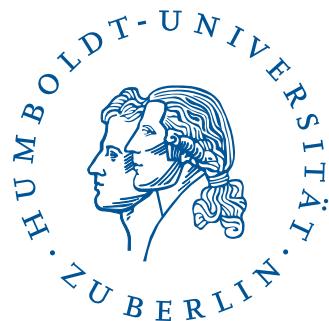


Design und Optimierung von Wellenleitern und Gitterkopplern für Photonische Kristall-Strukturen

BACHELORARBEIT



zur Erlangung des akademischen Grades
Bachelor of Science (B. Sc.)
im Fach Physik

eingereicht an der
Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät I
Institut für Physik
Humboldt-Universität zu Berlin

von
Carlo Barth
geboren am 08.10.1987 in Dessau

Betreuung:

1. Prof. Dr. Oliver Benson
2. Dr. Alejandro Saenz

*...Meinem Lehrer, Herrn Gerd Wildau,
der die Begeisterung für Physik in mir geweckt hat...*

Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung	3
<hr/>	
2 Theoretische Vorberachtungen	5
2.1 Grundgleichung	5
2.1.1 Allgemeine Maxwell-Gleichungen	5
2.1.2 Wichtige Vereinfachungen für Photonische Kristalle	6
2.1.3 Allgemeine Lösungen: Moden	6
2.1.4 Behandlung als Eigenwertproblem	8
2.1.5 Skalierbarkeit und skaleninvariante Einheiten	8
2.2 Eigenschaften Photonischer Kristalle	9
2.2.1 Grundbegriffe und Dimensionalität	9
2.2.2 Reziprokes Gitter	10
2.2.3 Bloch'sches Theorem	11
2.2.4 Bloch-Wellenvektor	12
2.2.5 Photonische Bandstruktur	13
2.2.6 TE- und TM-Moden	13
2.3 Numerische Methoden	15
2.3.1 Lösungsmethoden	15
2.3.2 Ebene Wellen-Methode	17
2.3.3 FDTD-Methode	18
<hr/>	
3 Ergebnisse und Diskussion	21
3.1 Bandstruktur des hexagonalen Gitters	22
3.1.1 Zweidimensionaler Fall	22
3.1.2 Dreidimensionaler Fall	23
3.2 L ₃ -Resonator	24
3.2.1 Resonatorgüte	26
3.2.2 Moden beim L ₃ -Resonator	27
3.2.3 Beeinflussung des Q-Faktors	28
3.3 Wellenleiter	29
3.3.1 Transmissionsspektrum des W ₁ -Wellenleiters	30

3.3.2	Effizienz des W1-Wellenleiters	32
3.4	Koppler	33
3.4.1	Vorgehensweise bei den Simulationen	33
3.4.2	Auskopplung ohne Koppelstruktur	35
3.4.3	Grundlegende Koppler-Struktur	35
3.4.4	Auskopplung mit Kopplerstruktur	36
3.4.5	Halbierter Koppler	38
3.4.6	Einkopplung mit und ohne Träger	39
3.4.7	Modifikation des Koppler-Designs	41
<hr/>		
4	Schlussfolgerungen	43
4.1	Freie Software	43
4.2	L ₃ -Resonator	44
4.3	Wellenleiter	44
4.4	Koppler	45
<hr/>		
A	Anhang	47
A.1	Verwendete Software und Arbeitsweise	47
A.2	Programmbeschreibung	47
A.2.1	functions.scm	48
A.2.2	crystalctl	49
<hr/>		
	Literatur	51

Zusammenfassung

In dieser Arbeit sollten grundlegende Anwendungen Photonischer Kristall-Membranen mit hexagonaler Gitterstruktur unter Verwendung numerischer Methoden untersucht und optimiert werden. Dazu zählen der L₃-Resonator, der W₁-Wellenleiter und eine Struktur zur Ein- bzw. Auskopplung elektromagnetischer Wellen in die bzw. aus der Membran. Dafür wurde die Bandstruktur mit der ebene Wellen-Methode untersucht und die Propagation der Felder durch die Struktur mithilfe von FDTD-Simulationen berechnet.

Für den L₃-Resonator konnte durch die Verschiebung der Randlöcher eine Steigerung des Q-Faktors von 2300 auf ca. 20 000 erreicht werden. Diesbezüglich wurde die Abhängigkeit der Güte von der Verschiebung der Randlöcher durch hochauflösende Simulationen ermittelt. Der W₁-Wellenleiter wurde im Hinblick auf sein Transmissionsspektrum und seine Dämpfung analysiert. Die Dämpfung pro Gitterkonstante konnte dabei auf 0.93 % abgeschätzt werden. Bei der Untersuchung der Koppler-Strukturen konnte sowohl die Ein- als auch die Auskopplung mit Maximaleffizienzen von 21.5 % bzw. 41.1 % erreicht werden.

