiet der metallischen Photonischen Kristalle durchgeführt werden. Dabei ist zu erwähnen, dass es auf diesem Gebiet nicht sehr viele theoretische Arbeiten gibt, da sich aufgrund der auch in dieser Arbeit erwähnten Probleme gezeigt hat, dass die metallischen Systeme theoretisch sehr schwierig vollständig und exakt zu behandeln sind. Eigentlich alle Arbeiten befassen sich mit den metallischen Systemen nur unter mehr oder weniger starken Einschränkungen. Meistens wird dabei insbesondere das Problem der konkreten Absorption des Systems nicht behandelt, was auch einen Vergleich mit den Ergebnissen dieser Arbeit erschwert, da es genau um diese Betrachtungen geht. Aus diesem Grund ist der Vergleich häufig recht allgemein gehalten, da ein Vergleich der exakten Ergebnisse aufgrund der unterschiedlichen Fragestellung nicht möglich oder nicht sinnvoll ist. Stattdessen wird auf die wichtigen Unterschiede in den Verfahren hingewiesen.

Einige der frühen Arbeiten in diesem Bereich stammen von Sigalas, Soukoulis, Chan und Ho [15], [16], die dispersive und auch absorbierende Materialien mittels der Transfer-Matrix-Methode untersuchten. Wie in der vorliegenden Arbeit gezeigt wurde, ist die Transfer-Matrix-Methode jedoch in sich numerisch instabil und kann nur für eine maximale Größe des verwendeten Raumgitters benutzt werden. Insbesondere für die Untersuchung der Absorption eines Systems ist die Transfer-Matrix-Methode, wie in der vorliegenden Arbeit gezeigt wurde, vollkommen ungeeignet, da es bei der Absorption genau um das Verhalten der ex-

ponentiell abklingenden Moden handelt, die wie in Kapitel 4 dargestellt, künstlich aus der Rechnung eliminiert werden mussten, damit die Transfer-Matrix-Methode überhaupt brauchbare Ergebnisse liefern kann.

Fan, Villeneuve und Joannopoulos [21] untersuchten metallische Systeme mittels einer FDTD-Methode (Finite Difference, Time Domain. Nicht zu verwechseln mit der hier vorgestellten FDFD-Methode). Dabei wurde das metallische System als perfekter Leiter behandelt. Für eine volle realistische Betrachtung ist diese Annahme in den meisten Fällen allerdings nicht ausreichend. Insbesondere nicht in den in der vorliegenden Arbeit besonders hervorgehobenen Bereichen um die Plasmafrequenz. Allerdings konnte in [21] gezeigt werden, dass die Diamantstruktur perfekter metallischer Systeme eine größere Bandlücke besitzt als die üblichen dielektrischen Systeme, was deutlich die Bedeutung der metallischen Systeme zeigt. Im Vergleich mit [21] ermöglicht das in der vorliegenden Arbeit verwendete Verfahren eine volle Berücksichtigung der Dispersion und Absorption und somit der exakten, nicht-idealisierten Material-Eigenschaften.

Arriaga, Ward und Pendry [28] diskutierten ein Verfahren zur Berechnung der Bandstruktur dispersiver Systeme mittels eines linear mit der Systemgröße skalierenden Verfahrens. Mittels diesen Verfahrens können allerdings nur Dispersionen der Form $\varepsilon^{-1} - 1 = \sum_n \frac{\alpha_n}{\omega - \beta_n}$ behandelt werden. Der Nachteil dieses Verfahrens besteht zunächst darin, dass man keine numerische (z.B. durch Experimente gegebene) Dispersion und Absorption verwenden kann. Es können lediglich typische Idealversionen wie $\varepsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\gamma)}$ betrachtet werden. Auch der Nachteil der Betrachtung von Bandstrukturen absorbierender Systeme (komplexes ε) kommt hier natürlich zum Tragen, da korrekterweise komplexwertige Wellenvektoren und Frequenzen betrachtet werden müssten. Auch hier besteht der Vorteil des in der vorliegenden Arbeit verwendeten Verfahrens darin, dass eine beliebige, numerisch gegebene Absorption und Dispersion verwendet werden und auch auf die Verwendung von Bandstrukturen verzichtet werden kann. (Dafür betrachtet man mit einem Transmissions-/Reflexions-/Absorptions-Spektrum jeweils nur eine Einstrahlrichtung auf den Photonischen Kristall)

1999 untersuchte Moroz [12] die Bandstrukturen metallischer Systeme, insbesondere mit der Betrachtung der Frequenzen nahe der Plasmafrequenz. Moroz untersuchte mittels eines zur Korringa-Kohn-Rostocker (KKR) analogen Methode Photonische Kristalle mit einer Dispersionsrelation $\varepsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}$. Dabei ging

er davon aus, dass in einem schmalen Frequenzband die Absorption sehr gering ist. Bei der Berechnung wurde die Absorption komplett vernachlässigt. Bei Vernachlässigung der Absorption zeigten sich in den Rechnungen sehr große Bandlücken für einfache fcc-Kristallstrukturen. Die Untersuchungen der vorliegenden Arbeit zeigen jedoch, dass die Vernachlässigung der Absorption (zumindest für Silber) nicht zulässig ist. Durch die in der vorliegenden Arbeit durchgeführte Berechnung der Absorption mittels des FDFD-Verfahrens konnte gezeigt werden, dass bei Testsystemen die Absorption um die Plasmafrequenz selbst bei wenigen Schichtdicken bereits sehr stark ausgeprägt ist, was die potentielle Verwendung der gefunden Bandlücken in den meisten Fällen leider ausschließt und deutlich zeigt, dass die Vernachlässigung der Absorption eigentlich nicht zulässig ist.

Sakoda et al [17] haben eine Variante des Finite Difference, Time Domain (FDTD) Verfahrens vorgestellt, bei dem im Unterschied zu [21] kein idealer Leiter sondern eine Dispersionsrelation betrachtet wurde. Als Beispiel wurde auch hier ein Drude-Verhalten in der Dispersion untersucht, allerdings mit dem Hinweis, dass mit diesem Verfahren auch beliebige numerische Dispersionen untersucht werden können (mittels eines selbst-konsistenten Verfahrens, wie auch schon allgemein für die ebenen-Wellen-Methoden besprochen). Auch diese Untersuchung lässt die Frage nach dem Einfluss der Absorption auf das System offen, die mittels des in dieser Arbeit vorgestellten Verfahrens betrachtet werden kann.

Moreno, Erni und Hafner [20] haben ein weiteres Verfahren vorgestellt, die "Multiple Multipole Method" (MMP). Mit diesem Verfahren kann, ähnlich wie in [17], die Bandstruktur eines Kristalls mit einer beliebigen Dispersion berechnet werden. Dieses Verfahren bietet allerdings deutliche Vorteile für nicht-sphärische Systeme. Doch auch hier gilt die gleiche Einschränkung wie bei [17], denn auch hier kann nur die Dispersion betrachtet werden. Die Absorption des Systems wird wieder vernachlässigt. Die Rechnungen der vorliegenden Arbeit zeigen jedoch, dass die Absorption sehr wohl in gewissen Frequenzbereichen im Photonischen Kristall stark ausgeprägt sein kann.

Auch bei weiteren Arbeiten (wie z.B. [32]) stellen die Berechnungen der Bandstrukturen für eine beliebige Dispersion mittlerweile kein echtes Hindernis für die Betrachtung metallischer Systeme dar, allerdings fehlt in diesen Betrachtungen jeweils eine Behandlung der Absorption. Ähnlich wie in [32] wird diese Betrachtung bestenfalls mittels einer zusätzlichen Rechnung mit der Transfer-Matrix-Methode

durchgeführt, die wie in der vorliegenden Arbeit gezeigt wurde insbesondere für den Fall der Absorption nicht geeignet ist. Somit bildet das in der vorliegenden Arbeit vorgestellte FDFD-Verfahren (Finite Difference Frequency Domain) die Möglichkeit sowohl die Absorption als auch die Dispersion in einem stabilen Verfahren zu betrachten und die durchgeführten Rechnungen zeigen auch deutlich, dass die Absorption auch bei eigentlich niedriger Absorption im betrachteten Frequenzbereich im Photonischen Kristall stark ausgeprägt sein kann.

7.2 Zusammenfassung

In dieser Arbeit wurden verschiedene Verfahren zur Berechnung Photonischer Kristalle und ihre Anwendbarkeit auf den Fall der metallischen Systeme vorgestellt und getestet. Üblich bei der Betrachtung Photonischer Kristalle sind dabei die ebenen-Wellen-Verfahren. Es ist zwar auch möglich mittels selbst-konsistenter Lösungen das Problem der Dispersion in die Bandstruktur-Rechnung zu integrieren (z.B. [32]), allerdings wird dabei der Einfluss der Absorption ignoriert. Die in dieser Arbeit durchgeführten vollen Rechnungen mittels des FDFD-Verfahrens haben jedoch gezeigt, dass dies keineswegs gerechtfertigt ist, da deutlich Absorptionen auftauchen können (obwohl die Rechnungen auch zeigen, dass teilweise breite Frequenzbereiche mit fast verschwindender Absorption auftreten). Zusätzlich stellt sich noch das Problem, dass diese Verfahren besonders dann effizient sind, wenn $\varepsilon(\vec{x})$ positiv definit ist. In den hier betrachteten Fällen ist dies allerdings nicht der Fall, da für das Metall im betrachteten Frequenzbereich $\varepsilon < 0$ und für das Vakuum $\varepsilon = 1$ ist. Dies ist kein prinzipielles Problem, führt jedoch dazu, dass das Verfahren deutlich langsamer wird. Ebenfalls problematisch ist die Betrachtung des Frequenzbereichs um die Nullstelle von $\varepsilon(\omega)$ für das Material, da das Verfahren durch die auftauchenden Terme $\frac{1}{\varepsilon}$ für kleiner werdendes ε immer schlechter konditioniert ist und somit numerisch immer schwieriger zu handhaben ist.

Eine alternative Plane-Wave-Methode, die jedoch die gleichen oben beschriebenen Probleme aufweist, allerdings die Dispersion direkt in das Verfahren einfügt, wurde mittels des modifizierten Plane-Wave-Verfahrens aufgezeigt und getestet. Allerdings fordert dieses Verfahren bei der unoptimierten Variante einen extrem hohen Rechenaufwand. Es wurde eine Testrechnung für ein (noch relativ

einfaches) 3-dimensionales System mittels der modifizierten Plane-Wave-Methode durchgeführt, allerdings war auch mit einer langen Rechenzeit (>4 Monate CPU-Zeit) keine wirklich konvergierte (oder nur für bestimmte Bänder konvergierte) Lösung zu erhalten.

Eine mögliche Verbesserung läge hier in der numerischen Bestimmung der Eigenwerte, die den numerischen Hauptaufwand darstellt. Hier hat man allerdings das Problem, dass durch die explizite Einsetzung der Divergenzgleichung und das Umstellen nach k_z und somit das Lösen eines eigentlich quadratischen Problems, die Matrix, deren Eigenwerte man berechnet, keine Symmetrie aufweist, die es ermöglichen würde, das Problem effizienter zu berechnen. Hier könnte IRAM eine Möglichkeit bieten, da man in der Regel nur wenige Eigenwerte und nur solche auf der reellen Achse (und auch dort nur im Bereich der 1. Brillouin-Zone) benötigt. Allerdings ist die System-Matrix hier dicht besetzt, was auch für Verfahren wie IRAM ein schlechtes Skalierungsverhalten ergibt, da man Matrix-Vektor-Produkte mit einer dicht besetzten Matrix berechnen muss. Außerdem konnte kein geeigneter Preconditioner gefunden werden, der die Iteration hinreichend schnell konvergieren ließ. Durch eine Optimierung des Verfahrens wäre hier eine deutliche Rechenzeitverbesserung möglich. Auf die Optimierung wurde in dieser Arbeit jedoch verzichtet, da wie bereits im Vergleich mit den anderen Verfahren gezeigt wurde, dass die Bandstrukturen auch mit anderen Verfahren einfacher bestimmt werden können, allerdings wieder das grundlegende Problem der Betrachtung mittels der Bandstruktur auftritt.

Aufgrund der Absorption sind bei den metallischen Systemen Verfahren mit Diskretisierung im Orts-Frequenz-Raum den ebenen-Wellen-Verfahren vorzuziehen, da bei diesen Orts-Frequenzraum-Verfahren die Absorption, sowie die Dispersion direkt integriert werden kann. Das üblicherweise bei Photonischen Kristallen verwendete Verfahren dieser Art ist die Transfer-Matrix-Methode. In dieser Arbeit wurde gezeigt, dass die Transfer-Matrix-Methode zwar in gewissem Rahmen funktioniert, aber aufgrund der im Verfahren vorhandenen numerischen Instabilität nur für eine eingeschränkte Anzahl von Gitterpunkten benutzt werden kann. Diese numerische Instabilität ist der Nachteil, mit dem man sich die explizite Form der Lösbarkeit der Diskretisierung erkaufte. Es konnte weiterhin gezeigt werden, dass innerhalb der Iteration von Schicht zu Schicht durch die Einheitszelle die Felder bei der Transfer-Matrix-Methode exponentiell anwachsen, sobald

eine Störung auftaucht (was beim Auftreffen auf eine dielektrische Struktur gegeben ist). Eine Betrachtung dieses Anwachsens für verschieden große Rauggitter zeigt, dass auch hier ein exponentielles Wachstum vorliegt. Je feiner das Gitter in z -Richtung gewählt wird, desto stärker ausgeprägt ist also diese Störung am Ende der Iteration durch die Einheitszelle. Mit dem Ansatz, dass man Anfangswert und Endwert quasi austauscht und so rechnet, als hätte man rückwärts durch die Einheitszelle iteriert kann man aus diesen aufklingenden Moden abklingende Moden machen. Allerdings bricht die Invertierung, die man durch diesen Ansatz durchführen muss, ab einer gewissen Anzahl von Gitterpunkten zusammen, denn die Konditionierung der zu invertierenden Matrix durch die (rein numerischen, nicht physikalischen) exponentiell steigenden Moden immer schlechter wird. (Das numerische Rauschen wird dabei immer größer, während der eigentlich interessante Anteil gleich groß bleibt, was die Invertierung des Systems ab einem gewissen Wert für dieses Rauschen durch die exponentiellen Moden ab einer bestimmten Anzahl Gitterpunkte zusammenbrechen lässt.) In den Bereichen, in denen diese Invertierung allerdings noch ausreichend funktioniert, liefert die Transfer-Matrix-Methode mit dem FDFD-Verfahren übereinstimmende Ergebnisse. Mit der gegebenen Rechengenauigkeit (die bestimmt, ab wann die Invertierungen zusammenbrechen) war es möglich mittels der Transfer-Matrix-Methode Gitter bis zu einer Dicke von ca. 30 Gitterpunkten zu berechnen. Allerdings waren bei diesen Rechnungen die dielektrischen Strukturen, ab denen sich die exponentielle Störung ausbreitet, in der Mitte der Einheitszelle. Hat man eine solche Störung durch ein Dielektrikum auch schon nahe am Rand der Einheitszelle, so ist zu erwarten, dass das Verfahren schon mit deutlich weniger Gitterpunkten kollabiert.