Zuletzt bietet die Arbeit eine Einschätzung hinsichtlich der Vorteile der Verwendung freier Software für Berechnungen der numerischen Elektrodynamik und eine Beschreibung der entwickelten Skripten.

1 Einleitung

Die historische Abfolge physikalischer Entdeckungen ist auf den ersten Blick nicht so linear, wie man es von dieser präzisen Wissenschaft erwarten würde. Sonst wäre die Bezeichnung *Photonischer Kristall* sicher ohne den Zusatz „*Photonischer*“ ausgekommen, dient er doch zur Abgrenzung gegenüber dem schon bekannten *Kristall* der Festkörperphysik. Obwohl für die Analyse dieser Kristalle Quantenmechanik benötigt wird, die erst im 20. Jahrhundert entwickelt wurde, sind sie im Vergleich zu Photonischen Kristallen bereits lange studiert. Einzige Ausnahme ist der BRAGG-Spiegel, der bereits im 19. Jahrhundert entdeckt wurde.

Das Wort *photonisch* deutet an, dass das Analogon zum Elektron der Festkörperkristalle beim Photonischen Kristall Lichtquanten – also Photonen – sind. Die Physik zur Beschreibung der Lichtausbreitung war zu Beginn des 20. Jahrhunderts schon sehr weit entwickelt. Mit geometrischer Optik, Wellenoptik und zuletzt der von MAXWELL begründeten elektromagnetischen Optik, war die Theorie zur Beschreibung Photonischer Kristalle bereits entdeckt. Der Grund dafür, dass sogar die Festkörperphysik noch früher als Photonische Kristalle eine Vielzahl an Publikationen auslöste, war eher technischer Natur.

Elektromagnetische Wellen sind *periodisch* und weisen daher bei der Wechselwirkung mit periodischen Medien besondere Eigenschaften auf. Mit periodischen Medien sind insbesondere Substanzen gemeint, in denen der Brechungsindex in zyklisch wiederkehrenden Bereichen bestimmte diskrete Werte annimmt. Die interessanten Eigenschaften treten aber erst dann zutage, wenn die Größenordnung dieser Periode mit der der Lichtwellenlänge vergleichbar wird und bei Wellen im optischen Bereich demnach im Nanometer-Bereich liegt. Genau dieser Grund sorgte dafür, dass die Entwicklung Photonischer Kristalle, die gezielt optische Lichtwellen nutzen, zwangsläufig erst Ende des letzten Jahrhunderts begonnen konnte. In diesem Zeitraum hat die immer stärkere Miniaturisierung, besonders durch die Computertechnologie, die technischen Möglichkeiten für die Nanooptik verfügbar gemacht.

Der erste Schwerpunkt dieser Arbeit liegt in der numerischen Simulation bereits bekannter Strukturen mit Hilfe von *freier Software*. Die Hauptschwierigkeit dabei ist das Fehlen einer grafischen Benutzeroberfläche, sodass die Simulationen rein programmiersprachlich erzeugt werden müssen. Die verwendeten Programme lieferten jedoch hervorragende Ergebnisse und es konnte ein skriptbasiertes Programm geschrieben werden, welches eine einfache Erzeugung der Strukturen ermöglicht.

Der physikalische Schwerpunkt lag auf der Untersuchung von Resonatoren, Wellenleitern und Koppelstrukturen. Neben der Optimierung der L3-Resonatorgüte durch Modifikation der Geometrie sollte der W1-Wellenleiter auf seine Transmissionseigenschaften untersucht und nach Möglichkeit eine Dämpfung bestimmt werden. Bei den Kopplerstruk-

turen handelt es sich um die Möglichkeit Licht in den Photonischen Kristall hinein bzw. aus ihm heraus zu bringen. Da dies aus einer Quelle, die sich senkrecht über der Struktur befindet, aus geschehen soll, müssen diese Strukturen Interferenzeffekte für die Umleitung ausnutzen. Hauptaugenmerk lag dabei auf der Effizienz einer speziellen, bereits bekannten Struktur und der Optimierung derselben.

Im Folgenden werden zunächst die theoretischen Grundlagen zur Untersuchung Photonischer Kristalle zusammengefasst. Dabei wird auch auf die numerischen Methoden eingegangen, die den Simulationsalgorithmen zugrunde liegen. Im Anschluss werden die Ergebnisse dargelegt und diskutiert, sowie Schlussfolgerungen aus der Arbeit gezogen. Der Anhang bietet zuletzt einen Überblick über die Vorgehensweise bei der Simulationsarbeit und die dafür geschriebenen Programme.

2 Theoretische Vor betrachtungen

Die Untersuchung Photonischer Kristalle erfolgt hauptsächlich durch numerische und experimentelle Techniken. Auch in der vorliegenden Arbeit wurde von der Möglichkeit Gebrauch gemacht, die Rechenleistung moderner Computer zur nährungsweisen Lösung der zugrunde liegenden Differentialgleichungen zu nutzen.

Dennoch ist es für die sinnvolle Arbeit mit diesen Methoden wichtig, die theoretischen Hintergründe der Numerik und der Photonischen Kristalle selbst, zu verstehen. In diesem Kapitel werden die grundlegenden theoretischen Konzepte eingeführt, die für das Verständnis der Arbeit unverzichtbar sind. Dabei werden sich die Ausführungen an der Herleitung in [1] orientieren. Auf weitere Literatur wird an den entsprechenden Stellen verwiesen.

2.1 Grundgleichung

2.1.1 Allgemeine Maxwell-Gleichungen

Die Grundlage für die Beschreibung der Ausbreitung elektromagnetischer Wellen liefern die MAXWELL-Gleichungen. In SI-Einheiten nehmen sie die folgende Form an

$$\begin{aligned}\vec{\nabla} \cdot \vec{B} &= 0, & \vec{\nabla} \times \vec{E} + \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} &= 0, \\ \vec{\nabla} \cdot \vec{D} &= \rho, & \vec{\nabla} \times \vec{H} - \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} &= \vec{J}.\end{aligned}\tag{1}$$

Dabei sind \vec{E} und \vec{H} die makroskopische elektrische bzw. magnetische Feldstärke, \vec{D} die dielektrische Verschiebung, \vec{B} die magnetische Flussdichte, sowie ρ die Ladungs- und \vec{J} die Stromdichte. Für die Beschreibung Photonischer Kristalle können weitere Annahmen getroffen werden, die eine Vereinfachung der allgemeinen Gleichungen (1) bewirken. Zunächst werden gemischte Dielektrika betrachtet in denen homogene Bereiche des selben dielektrischen Mediums vorliegen, die nur vom Ortsvektor \vec{r} abhängen. Die Struktur ist unabhängig von der Zeit t und es gibt keine freien Ladungen oder Ströme. In einem solchen Medium gelten die Vereinfachungen

$$\rho = 0, \quad \vec{J} = 0.$$

Des Weiteren wird davon ausgegangen, dass sich die Komponenten D_i der elektrischen Flussdichte \vec{D} als Potenzreihe der Komponenten E_i des elektrischen Feldes \vec{E} darstellen

lassen

$$D_i = \epsilon_0 \sum_j \epsilon_{ij} E_j + \epsilon_0 \sum_{j,k} \chi_{ijk} E_j E_k + \epsilon_0 \mathcal{O}(E^3), \quad (2)$$

wobei $\epsilon_0 \approx 8.854 \cdot 10^{-12} \text{ F m}^{-1}$ die *Permittivität des Vakuums* ist. Darauf aufbauend werden im nächsten Unterabschnitt vereinfachte MAXWELL-Gleichungen folgen.

2.1.2 Wichtige Vereinfachungen für Photonische Kristalle

Die folgenden fünf wichtigen Annahmen sind für viele Dielektrika sinnvoll:

1. Die Feldstärken sind klein, sodass in Gleichung (2) χ_{ijk} und höhere Terme vernachlässigt werden können.
2. Das betrachtete Material ist makroskopisch und isotrop, sodass $\vec{E}(\vec{r}, \omega)$ und $\vec{D}(\vec{r}, \omega)$ über ϵ_0 und einen skalaren Faktor $\epsilon(\vec{r}, \omega)$ in Beziehung stehen (*relative Permittivität*).
3. Die Dielektrizitätskonstante ist frequenzunabhängig.
4. Das betrachtete Material ist transparent, sodass $\epsilon(\vec{r})$ eine positive reelle Zahl ist, und
5. nicht magnetisierbar.

Die Beziehungen zwischen Flussdichten und Feldstärken nehmen die einfache Form

$$\vec{D}(\vec{r}) = \epsilon_0 \epsilon(\vec{r}) \vec{E}(\vec{r}), \quad \vec{B}(\vec{r}) = \mu_0 \vec{H}(\vec{r}) \quad (3)$$

an, wobei $\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7} \text{ H m}^{-1}$ die *Permeabilität des Vakuums* ist. Eine weitere daraus folgende Vereinfachung ist die Beziehung zwischen der relativen Permittivität und dem Brechungsindex des verwendeten Materials

$$\epsilon(\vec{r}) = n(\vec{r})^2. \quad (4)$$

Es ist deshalb irrelevant, ob die Größe n oder ϵ zur Charakterisierung des Materials verwendet wird. Die MAXWELL-Gleichungen für ein solches System lauten dann wie folgt

$$\begin{aligned} \vec{\nabla} \cdot \vec{H}(\vec{r}, t) &= 0, & \vec{\nabla} \times \vec{E}(\vec{r}, t) + \mu_0 \frac{\partial \vec{H}(\vec{r}, t)}{\partial t} &= 0, \\ \vec{\nabla} \cdot [\epsilon(\vec{r}) \vec{E}(\vec{r}, t)] &= 0, & \vec{\nabla} \times \vec{H}(\vec{r}, t) - \epsilon_0 \epsilon(\vec{r}) \frac{\partial \vec{E}(\vec{r}, t)}{\partial t} &= 0. \end{aligned} \quad (5)$$