Durch die oben beschriebene Behandlung der exponentiellen Moden ist es auch nicht wirklich möglich absorbierende Systeme sinnvoll mit der Transfer-Matrix-Methode zu betrachten, da sich die Absorption eben gerade in solchem exponentiellen Verhalten der Felder widerspiegelt. Dieses Verhalten wird bei der Transfer-Matrix-Methode künstlich beseitigt, was durch die numerische Instabilität des expliziten Verfahrens numerische (nicht physikalische) Exponentialmoden nötig wird. Aus diesen Gründen ist es dringend erforderlich ein anderes Verfahren für die Untersuchung metallischer Systeme zu verwenden.

In dieser Arbeit wurde mit dem FDFD-Verfahren eine Alternative zur Transfer-Matrix-Methode auf die Photonischen Kristalle übertragen, implementiert, gete-

stet und angewandt. Mit Hilfe des FDFD-Verfahrens kann die numerische Instabilität der Transfer-Matrix-Methode umgangen werden und im Prinzip können beliebig große Probleme gelöst werden es wurde auch gezeigt, dass Berechnungen von Fehlstellen mit vergrößerter Einheitszelle durchführbar sind, die mit der Transfer-Matrix-Methode nicht (sinnvoll) möglich sind.

Es wurde dabei zunächst anhand der Testrechnungen gezeigt, dass das FDFD-Verfahren im Vergleich zur Transfer-Matrix-Methode funktioniert und die Ergebnisse in den Bereichen, in denen die Verfahren vergleichbar sind, sehr gut übereinstimmen. Der Nachteil des FDFD-Verfahrens gegenüber der Transfer-Matrix-Methode ist allerdings, dass man in der Transfer-Matrix-Methode zur Lösung der Maxwell-Gleichungen ein explizites (aber dafür instabiles) Verfahren verwenden kann, während man für das FDFD-Verfahren tatsächlich Gleichungssysteme lösen muss, die allerdings dünn besetzt sind. Es war hierbei bei noch vertretbarem Rechenaufwand möglich, Einheitszellen mit $130 \times 1 \times 130$ Gitterpunkten zu berechnen. Es ist zu erwarten, dass mit effizienterer Lösung der Gleichungssysteme auch deutlich größere Systeme berechenbar sind.

Auch die Behandlung der Absorption ist in diesem Verfahren problemlos möglich, da es für das Verfahren keine Rolle spielt, ob in der Numerik ebene Wellen auftauchen oder nicht. Es zeigt sich sogar in den Testrechnungen des Verhaltens einfacher Moden, dass das exponentielle Abklingen von Moden, die sich in einem einfachen Material ($\varepsilon(\vec{x}) = konst$) nicht ausbreiten können, korrekt wiedergegeben wird. (Siehe dazu Tabelle 5.1)

Das Hauptaugenmerk lag darauf zu zeigen, dass das FDFD-Verfahren funktioniert und im Gegensatz zu den sonst üblichen Verfahren alle Anforderungen an die Untersuchung metallischer Systeme erfüllt. Das Verfahren kann bezüglich der Effizienz durch besser angepasste Lösungsverfahren vermutlich noch weiter beschleunigt werden. Um die grundlegende Frage zu klären, ob metallische Systeme für Photonische Kristalle in Frage kommen, war die Rechengeschwindigkeit bereits ausreichend.

Bei der grundlegenden Frage, warum metallische Systeme von Interesse sein können, treten zwei Eigenschaften nahe der Plasmafrequenz auf, die gerade bei Silber deutlich zu erkennen sind. Zunächst hat man bei der Plasmafrequenz eine Nullstelle im Realteil von $\varepsilon_2(\omega)$, was dazu führt, dass man in Systemen mit einem nicht-dispersiven Material mit ε_1 und dem Metall um die Plasmafrequenz in klei-

nen Frequenzbereichen quasi beliebig große Kontrastwerte $\frac{\epsilon_1}{\epsilon_2(\omega)}$ erreichen kann. Ein hoher Kontrast begünstigt die Ausbildung der Bandlücken (sofern diese nicht aus Symmetriegründen ausgeschlossen sind). Häufig treten Bandlücken erst bei recht hohen Kontrastwerten auf, die teilweise mit normalen dielektrischen Materialien nicht erreicht werden können. Gerade in diesem Bereich beginnt die Absorption des Metalls allerdings stark zu steigen. Das wirft die Frage auf, ob dieser Bereich um die Nullstelle für praktische Anwendungen noch praktikabel ist, oder ob die Absorption dies zunichte macht. Die Rechnungen an den 2-dimensionalen System (sowohl mit als auch ohne Störstellen) zeigen dabei sehr deutlich, dass, obwohl bei der Nullstelle in der Dispersion von Silber die Absorption erst merklich zu steigen beginnt, die Absorption durch den Kristall schon sehr stark ausgeprägt ist. Es wurde gezeigt, dass bereits bei acht Schichten ein Großteil der einfallenden Welle absorbiert wird. Es ist zwar immer noch eine nennbare Transmission vorhanden, allerdings ist für die meisten Anwendungen eine geringe Absorption von Bedeutung. Somit zeigt sich, dass sich diese Eigenschaft des metallischen Systems, zumindestens im Fall von Silber, nur stark eingeschränkt ausnutzen lässt. Es ist zu vermuten, dass für andere Metalle dies sogar noch ungünstiger ausfällt, da Silber im Vergleich mit anderen Edelmetallen eher eine niedrige Absorption um die Nullstelle in der Dispersion aufweist ([7]).

Außer der Nullstelle im Realteil von $\epsilon(\omega)$ ist jedoch noch interessant, dass unterhalb der Plasmafrequenz der Realteil von $\epsilon(\omega)$ sehr stark negative Werte annehmen kann. Diese Werte sind vom Betrag zum Teil deutlich größer (bis zu einer Größenordnung) als das, was man mit einfachen dielektrischen Materialien erreichen kann. Weiterhin hat man in diesem Frequenzbereich eine zwar nicht verschwindende, aber dennoch eher geringe Absorption von Silber. Dadurch können zwar nicht beliebig hohe Werte für den Kontrast der Materialien erreicht werden, aber man erreicht Bereiche, die weit oberhalb von dem liegen, was man mit den normalen dielektrischen Materialien erhält. Bei der Untersuchung der verschiedenen Systeme, sowohl mit als auch ohne Störstellen, zeigt sich prinzipiell, dass im Gegensatz zur Nullstelle in $\epsilon(\omega)$ dieser Frequenzbereich für die Anwendungen von großem Interesse ist. Es zeigt sich in den Testsystemen, dass die Absorption der Systeme in einem breiten Frequenzbereich fast vollständig verschwindet. Es treten jedoch immer wieder gewisse Frequenzbereiche auf, bei denen die Absorption sehr groß werden kann. Für die Anwendungen sehr interessant ist jedoch,

dass sich bei diesen Systemen die Bandlücken teilweise sehr stark verbreitern und auch tiefer werden, ohne dass in diesem Bereich eine merkliche Absorption auftreten muss. (In endlichen Systemen bleibt auch im Bereich der Bandlücke eine minimale Transmission vorhanden.) Dies ist gerade, was man für die metallischen Systeme zu finden hofft: Die durch den hohen Kontrast erzeugte starke Verbreiterung von lokalen Bandlücken, ohne jedoch eine merkliche Absorption zu erhalten. Somit ist gezeigt, dass die zumindest Silber prinzipiell eine praktische Alternative zu den normalen dielektrischen Materialien darstellen, allerdings eher nicht im allgemein betrachteten Bereich der Plasmafrequenz, sondern unterhalb der Plasmafrequenz. (Bei Silber etwa von 1 eV bis 3.5 eV)

Zusätzlich wurden auch 1-dimensionale und 0-dimensionale Störstellensysteme eines einfachen dielektrischen Materials ($\varepsilon = 8, 9$) und aus Silber betrachtet und miteinander verglichen.

Die 1-dimensionale Störstelle ist etwas, das typischerweise in den Anwendungen bei Wellenleitern o.ä. auftritt. Der Grundgedanke ist dabei, dass man in einen (idealisierte Weise unendlich ausgedehnten) Photonischen Kristall eine 1-dimensionale Störstelle einbringt. Findet man nun Frequenzen, die sich in dieser Störstelle ausbreiten können, die aber in einer totalen Bandlücke des ungestörten Kristalls liegen, so kann sich die Welle nicht in den Kristall ausbreiten (bzw. wird immer wieder zur Störstelle zurückreflektiert) und bleibt somit vollständig um die Störstelle konzentriert. In den Rechnungen für die 1-dimensionale Störstelle zeigt sich, dass sowohl für das normale dielektrische Material wie auch für Silber in den lokalen Bandlücken solche Frequenzen mit merklicher, teilweise sogar sehr hoher Transmission auftreten, ohne dass dies mit einer merklichen Absorption verbunden sein muss. Insbesondere in der P-Polarisation des metallischen Systems erkennt man sehr deutlich, wo die Stärken dieser Systeme liegen können. So erhält man sowohl eine sehr breite Bandlücke des ungestörten Systems, wie auch einen stark ausgeprägten Peak in der Mitte dieser lokalen Bandlücke, ohne merkliche Absorption. Es konnte also klar gezeigt werden, dass man auch im metallischen System die gewünschten Eigenschaften alle ohne merkliche Absorption erhalten kann, jedoch mit stark verbreiteter lokaler Bandlücke. Für die Anwendung bedeutet dies, dass eben metallische Systeme manche Bandlücke überhaupt erst global öffnen (durch den hohen benötigten Kontrast), aber auch, dass bei endlichen Schichten schon deutlich weniger Schichten benötigt werden um einen

mit normalen Materialien vergleichbaren Effekt zu erzielen. Auch hier zeigt sich wieder, dass metallische Systeme für diese Art von Anwendung bestens geeignet sind.

Die 0-dimensionale Störstelle tritt für Anwendungen häufig auf, wenn man Felder an einem Punkt stark konzentrieren oder “binden” will. In beiden Rechnungen erkennt man bei der 0-dimensionalen Störstelle eher das Spektrum des ungestörten Systems wieder als bei den Rechnungen der 1-dimensionalen Störstelle. Auch hier treten wieder im gestörten Spektrum Frequenzen mit vorhandener, wenn auch teilweise sehr geringer, Transmission auf. Es zeigt sich insbesondere im metallischen System, dass die Transmissionen alle sehr gering sind. In einigen Fällen zeigt sich, dass stattdessen bei diesen Frequenzen in der Bandlücke die Absorption im Vergleich zum ungestörten System stark zunimmt. Dies zeigt, dass hier prinzipiell zwar eine Frequenz vorliegt, die von Interesse wäre, aber durch das jetzt tiefe Eindringen in den Kristall und eine deutlich Konzentration auf die vorhandenen Zylinder wird die Absorption auch deutlich ausgeprägt. Bei der 1-dimensionalen Störstelle konnte sich das Feld entlang der Störstelle ausbreiten, ohne sich dabei stark in den Zylindern konzentrieren zu müssen. Im 0-dimensionalen Fall ist dies nicht mehr möglich. Dies zeigt auch wo hier die eingeschränkte Benutzbarkeit dieser Fälle für metallische Systeme liegt. Es scheint so, dass gerade die Frequenzen mit Transmissionen in den Bandlücken des ungestörten Systems, auch zu einer deutlichen Absorption führen. Praktisch bedeutet dies, dass trotz der sehr breiten Bandlücke es unpraktisch ist, hohe Felder um diese Störstelle zu konzentrieren, da gerade diese Frequenzen sich bis zur Störstelle sehr schlecht ausbreiten bzw. dann vom umliegenden Material nicht nur reflektiert sondern auch deutlich absorbiert werden. Für Anwendungen dieses Typs sind die metallischen Systeme also nur eher eingeschränkt verwendbar.

Insgesamt konnte gezeigt werden, dass Systeme mit Silber (als Beispiel für metallische Systeme) für einige Anwendungen eine klare Alternative zu den einfachen dielektrischen Materialien darstellen. Zum einen weil hier zum Teil deutlich weniger Schichten für vergleichbare Effekte benötigt werden, zum anderen weil mittels der metallischen Systeme Kontrastwerte erreicht werden können, die mit den dielektrischen Systemen überhaupt nicht zugänglich sind und das, ohne dass die Absorption notwendigerweise diesen Vorteil wieder zunichte macht. Die metallischen Systeme sind dabei nicht für alle Arten von Anwendung geeignet, aber

in den Fällen in denen sie es sind, besitzen sie vielversprechende Eigenschaften.