2.1.3 Allgemeine Lösungen: Moden

Da die Gleichungen (5) lineare Differentialgleichungen sind, können räumliche von zeitlichen Abhängigkeiten separiert werden. Die Lösungen für die Felder werden dann durch

einen Satz von *Moden* dargestellt, der eine Überlagerung von sinusförmigen Wellen darstellt (FOURIER-Analyse). Die Zeitabhängigkeit ist durch eine komplexwertige Exponentialfunktion gegeben

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

Die physikalisch beobachtbaren Felder werden dann – wie in der Wellenoptik üblich – durch den Realteil dieser komplexen Felder dargestellt. Setzt man diese beiden Gleichungen in (5) ein, erhält man über die beiden Divergenz-Gleichungen

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{H}(\vec{r}) = 0, \quad \vec{\nabla} \cdot [\epsilon(\vec{r})\vec{E}(\vec{r})] = 0. \quad (6)$$

Demnach existieren für beide Felder weder Quellen noch Senken innerhalb des Mediums. Dies ist äquivalent zu der Aussage, dass die elektromagnetischen Wellen *transversal* sind. Setzt man nämlich für $\vec{H}(\vec{r})$ eine ebene Welle der Form $\vec{H}(\vec{r}) = \vec{a} \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r})$ an, führt Gleichung (6) auf die Forderung $\vec{a} \cdot \vec{k} = 0$, also die Transversalitätsbedingung.

Mit der Beschränkung auf diese transversalen Wellen ist es möglich, nur die beiden Gleichungen aus (5) für die Lösung des Problems zu verwenden, in denen die Rotation der Felder auftaucht

$$\vec{\nabla} \times \vec{E}(\vec{r}, t) - i\omega\mu_0\vec{H}(\vec{r}, t) = 0, \quad (7a)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{H}(\vec{r}, t) + i\omega\epsilon_0\epsilon(\vec{r})\vec{E}(\vec{r}, t) = 0. \quad (7b)$$

Diese beiden Gleichungen können des Weiteren separiert werden. Dafür wird zunächst Gleichung (7b) durch $\epsilon(\vec{r})$ dividiert und die Rotation gebildet:

$$\vec{\nabla} \times \left(\frac{1}{\epsilon(\vec{r})} \vec{\nabla} \times \vec{H}(\vec{r}) \right) + i\omega\epsilon_0 (\vec{\nabla} \times \vec{E}(\vec{r})) = 0.$$

Nun gilt gemäß Gleichung (7a) $\vec{\nabla} \times \vec{E}(\vec{r}) = i\omega\mu_0\vec{H}(\vec{r})$. Ersetzt man das elektrische Feld über diese Gleichung und nutzt die Beziehung $c = 1/\sqrt{\epsilon_0\mu_0}$ aus, so folgt die **Grundgleichung** für die Beschreibung Photonischer Kristalle

$$\vec{\nabla} \times \left(\frac{1}{\epsilon(\vec{r})} \vec{\nabla} \times \vec{H}(\vec{r}) \right) = \left(\frac{\omega}{c} \right)^2 \vec{H}(\vec{r}). \quad (8)$$

Diese Gleichung wird auch als *verallgemeinerte Helmholtzgleichung* des magnetischen Feldes bezeichnet (vgl. [2]). Um ein gegebenes Problem zu lösen, ist es ausreichend diese Gleichung für transversale Wellen zu lösen und das \vec{E} -Feld über Gleichung (7b) aus dem \vec{H} -Feld zu berechnen. Warum das magnetische dem elektrischen Feld vorzuziehen ist, wird in Unterabschn. 2.1.4 gezeigt.