Anhang A

Modifiziertes Plane-Wave-Verfahren

A.1 Verfahren

A.1.1 Formulierung als quadratische Eigenwertgleichung

Ausgangspunkt ist Gleichung (3.4)

$$\left(\frac{\omega^2}{c^2} \vec{u}_{\vec{k}, \vec{G}'} + \sum_{\vec{G} \in \Gamma} \left(\frac{1}{\varepsilon} \right)_{\vec{G}' - \vec{G}} (\vec{k} + \vec{G}') \times (\vec{k} + \vec{G}) \times \vec{u}_{\vec{k}, \vec{G}} \right) = 0, \quad \forall \vec{G}' \in \Gamma, \quad (\text{A.1})$$

in der das doppelte Kreuzprodukt durch die Formel $\vec{a} \times (\vec{b} \times \vec{c}) = (\vec{a} \cdot \vec{c})\vec{b} - (\vec{a} \cdot \vec{b})\vec{c}$ bestimmt wird:

$$\begin{aligned} & (\vec{k} + \vec{G}') \times \left((\vec{k} + \vec{G}) \times \vec{u}_{\vec{k}, \vec{G}} \right) \\ &= ((\vec{k} + \vec{G}') \cdot \vec{u}_{\vec{k}, \vec{G}}) (\vec{k} + \vec{G}) - \left((\vec{k} + \vec{G}') \cdot (\vec{k} + \vec{G}) \right) \vec{u}_{\vec{k}, \vec{G}}. \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

Diese Gleichung schreibt man in eine Matrixgleichung in $\vec{u}_{\vec{k}, \vec{G}}$ um und erhält damit:

$$\begin{aligned}
& (\vec{k} + \vec{G}') \times \left((\vec{k} + \vec{G}) \times \vec{u}_{\vec{k}, \vec{G}} \right) \\
&= \left[\begin{pmatrix} (k_x + G'_x)(k_x + G_x) & (k_y + G'_y)(k_x + G_x) & (k_z + G'_z)(k_x + G_x) \\ (k_x + G'_x)(k_y + G_y) & (k_y + G'_y)(k_y + G_y) & (k_z + G'_z)(k_y + G_y) \\ (k_x + G'_x)(k_z + G_z) & (k_y + G'_y)(k_z + G_z) & (k_z + G'_z)(k_z + G_z) \end{pmatrix} \right. \\
&\quad \left. - ((\vec{k} + \vec{G}') \cdot (\vec{k} + \vec{G}))\mathbb{I} \right] \vec{u}_{\vec{k}, \vec{G}} \tag{A.3}
\end{aligned}$$

$$= [(\vec{k} + \vec{G}') \otimes (\vec{k} + \vec{G}) - ((\vec{k} + \vec{G}') \cdot (\vec{k} + \vec{G}))\mathbb{I}] \vec{u}_{\vec{k}, \vec{G}}.$$

Verwendet man diese Gleichung nun in Zusammenhang mit (3.4), so gilt:

$$\begin{aligned}
& \left(\frac{\omega^2}{c^2} \vec{u}_{\vec{k}, \vec{G}'} + \sum_{\vec{G} \in \Gamma} \left(\frac{1}{\varepsilon} \right)_{\vec{G}' - \vec{G}} (\vec{k} + \vec{G}') \times (\vec{k} + \vec{G}) \times \vec{u}_{\vec{k}, \vec{G}} \right) = 0 \\
& \Leftrightarrow \sum_{\vec{G} \in \Gamma} \left[\left(\frac{\omega^2}{c^2} \delta(\vec{G} - \vec{G}')\mathbb{I} + \left(\frac{1}{\varepsilon} \right)_{\vec{G}' - \vec{G}} \left\{ -((\vec{k} + \vec{G}') \cdot (\vec{k} + \vec{G}))\mathbb{I} \right. \right. \right. \tag{A.4} \\
& \quad \left. \left. \left. + \begin{pmatrix} (k_x + G'_x)(k_x + G_x) & (k_y + G'_y)(k_x + G_x) & (k_z + G'_z)(k_x + G_x) \\ (k_x + G'_x)(k_y + G_y) & (k_y + G'_y)(k_y + G_y) & (k_z + G'_z)(k_y + G_y) \\ (k_x + G'_x)(k_z + G_z) & (k_y + G'_y)(k_z + G_z) & (k_z + G'_z)(k_z + G_z) \end{pmatrix} \right\} \right\} \vec{u}_{\vec{k}, \vec{G}} \right] = 0,
\end{aligned}$$

mit

$$\delta(\vec{G}) = \begin{cases} 1, & \text{wenn } \vec{G} = \vec{0} \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases} \tag{A.5}$$

Zur übersichtlicheren Schreibweise führt man die Matrix-Größe $S_{\vec{G},\vec{G}'}$ ein:

$$S_{\vec{G},\vec{G}'} := \frac{\omega^2}{c^2} \delta(\vec{G} - \vec{G}') \mathbb{I} + \left(\frac{1}{\varepsilon} \right)_{\vec{G}' - \vec{G}} \left\{ - ((\vec{k} + \vec{G}') \cdot (\vec{k} + \vec{G})) \mathbb{I} \right. \quad (\text{A.6}) \\ \left. + \begin{pmatrix} (k_x + G'_x)(k_x + G_x) & (k_y + G'_y)(k_x + G_x) & (k_z + G'_z)(k_x + G_x) \\ (k_x + G'_x)(k_y + G_y) & (k_y + G'_y)(k_y + G_y) & (k_z + G'_z)(k_y + G_y) \\ (k_x + G'_x)(k_z + G_z) & (k_y + G'_y)(k_z + G_z) & (k_z + G'_z)(k_z + G_z) \end{pmatrix} \right\},$$

womit sich (A.4) auch kurz schreiben lässt als:

$$\sum_{\vec{G} \in \Gamma} S_{\vec{G},\vec{G}'} \vec{u}_{\vec{k},\vec{G}} = 0 \quad \forall \vec{G}' \in \Gamma. \quad (\text{A.7})$$

Zusätzlich zu (A.4) muss aber auch noch die Divergenzgleichung

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{H} = 0 \quad (\text{A.8})$$

aus den Maxwell-Gleichungen (2.3a) gelten. Dies kann dazu verwendet werden, eine der Feldkomponenten $u_{\vec{k},\vec{G}}^{(x)}$, $u_{\vec{k},\vec{G}}^{(y)}$ oder $u_{\vec{k},\vec{G}}^{(z)}$ zu eliminieren. Das hat zwei Vorteile. Man entfernt zum einen dadurch die unphysikalischen transversalen Moden aus dem Lösungsraum. Zum anderen verringert man die Anzahl der Gleichungen und Unbekannten um 1/3 und somit verringert man sowohl den Speicherverbrauch als auch die benötigte Rechenzeit. (Beides sogar um deutlich mehr als 1/3, da der Speicherverbrauch wie auch die benötigte Rechenzeit mit einer Ordnung $O(N)$, $N > 1$ anwachsen.)

Rein willkürlich wird hier die Komponente $u_{\vec{k},\vec{G}}^{(x)}$ gewählt. Das Verfahren funktioniert analog, wenn man stattdessen $u_{\vec{k},\vec{G}}^{(y)}$ wählt.

($u_{\vec{k},\vec{G}}^{(z)}$ kann hier nicht gewählt werden, da wir uns bei der Betrachtung als quadratische Eigenwertgleichung willkürlich auf k_z festgelegt haben. Wählt man eine andere k -Komponente, so muss die aus Gleichung (A.4) zu eliminierende Komponente von $\vec{u}_{\vec{k},\vec{G}}$ anders gewählt werden. Wichtig ist es, nicht die Komponente aus der Gleichung zu entfernen, die man in \vec{k} zum Umschreiben in eine quadratische Eigenwertgleichung verwendet.)

Setzt man in (A.8) für \vec{H} die Bloch-Form mit der Fourier-Entwicklung ein, so erhält man:

$$(k_x + G_x)u_{\vec{k},\vec{G}}^{(x)} + (k_y + G_y)u_{\vec{k},\vec{G}}^{(y)} + (k_z + G_z)u_{\vec{k},\vec{G}}^{(z)} = 0. \quad (\text{A.9})$$

Ist $k_x + G_x \neq 0$ für alle \vec{G} , so kann man Gleichung (A.9) nach $u_{\vec{k},\vec{G}}^{(x)}$ umstellen. I.A. heißt das, dass man bei der Wahl von k_x solche Werte vermeiden muss, bei denen sich k_x als Summe ganzzahliger Vielfacher der x-Komponente der Basisvektoren des reziproken Gitters schreiben lässt. Für ein festes k_y handelt es sich dabei aber immer nur um diskrete Punkte in k_x . Man kann statt des betrachteten Punktes die Rechnung für $k_x + \epsilon$ mit einem kleinen Wert für ϵ durchführen. Theoretisch könnte man in einem solchen Fall das ganze Verfahren symmetrisch so durchführen, dass man statt nach k_x in diesen Fällen nach k_y auflöst. Allerdings kann es natürlich auch vorkommen, dass sowohl k_x als auch k_y so gewählt sind, dass es jeweils ein \vec{G}, \vec{G}' gibt, so dass $k_x + G_x = 0$ bzw. $k_y + G'_y = 0$ ist. (Zum Beispiel im trivialen Fall $k_x = k_y = 0$.) Hat man ein kubisches Raumgitter, so bedeutet das, dass man mit k_x und k_y lediglich den Mittelpunkt der 1. Brillouin-Zone und die Zonenränder vermeiden muss. Für den weiteren Verlauf sei also nun einfach angenommen, dass der Wert für k_x keine Probleme bereitet. Andernfalls muss wie oben beschrieben verfahren werden. Unter dieser Annahme folgt aus (A.9):

$$u_{\vec{k},\vec{G}}^{(x)} = -\frac{k_y + G_y}{k_x + G_x}u_{\vec{k},\vec{G}}^{(y)} - \frac{k_z + G_z}{k_x + G_x}u_{\vec{k},\vec{G}}^{(z)}. \quad (\text{A.10})$$

Betrachtet man (A.7) jetzt komponentenweise, so erhält man für die Komponente ξ :

$$\sum_{\vec{G} \in \Gamma} \sum_{i=x,y,z} S_{\vec{G},\vec{G}'}^{(\xi i)} \vec{u}_{\vec{k},\vec{G}}^{(i)} = 0 \quad \forall \vec{G}' \in \Gamma, \quad \xi = x, y, z \quad (\text{A.11})$$

Für einen festen aber beliebigen Vektor \vec{G}' setzt man nun (A.10) in (A.11) ein und erhält damit

$$\begin{aligned} 0 &= \sum_{\vec{G} \in \Gamma} S_{\vec{G},\vec{G}'}^{(\xi x)} \vec{u}_{\vec{k},\vec{G}}^{(x)} + S_{\vec{G},\vec{G}'}^{(\xi y)} \vec{u}_{\vec{k},\vec{G}}^{(y)} + S_{\vec{G},\vec{G}'}^{(\xi z)} \vec{u}_{\vec{k},\vec{G}}^{(z)} \\ &= \sum_{\vec{G} \in \Gamma} S_{\vec{G},\vec{G}'}^{(\xi x)} \left(-\frac{k_y + G_y}{k_x + G_x}u_{\vec{k},\vec{G}}^{(y)} - \frac{k_z + G_z}{k_x + G_x}u_{\vec{k},\vec{G}}^{(z)} \right) + S_{\vec{G},\vec{G}'}^{(\xi y)} \vec{u}_{\vec{k},\vec{G}}^{(y)} + S_{\vec{G},\vec{G}'}^{(\xi z)} \vec{u}_{\vec{k},\vec{G}}^{(z)}. \end{aligned} \quad (\text{A.12})$$

Zunächst betrachtet man nun den Fall $\xi = y$ und erhält damit aus (A.12) die

Gleichung:

$$\begin{aligned}
0 &= \sum_{\vec{G} \in \Gamma} S_{\vec{G}, \vec{G}'}^{(\xi x)} \left(-\frac{k_y + G_y}{k_x + G_x} u_{\vec{k}, \vec{G}}^{(y)} - \frac{k_z + G_z}{k_x + G_x} u_{\vec{k}, \vec{G}}^{(z)} \right) + S_{\vec{G}, \vec{G}'}^{(\xi y)} \vec{u}_{\vec{k}, \vec{G}}^{(y)} + S_{\vec{G}, \vec{G}'}^{(\xi z)} \vec{u}_{\vec{k}, \vec{G}}^{(z)} \\
&= \sum_{\vec{G} \in \Gamma} \left(S_{\vec{G}, \vec{G}'}^{(yy)} - \frac{k_y + G_y}{k_x + G_x} S_{\vec{G}, \vec{G}'}^{(yx)} \right) u_{\vec{k}, \vec{G}}^{(y)} + \left(S_{\vec{G}, \vec{G}'}^{(yz)} - \frac{k_z + G_z}{k_x + G_x} S_{\vec{G}, \vec{G}'}^{(yx)} \right) u_{\vec{k}, \vec{G}}^{(z)}. \quad (\text{A.13})
\end{aligned}$$

Ersetzt man nun die entsprechenden Komponenten von $S_{\vec{G}, \vec{G}'}$ nach (A.6), so wird die Gleichung zu:

$$\begin{aligned}
0 &= \sum_{\vec{G} \in \Gamma} \left[\left(\frac{\omega^2}{c^2} \delta(\vec{G} - \vec{G}') + \left(\frac{1}{\varepsilon} \right)_{\vec{G}' - \vec{G}} \left\{ -(\vec{k} + \vec{G}') \cdot (\vec{k} + \vec{G}) + (k_y + G'_y)(k_y + G_y) \right\} \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - \frac{k_y + G_y}{k_x + G_x} \left(\frac{1}{\varepsilon} \right)_{\vec{G}' - \vec{G}} (k_x + G'_x)(k_y + G_y) \right) u_{\vec{k}, \vec{G}}^{(y)} \right. \\
&\quad \left. + \left(\frac{1}{\varepsilon} \right)_{\vec{G}' - \vec{G}} \left\{ (k_z + G'_z)(k_y + G_y) \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - \frac{k_z + G_z}{k_x + G_x} (k_x + G'_x)(k_y + G_y) \right\} u_{\vec{k}, \vec{G}}^{(z)} \right].
\end{aligned}$$

Ausmultiplizieren und Umordnen nach Potenzen von k_z liefert schließlich:

$$\begin{aligned}
0 = \sum_{\vec{G} \in \Gamma} & \left[\left(\frac{\omega^2}{c^2} \delta(\vec{G} - \vec{G}') + \left(\frac{1}{\varepsilon} \right)_{\vec{G}' - \vec{G}} \left\{ - (k_x + G'_x)(k_x + G_x) - G_z G'_z \right. \right. \right. \\
& \left. \left. \left. - \frac{k_y + G_y}{k_x + G_x} (k_x + G'_x)(k_y + G_y) \right\} \right. \right. \\
& \left. + k_z \left(\frac{1}{\varepsilon} \right)_{\vec{G}' - \vec{G}} (-G_z - G'_z) \right. \\
& \left. - k_z^2 \left(\frac{1}{\varepsilon} \right)_{\vec{G}' - \vec{G}} \right) u_{\vec{k}, \vec{G}}^{(y)} \tag{A.14} \\
& + \left(\left(\frac{1}{\varepsilon} \right)_{\vec{G}' - \vec{G}} \left\{ G'_z(k_y + G_y) - \frac{G_z}{k_x + G_x} (k_x + G'_x)(k_y + G_y) \right\} \right. \\
& \left. + k_z \left(\frac{1}{\varepsilon} \right)_{\vec{G}' - \vec{G}} \left\{ k_y + G_y - \frac{k_y + G_y}{k_x + G_x} (k_x + G'_x) \right\} \right) u_{\vec{k}, \vec{G}}^{(z)}.
\end{aligned}$$

Analog dazu betrachtet man nun noch den Fall, dass in (A.12) $\xi = z$ ist und man setzt die Definition (A.6) von S ein, formt die Terme um und sortiert das Ergebnis nach Potenzen von k_z . Daraus erhalt man:

$$\begin{aligned}
0 &= \sum_{\vec{G} \in \Gamma} \left(S_{\vec{G}, \vec{G}'}^{(zy)} - \frac{k_y + G_y}{k_x + G_x} S_{\vec{G}, \vec{G}'}^{(zx)} \right) u_{\vec{k}, \vec{G}}^{(y)} + \left(S_{\vec{G}, \vec{G}'}^{(zz)} - \frac{k_z + G_z}{k_x + G_x} S_{\vec{G}, \vec{G}'}^{(zx)} \right) u_{\vec{k}, \vec{G}}^{(z)} \\
&= \sum_{\vec{G} \in \Gamma} \left[\left(\left(\frac{1}{\varepsilon} \right)_{\vec{G}' - \vec{G}} \left\{ (k_y + G'_y) G_z - \frac{k_y + G_y}{k_x + G_x} (k_x + G'_x) G_z \right\} \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + k_z \left(\frac{1}{\varepsilon} \right)_{\vec{G}' - \vec{G}} \left\{ k_y + G'_y - \frac{k_y + G_y}{k_x + G_x} (k_x + G'_x) \right\} \right) u_{\vec{k}, \vec{G}}^{(y)} \right. \\
&\quad \left. + \left(\frac{\omega^2}{c^2} \delta(\vec{G} - \vec{G}') + \left(\frac{1}{\varepsilon} \right)_{\vec{G}' - \vec{G}} \left\{ - (k_x + G'_x)(k_x + G_x) \right. \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - (k_y + G'_y)(k_y + G_y) - \frac{G_z}{k_x + G_x} (k_x + G'_x) G_z \right\} \right. \\
&\quad \left. + k_z \left(\frac{1}{\varepsilon} \right)_{\vec{G}' - \vec{G}} \left\{ -2 \frac{k_x + G'_x}{k_x + G_x} \right\} \right. \\
&\quad \left. - k_z^2 \left(\frac{1}{\varepsilon} \right)_{\vec{G}' - \vec{G}} \left\{ \frac{k_x + G'_x}{k_x + G_x} \right\} \right) u_{\vec{k}, \vec{G}}^{(z)} \Big]. \tag{A.15}
\end{aligned}$$

Ähnlich wie beim regulären Plane-Wave-Verfahren ist dieses unendlich-dimensionale Gleichungssystem immer noch exakt und ohne Näherung, allerdings in dieser Form auch nicht lösbar. Deshalb geht man analog zu dem regulären Plane-Wave-Verfahren vor und betrachtet nur noch eine endliche Anzahl an Vektoren \vec{G} bzw. \vec{G}' mit der Begründung, dass die Anteile in der Fourier-Zerlegung für große Normen von \vec{G} bzw. \vec{G}' immer kleiner werden.

Damit erhält man nun eine endliche Anzahl von Gleichungen, da man nur eine endliche Anzahl an Vektoren \vec{G}' mit einer endlichen Anzahl an Unbekannten $u_{\vec{k}, \vec{G}}^{(y/z)}$ betrachtet. Dies ist i.a. so, dass man für \vec{G} und \vec{G}' die gleiche Teilmenge des Gitters Γ betrachtet. Ist die Anzahl der betrachteten Gittervektoren n , so erhält man $2n$ Unbekannte (n Unbekannte $u_{\vec{k}, \vec{G}}^{(y)}$ und n Unbekannte $u_{\vec{k}, \vec{G}}^{(z)}$) und $2n$ Gleichungen (n Gleichungen (A.14) und n Gleichungen (A.15)). Fasst man nun die Unbekannten $u_{\vec{k}, \vec{G}}^{(y)}$ bzw. $u_{\vec{k}, \vec{G}}^{(z)}$ in einem $2n$ -komponentigen Vektor u bzw. $u_{\vec{k}}$ zusammen, so kann man das Gleichungssystem, das durch (A.14) und (A.15)

aufgespannt wird, in der Form

$$0 = Au + k_z Bu - k_z^2 Cu \quad (\text{A.16})$$

schreiben, wobei A , B und C ($2n \times 2n$)-Matrizen sind, die durch die Gleichungen (A.14) und (A.15) gegeben sind.

A.1.2 Lösung des quadratischen Problems

Nachdem das Problem nun in eine Matrixgleichung in u mit bis zu quadratischen Termen in k_z formuliert wurde, muss man sich überlegen, wie man dieses System geeignet lösen kann bzw. wann dieses System nicht-triviale Lösungen besitzt. Ausgangspunkt ist also die Gleichung (A.16):

$$0 = Au + k_z Bu - k_z^2 Cu. \quad (\text{A.17})$$

Führt man hier nun eine neue Variable $v := k_z u$ ein, so wird das Gleichungssystem zu:

$$\begin{aligned} -k_z u + v &= 0 \\ Au + Bv - k_z Cv &= 0. \end{aligned} \quad (\text{A.18})$$

Weiter macht man die Annahme, dass die Matrix C invertierbar sei. Für den allgemeinen Fall ist dies natürlich nicht gegeben, aber praktisch spielt dies eher keine Rolle und auf die Invertierbarkeit der Matrix C soll später noch gezielt eingegangen werden. Für den Moment nehmen wir aber an, dass die Matrix invertierbar sei. Dann kann man das Gleichungssystem umschreiben zu:

$$\begin{aligned} -k_z u + v &= 0 \\ C^{-1}Au + C^{-1}Bv - k_z v &= 0. \end{aligned} \quad (\text{A.19})$$

Definiert man nun einen $4n$ -komponentigen Vektor X , der u und v in einem Vektor zusammenfasst, so dass gilt

$$X = \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}, \quad (\text{A.20})$$

dann kann man (A.19) auch als eine Matrixgleichung für eine $4n \times 4n$ -Matrix

betrachten:

$$\begin{aligned} & \begin{pmatrix} -k_z \mathbb{I}_{2n} & \mathbb{I}_{2n} \\ C^{-1}A & C^{-1}B - k_z \mathbb{I}_{2n} \end{pmatrix} X = 0 \\ \Leftrightarrow & \left[\begin{pmatrix} 0 & \mathbb{I}_{2n} \\ C^{-1}A & C^{-1}B \end{pmatrix} - k_z \mathbb{I}_{4n} \right] X = 0. \end{aligned} \quad (\text{A.21})$$

Dieses homogene Gleichungssystem hat nun genau dann nicht-triviale, und somit physikalisch interessante Lösungen, wenn

$$\det |U - k_z \mathbb{I}| = 0, \quad (\text{A.22})$$

mit

$$U = \begin{pmatrix} 0 & \mathbb{I}_{2n} \\ C^{-1}A & C^{-1}B \end{pmatrix} \quad (\text{A.23})$$

ist.

Dies ist aber äquivalent zu der Aussage, dass k_z ein Eigenwert der $4n \times 4n$ -Matrix U ist. Man hat sich also die Umstellung der fouriertransformierten Gleichung (2.5) dadurch erkaufte, dass man die Eigenwerte einer größeren Matrix U berechnen muss. Dies bedeutet eine deutliche Steigerung des Rechenaufwandes. (Im Falle einer Verdopplung für ein allgemeines Eigenwertverfahren eine Verachtachung der Rechendauer, da Eigenwertberechnungen mit $O(N^3)$ skalieren.) Allerdings erkaufte man sich diese Umformung auch damit, dass man die üblicherweise im System vorhandene Symmetrie, insbesondere auch die Hermitezität des Problems verliert.

Wie kommt diese Symmetriebrechung zustande? Zum einen dadurch, dass die Umschreibung des Gleichungssystems mit quadratischem Anteil in k_z in die obige Form für die grobe Form der Matrix U sorgt. Wenn man die Matrizen A , B und C in dem gegebenen Fall betrachtet (also die Faktoren vor k_z^0 , k_z^1 und k_z^2), erkennt man, dass diese Gleichungen keine allgemeinen Symmetrien aufweisen. Dies liegt daran, dass man beim Auflösen der Divergenzgleichung (A.8)

nach $u_{\vec{k},\vec{G}}$ explizit eine Richtung wählt. Somit wird eine ‐Vorzugsrichtung‐ in die Gleichungen eingeführt, die die vorhandene Symmetrie in x und y bricht.

A.1.3 Invertierbarkeit der Matrix C

Um zu verstehen, ob die Invertierbarkeit der Matrix C, die durch die Gleichungen (A.14) und (A.15) gegeben ist, als gegeben angesehen werden kann, muss man sich die Struktur der Gleichungen genauer ansehen. Allerdings führt die Indexstruktur doch zu einer deutlich komplizierteren Gestalt als sie in der grundlegende Struktur eigentlich vorhanden ist. Deshalb soll hier das Problem etwas vereinfacht dargestellt werden, ohne jedoch etwas an der eigentlichen Struktur zu verändern. Um dies zu tun, seien hier die Vektoren \vec{G} bzw. \vec{G}' willkürlich als 1-dimensional und ganzzahlig betrachtet und von -2 bis +2 gewählt (damit die Matrizen nicht zu groß werden). Man erkennt so schon die Struktur, in der sich das Problem aufbaut. Auch werden der Einfachheit halber die Komponenten von \vec{k} und \vec{G} in relativen Einheiten gegeben, so dass die Komponenten von \vec{k} zwischen -1 und 1 liegen und die Komponenten von \vec{G} ganzzahlig werden. (Dies dient hier nur der Übersicht und um nicht zusätzliche Normierungsfaktoren mitführen zu müssen, die auf die Invertierbarkeit keinerlei Einfluss haben.)

Betrachtet man nun zunächst den physikalisch uninteressanten, aber formal einfachen Fall eines konstanten Dielektrikums, dann gilt für die Fourier-Transformierte, dass sie proportional zu $\delta(\vec{G})$ ist. D.h., da in den Gleichungen immer die Terme $(\frac{1}{\varepsilon})_{\vec{G}'-\vec{G}}$ als Faktor bei k_z^2 auftauchen, dass nur Beiträge mit $\vec{G}' = \vec{G}$ vorkommen. Damit vereinfacht sich die Struktur wesentlich. Die konstante Fourier-Komponente, die als einzige übrig bleibt, sei mit $\tilde{\varepsilon}_0^{-1}$ bezeichnet, dann ist die Matrix gegeben durch die Anwendung auf $u_{\vec{k}}$ mit:

$$Cu_{\vec{k}} = \begin{pmatrix} \tilde{\varepsilon}_0^{-1} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \tilde{\varepsilon}_0^{-1} & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \\ 0 & \dots & & \tilde{\varepsilon}_0^{-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{\vec{k},-2}^{(y)} \\ u_{\vec{k},-1}^{(y)} \\ \vdots \\ u_{\vec{k},+2}^{(z)} \end{pmatrix} \quad (\text{A.24})$$

Da $\tilde{\varepsilon}_0^{-1} \neq 0$ ist, ist C eine Diagonalmatrix und somit trivial invertierbar.