2.1.4 Behandlung als Eigenwertproblem

Die Grundgleichung (8) kann auch als Operatorgleichung aufgefasst werden. Dabei stellt $\vec{H}(\vec{r})$ den Eigenvektor und $(\omega/c)^2$ den Eigenwert dar. Um die Struktur deutlicher zu machen, wird der Operator $\hat{\Theta}$ wie folgt definiert

$$\hat{\Theta} := \vec{\nabla} \times \frac{1}{\epsilon(\vec{r})} \vec{\nabla} \times, \quad (9)$$

sodass sich die Grundgleichung schreiben lässt als

$$\hat{\Theta} \vec{H}(\vec{r}) = \left(\frac{\omega}{c} \right)^2 \vec{H}(\vec{r}). \quad (10)$$

Wie in [1] (Kap. 2) gezeigt wird, ist $\hat{\Theta}$ hermitesch, woraus unmittelbar folgt, dass die Eigenwerte – und damit insbesondere ω – reelle Werte annehmen. Im Gegensatz zum magnetischen Feld ist der Operator $\hat{\Theta}$ des elektrischen Feldes nicht hermitesch. Aus diesem Grund löst man die Grundgleichung immer über das magnetische Feld und berechnet das elektrische Feld dann gemäß Gleichung (7b).

2.1.5 Skalierbarkeit und skaleninvariante Einheiten

Nimmt man bei der Betrachtung dielektrischer Medien an, dass diese makroskopisch sind – also quantenmechanische Effekte vernachlässigt werden können – so gibt es keine Unterschiede die aus der Wahl der Längenskala resultieren: die MAXWELL-Gleichungen sind *skaleninvariant*. Dies gilt insbesondere auch für die Grundgleichung (8). Ersetzt man in dieser die relative Permittivität $\epsilon(\vec{r})$ durch eine skalierte Permittivität $\epsilon'(\vec{r}) = \epsilon(\vec{r}/s)$, ($s \in \mathbb{R}$), so ergibt sich mit der Variablentransformation $\vec{r}' = s\vec{r}$ und $\vec{\nabla}' = \vec{\nabla}/s$ die skalierte Grundgleichung

$$s\vec{\nabla}' \times \left(\frac{1}{\epsilon(\vec{r}'/s)} s\vec{\nabla}' \times \vec{H}(\vec{r}'/s) \right) = \left(\frac{\omega}{c} \right)^2 \vec{H}(\vec{r}'/s).$$

Da aber $\epsilon(\vec{r}'/s) = \epsilon'(\vec{r}')$ gilt, vereinfacht sich diese zu

$$\vec{\nabla}' \times \left(\frac{1}{\epsilon'(\vec{r}')} \vec{\nabla}' \times \vec{H}(\vec{r}'/s) \right) = \left(\frac{\omega}{cs} \right)^2 \vec{H}(\vec{r}'/s).$$

Die Lösungen des um den Faktor s skalierten Systems, ergeben sich demnach einfach dadurch, dass die Eigenfunktionen und die zugehörigen Eigenfrequenzen ebenfalls um den Faktor s skaliert werden – es existiert keine ausgezeichnete Längenskala.

Um diesen Vorteil der MAXWELL-Gleichungen auszunutzen, werden in dieser Arbeit *skaleninvariante Einheiten* verwendet. Die Naturkonstanten ϵ_0 , μ_0 und c sind in diesen Einheiten gleich 1. Die Gitterkonstante a der betrachteten Photonischen Kristalle (s. Unterabschn. 2.2.1) wird dabei als Längeneinheit dienen. Die Zeiteinheit ist ebenfalls durch a gegeben, da $t = a/c$ und $c = 1$ ist. Die Frequenz ergibt sich somit durch $f = 1/a$ (bzw. die Kreisfrequenz $\omega = 2\pi/a$) oder mit der Vakuumwellenlänge λ_0 über $f = a/\lambda_0$.

2.2 Eigenschaften Photonischer Kristalle

2.2.1 Grundbegriffe und Dimensionalität

Dieser Abschnitt orientiert sich zusätzlich an den Ausführungen in [2] (Abschn. 7.2). Die Nomenklatur hält sich dabei weiterhin an die in [1].

Um eine Klassifizierung der Photonischen Kristalle vorzunehmen zählt man die so genannten *Achsen der Periodizität*, in denen sich die optischen Eigenschaften des dielektrischen Materials räumlich periodisch ändern. Es kann bis zu drei dieser Achsen geben, sodass man ein-, zwei- oder dreidimensionale Photonische Kristalle erhält.

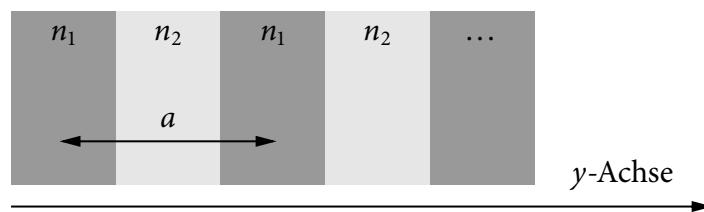


Abbildung 1: Schematische Darstellung eines eindimensionalen Photonischen Kristalls mit Achse der Periodizität in y -Richtung und Gitterkonstante a .