Im realistischeren Fall, in dem man keine Konstante Struktur hat, ist die Struktur der Matrix C allerdings komplizierter. Betrachten wir also wieder die 1-dimensionale Vereinfachung in \vec{G} und nummerieren G von -2 bis 2. Die entsprechenden Fourierkomponenten von $\frac{1}{\varepsilon}$ nummerieren wir dementsprechend mit $\tilde{\varepsilon}_{-2}^{-1}$ bis $\tilde{\varepsilon}_{+2}^{-1}$.

Für die Terme $\frac{k_x + G'_x}{k_x + G_x}$ sei noch darauf hingewiesen, dass diese stets ungleich 0 sind, da, wie bereits bei der Herleitung des Verfahrens erwähnt, k_x nicht so gewählt werden darf, dass für ein beliebiges G_x gilt, dass $k_x + G_x = 0$ wird. Deshalb kann auch der Zähler hier nicht null werden und es gilt immer $\frac{k_x + G'_x}{k_x + G_x} \neq 0$. C hat in diesem Fall die folgende Struktur:

$$C = \begin{pmatrix} \tilde{\varepsilon}_0^{-1} & \tilde{\varepsilon}_{-1}^{-1} & \tilde{\varepsilon}_{-2}^{-1} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \tilde{\varepsilon}_1^{-1} & \tilde{\varepsilon}_0^{-1} & \tilde{\varepsilon}_{-1}^{-1} & \tilde{\varepsilon}_{-2}^{-1} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \tilde{\varepsilon}_2^{-1} & \tilde{\varepsilon}_1^{-1} & \tilde{\varepsilon}_0^{-1} & \tilde{\varepsilon}_{-1}^{-1} & \tilde{\varepsilon}_{-2}^{-1} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \tilde{\varepsilon}_2^{-1} & \tilde{\varepsilon}_1^{-1} & \tilde{\varepsilon}_0^{-1} & \tilde{\varepsilon}_{-1}^{-1} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \tilde{\varepsilon}_2^{-1} & \tilde{\varepsilon}_1^{-1} & \tilde{\varepsilon}_0^{-1} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \tilde{\varepsilon}_0^{-1} & \tilde{\varepsilon}_{-1}^{-1} \frac{k_x - 2}{k_x - 1} & \tilde{\varepsilon}_{-2}^{-1} \frac{k_x - 2}{k_x} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \tilde{\varepsilon}_1^{-1} \frac{k_x - 1}{k_x - 2} & \tilde{\varepsilon}_0^{-1} & \tilde{\varepsilon}_{-1}^{-1} \frac{k_x - 1}{k_x} & \tilde{\varepsilon}_{-2}^{-1} \frac{k_x - 1}{k_x + 1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \tilde{\varepsilon}_2^{-1} \frac{k_x}{k_x - 2} & \tilde{\varepsilon}_1^{-1} \frac{k_x}{k_x - 1} & \tilde{\varepsilon}_0^{-1} & \tilde{\varepsilon}_{-1}^{-1} \frac{k_x}{k_x + 1} & \tilde{\varepsilon}_{-2}^{-1} \frac{k_x}{k_x + 2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \tilde{\varepsilon}_2^{-1} \frac{k_x + 1}{k_x - 1} & \tilde{\varepsilon}_1^{-1} \frac{k_x + 1}{k_x} & \tilde{\varepsilon}_0^{-1} & \tilde{\varepsilon}_{-1}^{-1} \frac{k_x + 1}{k_x + 2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \tilde{\varepsilon}_2^{-1} \frac{k_x + 2}{k_x} & \tilde{\varepsilon}_1^{-1} \frac{k_x + 2}{k_x + 1} & \tilde{\varepsilon}_0^{-1} & 0 \end{pmatrix}.$$

Die Matrix C ist nun genau dann invertierbar, wenn $\det |C| \neq 0$ ist. Da \det eine multilineare Abbildung ist, kann man Faktoren aus den Zeilen, bzw. Spalten

vor die Determinante ziehen. Tut man dies insbesondere in der 6. Spalte mit dem Faktor $\frac{1}{k_x-2}$, in der 7. mit $\frac{1}{k_x-1}$ usw. bis zur 10. Spalte mit dem Faktor $\frac{1}{k_x+2}$ und dementsprechend in Zeile 6 mit dem Faktor $k_x - 2$ bis Zeile 10 mit dem Faktor $k_x + 2$, so erhält man

$$\det |C| = \frac{(k_x - 2)(k_x - 1)k_x(k_x + 1)(k_x + 2)}{(k_x - 2)(k_x - 1)k_x(k_x + 1)(k_x + 2)} \det |R| = \det |R|, \quad (\text{A.25})$$

mit dem Rest R . (Die Faktoren $k_x - 2, \dots, k_x + 2$ sind alle ungleich 0.)

Daraus ergibt sich fuer R:

$$R = \begin{pmatrix} \tilde{\varepsilon}_0^{-1} & \tilde{\varepsilon}_{-1}^{-1} & \tilde{\varepsilon}_{-2}^{-1} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \tilde{\varepsilon}_1^{-1} & \tilde{\varepsilon}_0^{-1} & \tilde{\varepsilon}_{-1}^{-1} & \tilde{\varepsilon}_{-2}^{-1} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \tilde{\varepsilon}_2^{-1} & \tilde{\varepsilon}_1^{-1} & \tilde{\varepsilon}_0^{-1} & \tilde{\varepsilon}_{-1}^{-1} & \tilde{\varepsilon}_{-2}^{-1} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \tilde{\varepsilon}_2^{-1} & \tilde{\varepsilon}_1^{-1} & \tilde{\varepsilon}_0^{-1} & \tilde{\varepsilon}_{-1}^{-1} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \tilde{\varepsilon}_2^{-1} & \tilde{\varepsilon}_1^{-1} & \tilde{\varepsilon}_0^{-1} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \tilde{\varepsilon}_0^{-1} & \tilde{\varepsilon}_{-1}^{-1} & \tilde{\varepsilon}_{-2}^{-1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \tilde{\varepsilon}_1^{-1} & \tilde{\varepsilon}_0^{-1} & \tilde{\varepsilon}_{-1}^{-1} & \tilde{\varepsilon}_{-2}^{-1} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \tilde{\varepsilon}_2^{-1} & \tilde{\varepsilon}_1^{-1} & \tilde{\varepsilon}_0^{-1} & \tilde{\varepsilon}_{-1}^{-1} & \tilde{\varepsilon}_{-2}^{-1} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \tilde{\varepsilon}_2^{-1} & \tilde{\varepsilon}_1^{-1} & \tilde{\varepsilon}_0^{-1} & \tilde{\varepsilon}_{-1}^{-1} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \tilde{\varepsilon}_2^{-1} & \tilde{\varepsilon}_1^{-1} & \tilde{\varepsilon}_0^{-1} \end{pmatrix}. \quad (\text{A.26})$$

Man erkennt, dass die Matrix R in zwei identische Matrizen zerfällt. Somit

kann die Determinante in zwei Determinanten aufgespaltet werden und mit

$$R' := \begin{vmatrix} \tilde{\varepsilon}_0^{-1} & \tilde{\varepsilon}_{-1}^{-1} & \tilde{\varepsilon}_{-2}^{-1} & 0 & 0 \\ \tilde{\varepsilon}_1^{-1} & \tilde{\varepsilon}_0^{-1} & \tilde{\varepsilon}_{-1}^{-1} & \tilde{\varepsilon}_{-2}^{-1} & 0 \\ \tilde{\varepsilon}_2^{-1} & \tilde{\varepsilon}_1^{-1} & \tilde{\varepsilon}_0^{-1} & \tilde{\varepsilon}_{-1}^{-1} & \tilde{\varepsilon}_{-2}^{-1} \\ 0 & \tilde{\varepsilon}_2^{-1} & \tilde{\varepsilon}_1^{-1} & \tilde{\varepsilon}_0^{-1} & \tilde{\varepsilon}_{-1}^{-1} \\ 0 & 0 & \tilde{\varepsilon}_2^{-1} & \tilde{\varepsilon}_1^{-1} & \tilde{\varepsilon}_0^{-1} \end{vmatrix} \quad (\text{A.27})$$

gilt:

$$\det |C| = \det |R| = \det |R'|^2. \quad (\text{A.28})$$

Damit ist nun $\det |C| = 0$, genau dann, wenn $\det |R'| = 0$ ist, was ausschließlich durch die Fourier-Transformierte der dielektrischen Struktur ε gegeben ist. I.a. ist C nicht invertierbar. In dem gegebenen Fall muss man zum Beispiel nur eine Struktur betrachten, die nur die Komponente $\tilde{\varepsilon}_2^{-1}$ besitzt und alle anderen Fourier-Komponenten verschwinden. Dann ist $\det |R'| = 0$ und somit die Matrix C nicht invertierbar.

Praktisch spielt dies allerdings trotzdem für dieses Verfahren keine Rolle, da die Strukturen, die man üblicherweise betrachtet, so geschaffen sind, dass die Matrix C invertierbar ist. Zu verstehen ist dies anhand der Tatsache, dass bei den üblicherweise studierten Strukturen gerade die Komponente $\tilde{\varepsilon}_0^{-1}$ recht groß ist und wir ja auch schon bei der Näherung des Abschneidens höherer Fourier-Komponenten davon ausgehen, dass diese immer kleiner werden. Im Fall dass $\tilde{\varepsilon}_0^{-1}$ so groß wird, dass R' diagonaldominant wird (d.h. die Summe der Beträge aller Einträge einer Zeile außerhalb der Diagonalen sind kleiner als der Betrag des Eintrags auf der Diagonalen), dann ist C auch invertierbar, da Diagonaldominanz ein hinreichendes Kriterium für die Invertierbarkeit quadratischer Matrizen ist.

A.1.4 Numerische Eigenwertberechnung

Das Problem bei einer effektiven Implementierung des gegebenen Problems ist, dass man die Eigenwerte einer großen Matrix (U aus (A.23)) bestimmen muss,

die als Gesamtmatrix keine für die Berechnung der Eigenwerte brauchbaren Symmetrien besitzt. So sind die beiden oberen Blöcke in Form der Nullmatrix und der Identität \mathbb{I} zwar einfach, allerdings besitzen die unteren Blöcke keine besonderen Eigenschaften, insbesondere ist die gesamte Matrix U als solche i.a. nicht hermitesch.

Daraus folgt, dass man nur mit allgemeinen Verfahren der Eigenwertberechnung die Eigenwerte bestimmen kann. Das hat allerdings auch zur Folge, dass damit die Berechnung der Eigenwerte sehr zeitaufwendig ist. Auch ist es im Rahmen dieser Arbeit nicht gelungen, das Problem durch Koordinatentransformationen in eine Form zu bringen, die es erlauben würde, effizientere Algorithmen zur Bestimmung der Eigenwerte zu verwenden.

Insbesondere sei darauf hingewiesen, dass bei diesem Verfahren bei entsprechend großer Anzahl an Vektoren \vec{G} die Matrix sehr leicht auf mehrere tausend Zeilen/Spalten anwächst. Man erhält damit auch dieselbe Anzahl an Eigenwerten (mit Mehrfachwertung von entarteten Eigenwerten), aber physikalisch relevant sind nur die Eigenwerte, deren imaginärer Anteil verschwindet, da die anderen Lösungen auf- bzw. abklingenden Moden entsprechen. Auch von den Eigenwerten auf der reellen Achse sind nur diejenigen interessant, die sich im Bereich der 1. Brillouin-Zone befinden. Dies sind in der Regel sehr wenige (in der Größenordnung bis zu 10) bis gar keine (falls es für die gegebene Frequenz und die Werte von k_x und k_y keine Lösung gibt).

A.1.5 Skalierungseigenschaften

Weiterhin soll noch betrachtet werden, wie das modifizierte ebene-Wellen-Verfahren mit zunehmender Anzahl ebener Wellen skaliert. Betrachtet man eine 3-dimensionale Struktur und betrachtet in jede Raumrichtung einen cut-off N für \vec{k} , so skaliert die Anzahl der \vec{k} -Vektoren mit $O(N^3)$. Da der untere Teil der Matrix allerdings dicht besetzt ist, skaliert der Speicherbedarf der Matrix U mit dem Quadrat der Anzahl der ebenen Wellen, also insgesamt mit $O(N^6)$.

Noch ungünstiger sieht es jedoch aus, wenn man sich den Bedarf an Rechenzeit betrachtet, denn die allgemeinen Rechenverfahren, die verwendet werden, skalieren mit der 3. Potenz der Größe des Systems, also insgesamt mit $O(N^9)$.

Anhand dieser Überlegungen erkennt man sehr schnell, dass die praktische Umsetzung dieses Verfahrens sehr begrenzt möglich ist, da sowohl der Speicher-

bedarf, aber insbesondere die benötigte Rechenzeit extrem mit dem cut-off ansteigen. Dadurch ist der Einsatz dieses Verfahrens nur begrenzt möglich. Eine Absorption ist auch hier (als Bandstruktur-Verfahren) aus den selben Gründen wie beim normalen Plane-Wave-Verfahren nicht einfach zu betrachten.

Anhang B

FDFD-Verfahren

Das “Finite Difference Frequency Domain” (FDFD) Verfahren ist prinzipiell so aufgebaut, dass man die Maxwell-Gleichungen in Integralform im Frequenzraum diskretisiert und durch gegebenes k_x und k_y in x - und y -Richtung Bloch-Randwertbedingungen vorgibt, während man an den beiden Enden mit $z = konst$ explizit Kombination von Vakuum-Moden vorgibt. Durch diese Randwerte und Randbedingungen ist dann die Lösung innerhalb des betrachteten Raumbereichs von $z = z_{min}$ bis $z = z_{max}$ eindeutig bestimmt und kann durch ein dünn besetztes Gleichungssystem berechnet werden. (Die Tatsache, dass die Gleichungen dünn besetzt sind, ist wichtig für das Skalierungsverhalten.) Führt man diese Rechnungen mit verschiedenen linear unabhängig vorgegebenen Anteilen an Basisfunktionen bei $z = z_{min}$ und $z = z_{max}$ durch, so kann man die Streumatrix des Objekts in der Basis der Vakuum-Moden und somit Reflexion, Transmission und gegebenenfalls Absorption des betrachteten Raumbereiches berechnen.

B.1 Transmission-Spektren

Ausgangspunkt sind auch hier die Maxwell-Gleichungen, die allerdings (teilweise) in der integralen Form betrachtet werden. Die Maxwell-Gleichungen werden dann auf einem Yee-Gitter [6] diskretisiert, d.h. man unterteilt das zu beschreibende Raumgebiet in ein 3-dimensionales Gitter. Der Einfachheit halber gehen wir hier davon aus, dass das Gitter in jeder Raumrichtung äquidistant ist. Die Gitterabstände in unterschiedlichen Raumrichtungen können jedoch unterschiedlich sein. Dadurch hat man das Raumgebiet in Quader unterteilt.

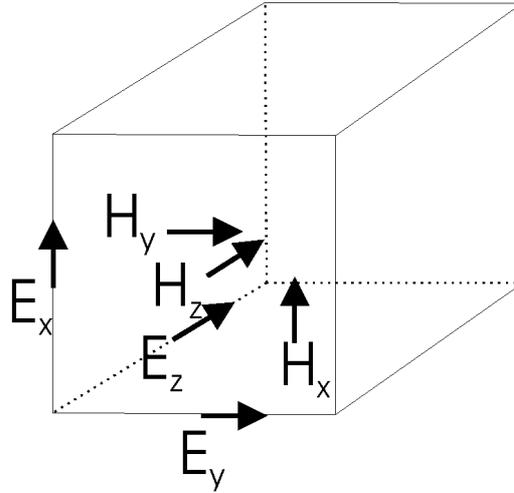


Abbildung B.1: Yee-Gitter. Dabei sitzen die elektrischen Felder auf den Kanten der Quader und die magnetischen Felder senkrecht auf den Seitenflächen.

Bei der Diskretisierung der Maxwell-Gleichungen auf diesen Quadern geht man nun davon aus, dass ε jeweils in einem Quader konstant ist. Das elektrische Feld betrachtet man jeweils auf der Mitte der Kanten der Quader entlang der Kanten und die magnetischen Felder senkrecht auf den Seitenflächen der Quader (Abb B.1). Diese Art der Quantisierung hat zwei Vorteile: Zum einen sind die Felder so platziert, dass die Sprungbedingungen an der Grenzfläche zwischen zwei Medien immer erfüllt sind, da es sich immer um die stetigen Feldkomponenten handelt. Zum anderen sorgt diese Art der Diskretisierung dafür, dass für $\omega \neq 0$ die Quellenfreiheit der Felder auch in der Diskretisierung gegeben ist. Deshalb betrachtet man nur die beiden übrigen Gleichungen in harmonischen Moden (daher der Name 'frequency domain') in integraler Form:

$$\oint_{\partial A} \vec{H} \cdot d\vec{s} = \int_A i\omega\varepsilon_0\varepsilon(\vec{r})\vec{E} \cdot d\vec{A} \quad (\text{B.1})$$

$$\oint_{\partial A} \vec{E} \cdot d\vec{s} = - \int_A i\omega\mu_0\vec{H} \cdot d\vec{A}, \quad (\text{B.2})$$

wobei die Flächen A für die Diskretisierung passend gewählt werden. Siehe hierzu auch [30].

Man nummeriert nun die Felder \vec{E} bzw. \vec{H} mit (i, j, k) durch, wobei i, j bzw. k die Quader jeweils in x -, y - bzw. z -Richtung durchnummerieren. Ebenso sei

auch ε nummeriert und h_x, h_y, h_z sind die Längen der Quader in die x -, y - bzw. z -Richtung.

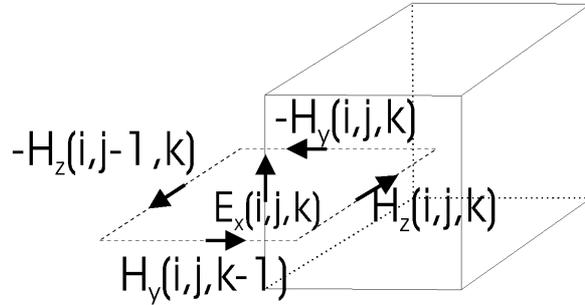


Abbildung B.2: Wahl der Fläche A senkrecht zu $E_x(i, j, k)$.

Zunächst soll Gleichung (B.1) betrachtet werden. Dazu betrachtet man zunächst eine Fläche senkrecht zu E_x (siehe Abb. B.2) und erhält daraus die Gleichung für den Quader (i, j, k) :

$$H_z(i, j, k)h_z - H_y(i, j, k)h_y - H_z(i, j - 1, k)h_z + H_y(i, j, k - 1)h_y \quad (\text{B.3})$$

$$= i\omega \frac{h_y h_z}{4} \varepsilon_0 (\varepsilon(i, j, k) + \varepsilon(i, j - 1, k) + \varepsilon(i, j, k - 1) + \varepsilon(i, j - 1, k - 1)) E_x(i, j, k).$$

Wie dabei die Quader am Randbereich der numerischen Box betrachtet werden sollen, wird später geklärt.

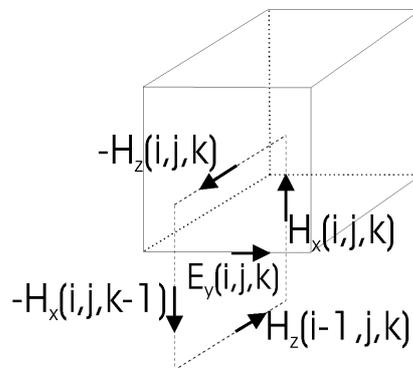


Abbildung B.3: Wahl der Fläche A senkrecht zu $E_y(i, j, k)$.

Analog erhält man für eine Fläche senkrecht zu $E_y(i, j, k)$ (Abb. B.3):

$$\begin{aligned} & H_x(i, j, k)h_x - H_z(i, j, k)h_z - H_x(i, j, k-1)h_x + H_z(i-1, j, k)h_z \quad (\text{B.4}) \\ & = i\omega \frac{h_x h_z}{4} \varepsilon_0 (\varepsilon(i, j, k) + \varepsilon(i, j, k-1) + \varepsilon(i-1, j, k-1) + \varepsilon(i-1, j, k)) E_y(i, j, k) \end{aligned}$$

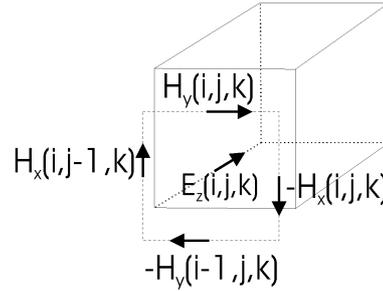


Abbildung B.4: Wahl der Fläche A senkrecht zu E_z .

Und schließlich für eine Fläche senkrecht auf $E_z(i, j, k)$ (Abb. B.4):

$$\begin{aligned} & H_y(i, j, k)h_y - H_x(i, j, k)h_x - H_y(i-1, j, k)h_y - H_x(i, j-1, k)h_x \quad (\text{B.5}) \\ & = i\omega \frac{h_y h_x}{4} \varepsilon_0 (\varepsilon(i, j, k) + \varepsilon(i-1, j, k) + \varepsilon(i-1, j-1, k) + \varepsilon(i, j-1, k)) E_z(i, j, k). \end{aligned}$$

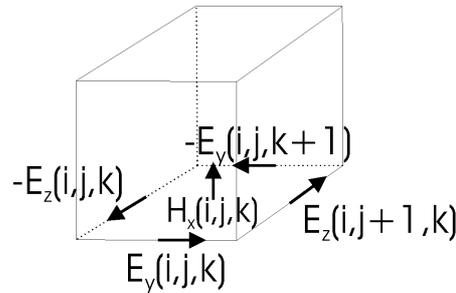
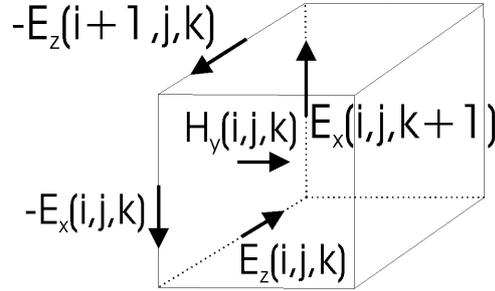


Abbildung B.5: Wahl der Fläche A senkrecht zu $H_x(i, j, k)$.

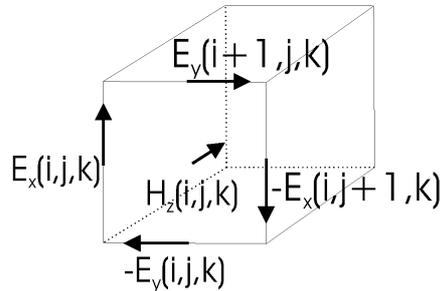
Ebenso betrachtet man nun (B.2) für die Seitenflächen des Quaders (i, j, k) . Für die Seitenfläche senkrecht zu $H_x(i, j, k)$ (siehe Abb. B.5) erhält man:

$$\begin{aligned} & E_y(i, j, k)h_y + E_z(i, j+1, k)h_z - E_y(i, j, k+1)h_y - E_z(i, j, k)h_z \\ & = -i\omega B_x(i, j, k)h_y h_z. \quad (\text{B.6}) \end{aligned}$$

Abbildung B.6: Wahl der Fläche A senkrecht zu $H_y(i, j, k)$.

Analog dazu für die Fläche senkrecht zu H_y (siehe Abb B.6):

$$\begin{aligned} & E_z(i, j, k)h_z + E_x(i, j, k+1)h_x - E_z(i+1, j, k)h_z - E_x(i, j, k)h_x \\ &= -i\omega B_y(i, j, k)h_x h_z, \end{aligned} \quad (\text{B.7})$$

Abbildung B.7: Wahl der Fläche A senkrecht zu $H_z(i, j, k)$.

sowie für die Fläche senkrecht zu H_z (siehe Abb. B.7):

$$\begin{aligned} & E_x(i, j, k)h_x + E_y(i+1, j, k)h_y - E_x(i, j+1, k)h_x - E_y(i, j, k)h_y \\ &= -i\omega B_z(i, j, k)h_x h_y. \end{aligned} \quad (\text{B.8})$$

Man kann nun Gleichungen (B.6)-(B.8) in die Gleichungen (B.3)-(B.5) einsetzen und umformen und erhält damit die für das FDFD-Verfahren verwendeten Feldgleichungen:

$$\begin{aligned}
& E_x(i, j, k) \left[-\frac{\omega^2 h_y h_z}{4c^2} \left(\varepsilon(i, j, k) + \varepsilon(i, j, k-1) + \varepsilon(i, j-1, k) + \varepsilon(i, j-1, k-1) \right) \right. \\
& \quad \left. + 2\frac{h_z}{h_y} + 2\frac{h_y}{h_z} \right] \\
& + E_x(i, j+1, k) \left[-\frac{h_z}{h_y} \right] + E_x(i, j-1, k) \left[-\frac{h_z}{h_y} \right] \\
& + E_x(i, j, k+1) \left[-\frac{h_y}{h_z} \right] + E_x(i, j, k-1) \left[-\frac{h_y}{h_z} \right] \\
& + E_y(i, j, k) \left[-\frac{h_z}{h_x} \right] + E_y(i+1, j, k) \left[\frac{h_z}{h_x} \right] \\
& + E_y(i, j-1, k) \left[\frac{h_z}{h_x} \right] + E_y(i+1, j-1, k) \left[-\frac{h_z}{h_x} \right] \\
& + E_z(i, j, k) \left[-\frac{h_y}{h_x} \right] + E_z(i+1, j, k) \left[\frac{h_y}{h_x} \right] \\
& + E_z(i, j, k-1) \left[\frac{h_y}{h_x} \right] + E_z(i+1, j, k-1) \left[-\frac{h_y}{h_x} \right] \\
& = 0
\end{aligned} \tag{B.9}$$

$$\begin{aligned}
& E_y(i, j, k) \left[-\frac{\omega^2 h_x h_z}{4c^2} \left(\varepsilon(i, j, k) + \varepsilon(i, j, k-1) + \varepsilon(i-1, j, k) + \varepsilon(i-1, j, k-1) \right) \right. \\
& \quad \left. + 2\frac{h_x}{h_z} + 2\frac{h_z}{h_x} \right] \\
& + E_y(i, j, k+1) \left[-\frac{h_x}{h_z} \right] + E_y(i, j, k-1) \left[-\frac{h_x}{h_z} \right] \\
& + E_y(i+1, j, k) \left[-\frac{h_z}{h_x} \right] + E_y(i-1, j, k) \left[-\frac{h_z}{h_x} \right] \\
& + E_z(i, j, k) \left[-\frac{h_x}{h_y} \right] + E_z(i, j+1, k) \left[\frac{h_x}{h_y} \right] \\
& + E_z(i, j, k-1) \left[\frac{h_x}{h_y} \right] + E_z(i, j+1, k-1) \left[-\frac{h_x}{h_y} \right] \\
& + E_x(i, j, k) \left[-\frac{h_z}{h_y} \right] + E_x(i, j+1, k) \left[\frac{h_z}{h_y} \right] \\
& + E_x(i-1, j, k) \left[\frac{h_z}{h_y} \right] + E_x(i-1, j+1, k) \left[-\frac{h_z}{h_y} \right] \\
& = 0
\end{aligned} \tag{B.10}$$

$$\begin{aligned}
& E_z(i, j, k) \left[-\frac{\omega^2 h_y h_x}{4c^2} \left(\varepsilon(i, j, k) + \varepsilon(i-1, j, k) + \varepsilon(i, j-1, k) + \varepsilon(i-1, j-1, k) \right) \right. \\
& \quad \left. + 2\frac{h_y}{h_x} + 2\frac{h_x}{h_y} \right] \\
+ & E_z(i+1, j, k) \left[-\frac{h_y}{h_x} \right] + E_z(i-1, j, k) \left[-\frac{h_y}{h_x} \right] \\
+ & E_z(i, j+1, k) \left[-\frac{h_x}{h_y} \right] + E_z(i, j-1, k) \left[-\frac{h_x}{h_y} \right] \\
+ & E_x(i, j, k) \left[-\frac{h_y}{h_z} \right] + E_x(i, j, k+1) \left[\frac{h_y}{h_z} \right] \\
+ & E_x(i-1, j, k) \left[\frac{h_y}{h_x} \right] + E_x(i-1, j, k+1) \left[-\frac{h_x}{h_y} \right] \\
+ & E_y(i, j, k) \left[-\frac{h_x}{h_z} \right] + E_y(i, j, k+1) \left[\frac{h_x}{h_z} \right] \\
+ & E_y(i, j-1, k) \left[\frac{h_x}{h_z} \right] + E_y(i, j-1, k+1) \left[-\frac{h_x}{h_z} \right] \\
& = 0.
\end{aligned} \tag{B.11}$$