Im eindimensionalen Fall sind die optischen Eigenschaften in den Raumrichtungen senkrecht zur Achse der Periodizität konstant. Abbildung 1 zeigt einen solchen eindimensionalen Photonischen Kristall mit Periodizität in y -Richtung. Der räumliche Abstand, in dem sich die Struktur wiederholt, wird als *Gitterkonstante* bezeichnet, im Beispiel ist sie gleich a . Der *primitive Gittervektor* entspricht dann der Gitterkonstanten multipliziert mit dem Einheitsvektor in Richtung der Achse der Periodizität $\vec{a} = a\vec{e}_y$. Die dielektrische Einheit, die sich immer wiederholt, wird *Einheitszelle* genannt. Für die Permittivität folgt demnach

$$\epsilon(\vec{r}) = \epsilon(\vec{r} \pm \vec{a}), \quad \text{bzw.} \quad \epsilon(\vec{r}) = \epsilon(\vec{r} + \vec{R}) \quad (\vec{R} = m\vec{a}, m \in \mathbb{Z}).$$

Die Wellenausbreitung in einem solchen Medium kann mit der Grundgleichung (8) studiert werden, indem die periodische Permittivität eingesetzt wird.

Die in Abbildung 1 gezeigte Struktur wurde bereits lange vor der Entwicklung des Konzepts des Photonischen Kristalls entdeckt und ist als *dielektrische Multischicht* oder *Braggspiegel* (für $\lambda/4$ -Schichten) bekannt. Sie wird z.B. in Spiegeln, Filtern oder Antireflexionsbeschichtungen (für $\lambda/2$ -Schichten) verwendet.

Anmerkung: Viele Methoden zur Beschreibung Photonischer Kristalle sind analog zu bereits bekannten Verfahren aus der Festkörperphysik. An dieser Stelle sollen deshalb nur die wichtigsten Begriffe erklärt werden. Für Weiterführendes wird auf die Fachliteratur, z.B [3], verwiesen. Eine weitere kurze Einführung ist in [1] (Appendix B) zu finden.

2.2.2 Reziprokes Gitter

Das kleinste Volumenelement, welches als ganzzahliges Vielfaches der primitiven Gittervektoren \vec{a}_1 , \vec{a}_2 und \vec{a}_3 den Raum vollständig ausfüllt, wird *primitive Elementarzelle*, oder *WIGNER-SEITZ-Zelle* genannt.

Jedes reale Gitter hat ein zugehöriges *reziprokes Gitter* mit den Gittervektoren $\vec{G} = l\vec{b}_1 + m\vec{b}_2 + n\vec{b}_3$ ($l, m, n \in \mathbb{Z}$) und den primitiven Translationen

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)}, \quad \vec{b}_2 = \frac{2\pi\vec{a}_3 \times \vec{a}_1}{\vec{a}_2 \cdot (\vec{a}_3 \times \vec{a}_1)}, \quad \vec{b}_3 = \frac{2\pi\vec{a}_1 \times \vec{a}_2}{\vec{a}_3 \cdot (\vec{a}_1 \times \vec{a}_2)}. \quad (11)$$

Eine identische Definition dieser primitiven Gittervektoren folgt mit dem KRONECKER-Delta

$$\vec{a}_i \cdot \vec{b}_k = 2\pi\delta_{ik}, \quad \text{mit} \quad \delta_{ik} = \begin{cases} 1 & \text{wenn } i = k \\ 0 & \text{wenn } i \neq k. \end{cases}$$

Jeder andere Gitterpunkt des reziproken Gitters lässt sich von einem beliebigen Gitterpunkt aus über eine Translation \vec{G} mit ganzzahligen Werten von l , m und n erreichen. Bildet man das Skalarprodukt aus einem realen und einem reziproken Gittervektor so erhält man

$$\vec{R} \cdot \vec{G} = (i\vec{a}_1 + j\vec{a}_2 + k\vec{a}_3) \cdot (l\vec{b}_1 + m\vec{b}_2 + n\vec{b}_3) = 2\pi(il + jm + kn),$$

also ein ganzzahliges Vielfaches von 2π . Ist die Funktion $f(\vec{r})$ invariant gegenüber einer Verschiebung um den Gittervektor \vec{R} , so ist die entsprechende FOURIER-Reihe gegeben durch

$$f(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} f_{\vec{G}} e^{i\vec{G} \cdot \vec{r}}.$$

\vec{G} durchläuft dabei sämtliche, dem realen Gitter zugeordnete, reziproke Gittervektoren. Die Translationsinvarianz ist dabei erhalten

$$f(\vec{r} + \vec{R}) = \sum_{\vec{G}} f_{\vec{G}} e^{i(\vec{G} \cdot \vec{r} + \vec{G} \cdot \vec{R})} = \sum_{\vec{G}} f_{\vec{G}} e^{i\vec{G} \cdot \vec{r}} = f(\vec{r}).$$

Das reziproke Gitter verfügt ebenfalls über eine primitive Elementarzelle, die *1. BRILLOUIN-Zone* genannt wird. Die Lösungen der Grundgleichung müssen maximal in diesem Bereich gefunden werden, da alle weiteren Lösungen entartet sind. Treten weitere Symmetrien hinzu – wie beim später ausschließlich verwendeten hexagonalen Gitter – kann der Lösungsraum noch weiter auf die *irreduzible BRILLOUIN-Zone* eingeschränkt werden.