Damit man die Übersicht behält, welche Feldvektoren für die Gleichungen relevant sind, veranschaulicht man sich die Feldvektoren, wie sie in den Gleichungen (B.9) - (B.11) auftauchen. Betrachtet man die Gleichungen jeweils als Bestimmungsgleichung für die erste auftauchende Feldkomponente (also in (B.9) für $E_x(i, j, k)$, in (B.10) für $E_y(i, j, k)$ und in (B.11) für $E_z(i, j, k)$), so kann man in Abb. B.8 erkennen, welche anderen Feldkomponenten diesen Vektor bestimmen. (Dabei muss man Abb. B.8 gegebenenfalls so drehen, dass der schwarze Vektor in die entsprechende Raumrichtung zeigt.) Dies ist wichtig, um die Randbedingungen und den Aufbau des gesamten Gleichungssystems für den betrachteten Raumbereich zu verstehen.

Anhand von Abb. B.8 kann man sich nun überlegen, wie eine numerische Box aussehen muss, mittels der man die Felder komplett berechnen kann. Geht man nun davon aus, dass man eine Box mit N_x Unterteilungen in x -Richtungen, N_y in y -Richtung und N_z in z -Richtung vorliegen hat, dann gelten für die inneren Punkte dieser Box die Gleichungen, so wie sie in (B.9) - (B.11) gegeben sind. Gesondert betrachten man allerdings die Punkte, die auf den Randflächen der

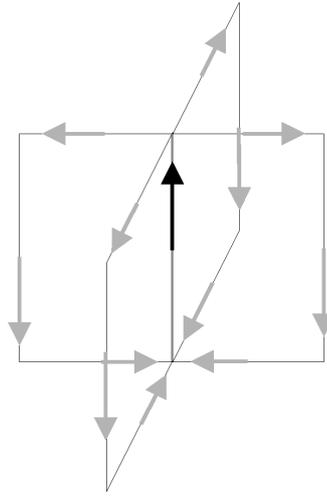


Abbildung B.8: Die Feldkomponenten, die in den Gleichungen (B.9)-(B.11) auftauchen. Der zu bestimmende Vektor ist schwarz gezeichnet und die dazu benötigten Vektoren grau.

numerischen Box sitzen.

Da ein Verfahren ähnlich der Transfer-Matrix-Methode angestrebt wird, bei dem ω , k_x und k_y vorgegeben sind, können wir an den x - bzw. y -Randflächen als Randbedingung einfach die Bloch-Bedingung verwenden:

$$\vec{E}(\vec{r} + L_{x/y}\vec{e}_{x/y}) = e^{ik_{x/y}L_{x/y}}\vec{E}(\vec{r}), \quad (\text{B.12})$$

wobei $L_{x/y}$ die Ausdehnung der Einheitszelle in die Richtung $\vec{e}_{x/y}$ ist. Mittels dieser Bedingung kann man die Feldvektoren, die in x - oder in y -Richtung außerhalb der numerischen Box liegen, durch Felder in der Box beschreiben. An den z -Randflächen hingegen, kann man die Blochbedingung nicht verwenden. Man gibt stattdessen einfach explizit die Komponenten E_x und E_y vor. Dabei führt man allerdings eine zusätzliche Schicht $N_z + 1$ ein, so dass man quasi eine Schicht hat, bei der die Feldvektoren E_x und E_y genau auf der Randfläche der Box liegen. (Die Feldkomponenten E_z dieser Schicht $N_z + 1$ müssen nicht betrachtet werden, da sie lediglich für die Komponenten E_x und E_y der Schicht $N_z + 1$ von Bedeutung wären, die jedoch schon explizit gegeben sind).

Somit erhält man nun $3N_xN_yN_z - 2N_xN_y$ Feldkomponenten als Unbekannte. (Die Felder E_x und E_y werden explizit auf der ersten z -Ebene vorgegeben und sind somit keine Variablen, ebenso die Felder der Ebene $N_z + 1$.) Ebenso erhält

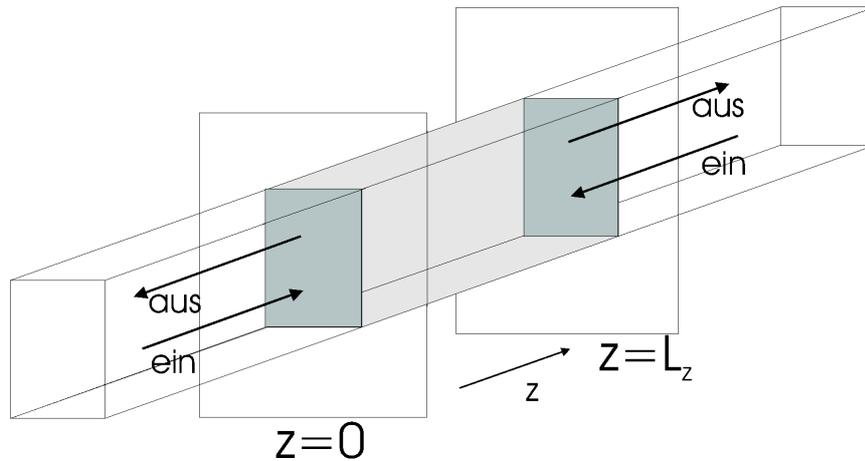


Abbildung B.9: In der Mitte (grau) befindet sich die numerische Box und an den beiden Randflächen in z -Richtung werden die betrachteten Vakuum-Moden angeschlossen und in ein- und auslaufende Moden unterteilt.

man $3N_x N_y N_z - 2N_x N_y$ Gleichungen aus (B.9) - (B.11). Alle in diesen Gleichungen vorkommenden Feldkomponenten liegen in der numerischen Box. Somit hat man insgesamt ein Gleichungssystem, das i.a. eindeutig gelöst werden kann. (Auf Ausnahmefälle ist in Kapitel 5 eingegangen worden.)

In Anlehnung an [31] kann man aus der Verwendung solcher numerischer Boxen nun die Streumatrix des Systems berechnen. (Im Gegensatz zu [31] handelt es sich hierbei jedoch nicht um Wellenhohleiter-Probleme, was sich hauptsächlich darin äußert, dass die betrachtete numerische Box andere Randbedingungen besitzt und die ein- und auslaufenden Moden hier Vakuum-Moden sind.) Dazu betrachtet man einen gewissen Raumbereich, in dem sich die Struktur befindet, die numerisch untersucht werden soll und weiterhin 2 Ebenen, die den Rand der numerischen Simulation in z -Richtung vorgeben (Abb B.9). Man muss dabei die numerische Box so setzen, dass die Randflächen in z -Richtung bereits im Vakuum liegen. Zum einen, weil man Vakuummoden anschließt, zum anderen muss aber auch ein hinreichender Abstand zur betrachteten Struktur gegeben sein, damit die abklingenden Moden keine Rolle bei den Anschlussbedingungen an das Vakuum mehr spielen. Dies wird allerdings dadurch erleichtert, dass diese Moden exponentiell abklingen. Deshalb kann sich i.a. der numerisch betrachtete von dem physikalisch interessanten Raumbereich leicht unterscheiden, da der numerisch betrachtete Raumbereich unter Umständen aus den genannten Gründen zusätzlich noch Vakuum an beiden z -Enden der Box besitzen kann.

Um die Streumatrix nun zu berechnen, betrachtet man auf beiden Seiten außerhalb der numerischen Box eine Anzahl N_{mod} an Moden, die dann jeweils einlaufend bzw. auslaufend sein können. Diese Moden sind Vakuum-Moden und müssen so gewählt werden, dass sie die Bloch-Bedingungen innerhalb der numerischen Box in x und y -Richtung erfüllen. Man betrachtet i.a. an beiden Enden der Box die gleichen Moden. Hier wählt man ebene Wellen für festes z als Moden mit

$$\vec{E}_{vak}^{(\nu),p}(x, y) = \vec{e}_p e^{i(k_x^{(\nu)}x + k_y^{(\nu)}y)}, \quad \nu = 1, \dots, N_{mod}, \quad p = 1, 2, \quad (\text{B.13})$$

wobei \vec{e}_p der Polarisationsvektor der ebenen Welle ist, der i.a. in einen Anteil parallel und einen Anteil senkrecht zur Oberfläche der numerischen Box aufgeteilt wird. (Im Falle senkrechten Einfalls ist diese Aufteilung willkürlich und erfolgt in x - bzw. y -Richtung.) Für jeden Wellenvektor der einfallenden Moden ergeben sich zwei Polarisierungen und für die Wellenvektoren der Vakuum-Moden gilt:

$$\begin{aligned} k_x^{(\nu)} &= k_x + n_\nu \frac{2\pi}{L_x} \\ k_y^{(\nu)} &= k_y + m_\nu \frac{2\pi}{L_y}, \end{aligned}$$

mit $n_\nu, m_\nu \in \mathbb{N}$. Nun gibt man am Ende I der numerischen Box ($z = 0$) eine Kombination

$$\vec{E}(x, y, z = 0) = \sum_{\nu=1}^{N_{mod}} \sum_{p=1}^2 \xi_{\nu,p}^I \vec{E}_{vak}^{(\nu),p}(x, y) \quad (\text{B.14})$$

und am Ende II der numerischen Box ($z = L_z$) eine Kombination

$$\vec{E}(x, y, z = L_z) = \sum_{\nu=1}^{N_{mod}} \sum_{p=1}^2 \xi_{\nu,p}^{II} \vec{E}_{vak}^{(\nu),p}(x, y) \quad (\text{B.15})$$

der betrachteten Moden vor. Damit ist das Gleichungssystem der numerischen Box lösbar und es besteht die Aufgabe, aus der Lösung die ein-, bzw. auslaufenden Moden zu trennen. Kennt man nur die Anteile einer Mode auf einer Ebene, so kann man nicht unterscheiden, wie sich diese in die ein- und auslaufenden Moden

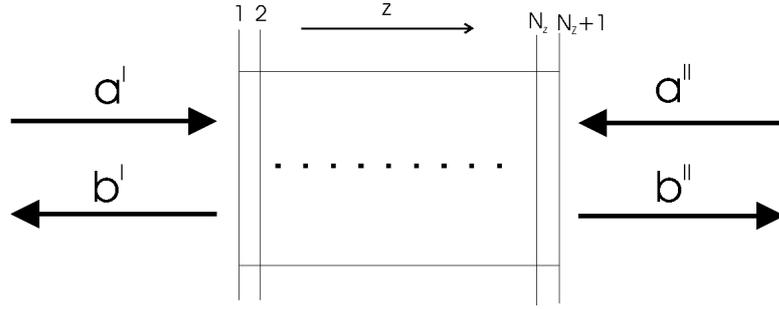


Abbildung B.10: Durch Betrachten zweier benachbarter Ebenen kann man die Moden in ein- und auslaufende Moden aufspalten.

aufteilen, da nur die Summe beider Moden bekannt ist. Betrachtet man allerdings eine benachbarte Ebene, so kann man die Anteile in aus- und einlaufende Moden aufteilen. (Abb B.10)