Die BRILLOUIN-Zone und das reziproke Gitter spielen bei der Berechnung von Bandstrukturen eine wichtige Rolle. Durch sie erhält man die Grenzen für die Streuung der Wellenvektoren, aus denen die Eigenzustände berechnet werden können (vgl. [4]).

2.2.3 Bloch'sches Theorem

Will man im Rahmen der Festkörperphysik die Bewegung von Elektronen im Kristallgitter beschreiben, ist es nur schwer möglich das exakte Vielteilchenproblem zu lösen. Deshalb wird das Problem in der BLOCH'schen Theorie auf die Bewegung eines einzelnen Elektrons in einem Potential reduziert. Da die Gitteratome periodisch angeordnet sind, weißt auch das Potential diese Periodizität auf.

Ein sehr ähnliches Problem stellt die Lichtausbreitung in einem periodischen Photonischen Kristall dar. Dieser Abschnitt orientiert sich daher an der Herleitung in [5]. Die Periodizität ist im Fall der Photonischen Kristalle gegeben durch die Translationsinvarianz der relativen Permittivität bei Verschiebung um einen Gittervektor \vec{R}

$$\epsilon(\vec{r}) = \epsilon(\vec{r} + \vec{R}).$$

Demnach gilt dies auch für den Operator $\hat{\Theta}$ aus Gl. (9)

$$\hat{\Theta}(\vec{r} + \vec{R}) = \vec{\nabla} \times \frac{1}{\epsilon(\vec{r} + \vec{R})} \vec{\nabla} \times = \vec{\nabla} \times \frac{1}{\epsilon(\vec{r})} \vec{\nabla} \times = \hat{\Theta}(\vec{r}).$$

Nun definieren wir einen *Translationsoperator* $\hat{T}_{\vec{R}}$, der eine Funktion $f(\vec{r})$ um einen Gittervektor \vec{R} verschiebt

$$\hat{T}_{\vec{R}} f(\vec{r}) := f(\vec{r} + \vec{R}). \quad (12)$$

Wählt man als Funktion nun $f(\vec{r}) = \hat{\Theta}(\vec{r}) \vec{H}(\vec{r})$, so ergibt die Anwendung des Translationsoperators

$$\begin{aligned} \hat{T}_{\vec{R}} \hat{\Theta}(\vec{r}) \vec{H}(\vec{r}) &= \hat{\Theta}(\vec{r} + \vec{R}) \vec{H}(\vec{r} + \vec{R}) = \hat{\Theta}(\vec{r}) \vec{H}(\vec{r} + \vec{R}) \\ &= \hat{\Theta}(\vec{r}) \hat{T}_{\vec{R}} \vec{H}(\vec{r}). \end{aligned}$$

Umgeformt ergibt das

$$[\hat{T}_{\vec{R}} \hat{\Theta}(\vec{r}) - \hat{\Theta}(\vec{r}) \hat{T}_{\vec{R}}] \vec{H}(\vec{r}) = 0.$$

Da diese Gleichung für alle möglichen Felder $\vec{H}(\vec{r})$ erfüllt sein muss, gilt offenbar

$$\hat{T}_{\vec{R}} \hat{\Theta} - \hat{\Theta} \hat{T}_{\vec{R}} = 0. \quad (13)$$

Die Operatoren sind also vertauschbar – sie *kommutieren*. Aufgrund dieser Tatsache kann nun analog zur Quantenmechanik vorausgesetzt werden, dass $\vec{H}(\vec{r})$ auch Eigenfunktion des Translationsoperators ist, mit dem Eigenwert λ :

$$\hat{T}_{\vec{R}} \vec{H}(\vec{r}) = \lambda \vec{H}(\vec{r}). \quad (14)$$

Wendet man $\hat{T}_{\vec{R}}$ n -mal auf die Funktion \vec{H} an, führt dies einfach auf eine n -malige Multiplikation mit dem Eigenwert λ