Auf der Seite I ($z = 0$) betrachtet man nun neben der Ebene $(i, j, 1)$ auch die Ebene $(i, j, 2)$. (Diese muss ebenfalls im Vakuum liegen. Gegenfalls muss die numerische Box geeignet vergrößert oder das Gitter verfeinert werden.) Auf beiden Ebenen zerlegt man das berechnete Feld in die Vakuum-Moden, indem man die numerischen Felder auf diese projiziert. (Für $(i, j, 1)$ muss dies nicht getan werden, da die Aufspaltung vorgegeben wurde und somit bereits bekannt ist.) Man erhält also:

$$\vec{E}(i, j, a) = \sum_{\nu, p} w_{\nu, p}^{(a)} \vec{E}_{vak, d}^{(\nu), p}(i, j), \quad a = 1, 2 \quad , \quad (\text{B.16})$$

wobei $\vec{E}_{vak, d}^{(\nu), p}(i, j)$ die diskretisierte Form von $\vec{E}_{vak}^{(\nu), p}(x, y)$ ist und $w_{\nu, p}^{(1)} = \xi_{\nu, p}^I$ ist. Bezeichnet man weiter die ein- bzw. auslaufenden Moden mit $a_{\nu, p}^I$ bzw. $b_{\nu, p}^I$, so gilt:

$$w_{\nu, p}^{(1)} = a_{\nu, p}^I + b_{\nu, p}^I. \quad (\text{B.17})$$

Da es sich bei den Moden jetzt allerdings um Vakuum-Moden handelt, kann man für diese Moden aus $k_x^{(\nu)}$, $k_y^{(\nu)}$ und ω $k_z^{(\nu)}$ mittels $\omega^2 = (\vec{k}^{(\nu)})^2 c^2$ berechnen und daraus, wie groß bei bekannten $a_{\nu, p}$ und $b_{\nu, p}$ und Ebenen-Abstand ($\Delta z = \frac{L_z}{N_z}$) $w_{\nu, p}^{(2)}$ sein müsste, nämlich:

$$w_{\nu, p}^{(2)} = a_{\nu, p}^I e^{ik_z^{(\nu)} \Delta z} + b_{\nu, p}^I e^{-ik_z^{(\nu)} \Delta z}. \quad (\text{B.18})$$

Aus (B.17) und (B.18) kann man dann tatsächlich $a_{\nu,p}^I$ und $b_{\nu,p}^I$ berechnen:

$$a_{\nu,p}^I = \frac{-w_{\nu,p}^{(2)} + w_{\nu,p}^{(1)} e^{-ik_z^{(\nu)} \Delta z}}{e^{-ik_z^{(\nu)} \Delta z} - e^{ik_z^{(\nu)} \Delta z}} \quad (\text{B.19})$$

$$b_{\nu,p}^I = \frac{w_{\nu,p}^{(2)} - w_{\nu,p}^{(1)} e^{ik_z^{(\nu)} \Delta z}}{e^{-ik_z^{(\nu)} \Delta z} - e^{ik_z^{(\nu)} \Delta z}}. \quad (\text{B.20})$$

Analog dazu kann man auch $a_{\nu,p}^{II}$ und $b_{\nu,p}^{II}$ berechnen:

$$a_{\nu,p}^{II} = \frac{-w_{\nu,p}^{(N_z)} + w_{\nu,p}^{(N_z+1)} e^{-ik_z^{(\nu)} \Delta z}}{e^{-ik_z^{(\nu)} \Delta z} - e^{ik_z^{(\nu)} \Delta z}} \quad (\text{B.21})$$

$$b_{\nu,p}^{II} = \frac{w_{\nu,p}^{(N_z)} - w_{\nu,p}^{(N_z+1)} e^{ik_z^{(\nu)} \Delta z}}{e^{-ik_z^{(\nu)} \Delta z} - e^{ik_z^{(\nu)} \Delta z}}. \quad (\text{B.22})$$

Man muss hierbei darauf achten, dass $e^{ik_z^{(\nu)} \Delta z} \neq e^{-ik_z^{(\nu)} \Delta z}$ ist, was aber i.a. gewährleistet werden kann, wenn man Δz klein genug wählt. (Δz sollte üblicherweise schon wegen der Genauigkeit der Rechnung klein genug gewählt sein um die Ungleichung zu erfüllen, da sonst die numerische Diskretisierung der Maxwell-Gleichungen ebenfalls zu ungenau wird.)

Damit hat man die Moden an beiden Enden der numerischen Box in ein- und auslaufende Moden aufgespalten. Nun fasst man die Moden noch in einem $4N_{mod}$ -komponentigen Vektor zusammen

$$a^{(1)} = ((a_{\nu,p}^I), (a_{\nu,p}^{II})) \quad (\text{B.23})$$

$$b^{(1)} = ((b_{\nu,p}^I), (b_{\nu,p}^{II})) \quad (\text{B.24})$$

und führt die (komplexe) Streumatrix S ein, für die für jedes Paar ein- und ausfallender Vektoren a_{ein} und b_{aus} gilt:

$$S a_{ein} = b_{aus}. \quad (\text{B.25})$$

Damit erhält man aus (B.25) mit $a^{(1)}$ und $b^{(1)}$ $4N_{mod}$ Gleichungen

$$\sum_{j=1}^{4N_{mod}} S_{i,j} a_j^{(1)} = b_i^{(1)}, \quad i = 1, \dots, 4N_{mod} \quad (\text{B.26})$$

für die $(4N_{mod})^2$ Unbekannten $S_{i,j}$. Wiederholt man das ganze Verfahren $4N_{mod}$ mal mit linear unabhängigen Vorgaben $(\xi_{\nu,p}^I)$ und $(\xi_{\nu,p}^{II})$, so erhält man bei jeder der Rechnungen jeweils die ein- und auslaufenden Vektoren $a^{(2)}, b^{(2)}, \dots, a^{(4N_{mod})}, b^{(4N_{mod})}$ und für jedes dieser Paare ein- und auslaufender Vektoren muss die Streubedingung (B.25) gelten, also:

$$\sum_{j=1}^{4N_{mod}} S_{i,j} a_j^{(k)} = b_i^{(k)}, \quad i = 1, \dots, 4N_{mod}, \quad k = 1, \dots, 4N_{mod}. \quad (\text{B.27})$$

Somit hat man $(4N_{mod})^2$ Gleichungen für die $(4N_{mod})^2$ Unbekannten $S_{i,j}$ und kann damit die Streumatrix berechnen, aus der man wiederum sehr einfach die Reflexion bzw. Transmission berechnen kann. Man nimmt einfach einen einfallenden Vektor a , der nur für die Komponente der einfallenden Welle 1 und sonst null ist und erhält somit durch Anwendung von (B.25) die Anteile der auslaufenden Moden. Summiert man die Beträge der Quadrate der zurücklaufenden Moden (hier werden nur Moden berücksichtigt, die im Vakuum auch eine echte Wellenausbreitung besitzen), so erhält man die Reflexion. Summiert man die Quadrate der Beträge der Moden, die am anderen Ende der numerischen Box auslaufen (auch hier werden nur Moden berücksichtigt, die im Vakuum eine echte Wellenausbreitung besitzen), so erhält man die Transmission.

B.2 Bandstruktur mittels des FDFD-Verfahrens

Weiterhin wäre es für die Suche nach einer kompletten Bandlücke auch von Interesse, Bandstrukturen berechnen zu können. Dies sollte mit dem FDFD-Verfahren prinzipiell auch möglich sein, wurde aber nur ansatzweise durchgeführt und hier nicht präsentiert. Dazu kann man ähnlich vorgehen wie im Fall der Transfermatrix-Methode. Dort bestimmt man die Transfermatrix, die die Felder in einer Basis auf einer Seite mit den Felder in der gleichen Basis am anderen Ende der Einheitszelle verknüpft, so dass gilt

$$v_2 = T v_1,$$

wobei v_1 und v_2 die Felder an den Enden der Einheitszellen sind. Aus den Eigenwerten mit Betrag 1 der Matrix T kann man dann k_z berechnen.

Im Fall des FDFD-Verfahrens kann man nun so vorgehen, dass man eine numerische Box wählt, deren eine Seitenfläche (I) am Rand der Einheitszelle und deren zweite Seitenfläche (II) außerhalb der Einheitszelle liegt. Im Gegensatz zum FDFD-Verfahren, wie es hier vorgestellt wurde, wählt man nun keine ebenen Wellen als Basisfunktionen, sondern Felder, bei denen das Feld an allen Punkten, bis auf einen, verschwindet. Nimmt man den Basis-Satz aller Felder für alle N Gitterpunkte, so hat man also $2N$ Basisfunktionen. Jetzt gibt man $(2N)$ auf (I) linear unabhängige Linearkombinationen $v_{(I)}^{(i)}, i = 1, \dots, 2N$ der Basisfunktionen auf beiden Rändern der numerischen Box vor. (Am einfachsten verwendet man für jede Rechnung nur Anteile jeweils einer Basisfunktion und auf dem anderen Ende (II) der numerischen Box beliebige Linearkombinationen.) Jetzt betrachtet man die Felder auf dem Rand der Einheitszelle (II') und zerlegt diese in die Basisfunktionen und erhält somit die Vektoren $v_{(II')}^{(i)}$. Analog zum Fall der Transfer-Matrix-Methode gilt nun, dass es eine $2N \times 2N$ Matrix T gibt, so dass gilt:

$$v_{(II')}^{(i)} = T v_{(I)}^{(i)}, \quad i = 1, \dots, 2N. \quad (\text{B.28})$$

Man erhält somit für jedes i $2N$ Gleichungen in den Komponenten von T und somit für alle i insgesamt $(2N)^2$ Gleichungen und kann somit die Matrix T berechnen. Ein Problem kann jedoch entstehen, da man nicht garantieren kann, dass die Vektoren $v_{(II')}^{(i)}$ auch linear unabhängig sind (und somit die Gleichung (B.28) auch lösbar ist). Im Fall, dass die $v_{(II')}^{(i)}$ linear abhängig sind, muss man unter Umständen die vorgegebenen Randbedingungen, oder den Rand (II) der numerischen Box anders wählen. Hat man die Matrix T berechnet, so kann man, wie im Fall der Transfer-Matrix-Methode, aus den Eigenwerten mit Betrag 1 den Wert k_z berechnen. Allerdings hat man hier auch ähnliche Probleme wie bei dem modifizierten Plane-Wave-Verfahren, nämlich, dass man nicht einfach eine Bandstruktur entlang einer beliebigen Linie in der Brillouin-Zone, sondern nur entlang von Linien mit $k_x = konst$ und $k_y = konst$ bestimmen kann.

Literaturverzeichnis

- [1] V.P. Bykov, *Sov. Phys. JETP*, **35**, 269 (1972)
- [2] E. Yablonovitch, *Phys. Rev. Lett.*, **58**, 2059 (1987)
- [3] S. John, *Phys. Rev. Lett.*, **58**, 2486 (1987)
- [4] G. Kurizki, A.Z. Genack, *Phys. Rev. Lett.*, **61**, 2269 (1988)
- [5] E. Yablonovitch, T.J. Gmitter, K.M. Leung, *Phys. Rev. Lett.*, **67**, 2295 (1991)
- [6] K.S. Yee, *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, **14**, 302 (1966)
- [7] P.B. Johnson, R.W. Christy, *Phys. Rev. B*, **6**, 4370 (1972)
- [8] P.W. Atkins, “*Molecular Quantum Mechanics (second edition)*”, Oxford University Press, New York, 1983
- [9] J.D. Joannopoulos, R.D. Meade, J.N. Winn, “*Photonic Crystals: Molding the Flow of Light*”, Princeton University Press, Princeton, 1995
- [10] F. Bloch, *Z. Physik*, **52**, 555 (1928)
- [11] G. Floquet, *Ann. École Norm. Sup.*, **12**, 47 (1883)
- [12] A. Moroz, *Phys. Rev. Lett.*, **83**, 5274 (1999)
- [13] Z. Wang, C.T. Chan, W. Zhang, N. Ming, P. Sheng, *Phys. Rev. B*, **64**, 113108 (2001)
- [14] M. Sigalas, C.M. Soukoulis, E.N. Economou, C.T. Chan, K.M. Ho, *Phys. Rev. B*, **48**, 14121 (1993)

- [15] M.M. Sigalas, C.M. Soukoulis, C.T. Chan, K.M. Ho, *Phys. Rev. B*, **49**, 11080 (1994)
- [16] M.M. Sigalas, C.T. Chan, K.M. Ho, C.M. Soukoulis, *Phys. Rev. B*, **52**, 11744 (1995)
- [17] K. Sakoda, N. Kawai, T.Ito, A. Chutinan, S. Noda, T. Mitsuyu, K. Hirao, *Phys. Rev. B* **64** 045116 (2001)
- [18] T. Ito, K. Sakoda, *Phys. Rev. B*, **64**, 045117 (2001)
- [19] M.M. Sigalas, C.T. Chan, K.M. Ho, C.M. Soukoulis, *Phys. Rev. B*, **52**, 11744 (1995)
- [20] E. Moreno, D. Erni, C. Hafner, *Phys. Rev. B*, **65**, 155120 (2002)
- [21] S. Fan, P.R. Villeneuve, J.D. Joannopoulos, *Phys. Rev. B*, **54**, 11245 (1996)
- [22] P.M. Bell, J.B. Pendry, L.M. Moreno, A.J. Ward, *Comput. Phys. Commun.*, **85**, 306 (1995)
- [23] S.G. Johnson, J.D. Joannopoulos, *Optics Express*, **8**, 173 (2001)
- [24] K. Cho, J. Ushida, M. Bamba, *arXiv:cond-mat/0311496 v1* (21 Nov 2003)
- [25] D.C. Sorensen, *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, **13**, 357 (1992)
- [26] J.B. Pendry, *J. Phys. [Condensed Matter]*, **8**, 1085 (1996)
- [27] J.B. Pendry, *J. Mod. Optics*, **41**, 209 (1994)
- [28] J. Arriaga, A.J. Ward, J.B. Pendry, *Phys. Rev. B* **59** 1874 (1991)
- [29] W.M. Roberson, G. Arjavalingam, R.D. Meade, K.D. Brommer, A.M. Rappe, J.D. Joannopoulos, *Phys. Rev. Lett.*, **68**, 2023 (1992)
- [30] T. Weiland, *Archiv für Elektronik und Übertragungstechnik*, **31**, 116 (1977)
- [31] A. Christ, H.L. Hartnagel, *IEEE Transactions on Microwave theory and techniques*, **35**, 688 (1987)
- [32] A.L. Pokrovsky, V.Kamaev, C.Y. Li, Z.V. Vardeny, A.L. Efros, D.A. Kurdyukov, V.G. Golubev, *Phys. Rev. B*, **71**, 65 114 (2005)