$$(\hat{T}_{\vec{R}})^n \vec{H}(\vec{r}) = \lambda^n \vec{H}(\vec{r}).$$

Da außerdem $(\hat{T}_{\vec{R}})^n \vec{H}(\vec{r})$ gleichbedeutend ist mit $\vec{H}(\vec{r} + n\vec{R})$, und dies aus Normierungsgründen beschränkt sein muss, muss auch $\lambda^n \vec{H}(\vec{r})$ beschränkt sein. Der Betrag von λ darf demnach nicht größer sein als 1. Die gleiche Argumentation für eine Translation in $-\vec{R}$ -Richtung führt jedoch darauf, dass der Betrag von λ auch nicht kleiner sein darf als 1, und somit muss gelten

$$|\lambda| = 1.$$

Eine mögliche Darstellung, die diese Bedingung erfüllt, ist

$$\lambda = e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}},$$

mit dem Wellenzahlvektor \vec{k} . Gleichung (14) lässt sich damit schreiben als

$$\hat{T}_{\vec{R}} \vec{H}(\vec{r}) = \vec{H}(\vec{r} + \vec{R}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} \vec{H}(\vec{r}).$$

Ein möglicher Ansatz für die Funktion \vec{H} ist demnach

$$\vec{H}(\vec{r}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \vec{u}_{\vec{k}}(\vec{r}). \quad (15)$$

Einsetzen dieses Ansatzes führt auf die fundamentale Aussage, dass die Funktion \vec{u} gitterperiodisch sein muss

$$\vec{u}_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R}) = \vec{u}_{\vec{k}}(\vec{r}). \quad (16)$$

Die beiden Gleichungen (15) und (16) zusammen sind allgemein bekannt unter dem Namen BLOCH'sches Theorem (auch BLOCH-FLOQUET-Theorem). Allgemein besagt es, dass die Lösung zu einem hermiteschen und periodischen Eigenwertproblem immer in Form ebener Wellen $\exp(i\vec{k} \cdot \vec{r})$, multipliziert mit einer periodischen Funktion $\vec{u}(\vec{r})$ geschrieben werden kann. Die Periodizität des Gitters ist demnach in den Eigenfunktionen enthalten.

2.2.4 Bloch-Wellenvektor

Die drei reziproken Gittervektoren (s. Unterabschn 2.2.2) dienen des Weiteren zur Definition des BLOCH-Wellenvektors

$$\vec{k} = k_1 \vec{b}_1 + k_2 \vec{b}_2 + k_3 \vec{b}_3, \quad (17)$$

der innerhalb der ersten BRILLOUIN-Zone definiert ist. Im periodischen System ist \vec{k} bis auf die Addition von Vielfachen reziproker Gittervektoren ($2m\pi/a$, $m \in \mathbb{N}$) eine Erhaltungsgröße. Hat das System in allen drei Raumrichtungen diskrete Symmetrie, so ist jedem BLOCH-Wellenvektor in der BRILLOUIN-Zone ein Eigenzustand zu $\hat{\Theta}$ mit Kreisfrequenz $\omega(\vec{k})$ und Eigenfunktion $\vec{H}_{\vec{k}}$ zugeordnet

$$\vec{H}_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \cdot \vec{u}_{\vec{k}}(\vec{r}), \quad (18)$$

wobei $\vec{u}_{\vec{k}}(\vec{r})$ eine periodische Funktion mit $\vec{u}_{\vec{k}}(\vec{r}) = \vec{u}_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R})$ darstellt. Der Eigenzustand oder die Ausbreitungsrichtung werden demnach durch die Addition eines reziproken Gittervektors nicht beeinflusst. Dies ist ein großer Unterschied zum Fall der freien Lichtausbreitung, in dem jeder Wellenvektor einen individuellen physikalischen Zustand darstellt.

2.2.5 Photonische Bandstruktur

Um die photonische Bandstruktur für ein gegebenes System explizit zu berechnen, müssen alle Moden gefunden werden. Diese hängen allein vom BLOCH-Wellenvektor \vec{k} und der periodischen Funktion $\vec{u}_{\vec{k}}(\vec{r})$ ab. Um $\vec{u}_{\vec{k}}(\vec{r})$ zu berechnen wird erneut ein Operator eingeführt um die Grundgleichung umzuschreiben

$$\hat{\Theta}_{\vec{k}} := \left(i\vec{k} + \vec{\nabla} \right) \times \frac{1}{\epsilon(\vec{r})} \left(i\vec{k} + \vec{\nabla} \right) \times . \quad (19)$$

Mit diesem Operator schreibt sich die Bestimmungsgleichung für $\vec{u}_{\vec{k}}(\vec{r})$ als

$$\hat{\Theta}_{\vec{k}} \vec{u}_{\vec{k}}(\vec{r}) = \left(\omega(\vec{k})/c \right)^2 \vec{u}_{\vec{k}}(\vec{r}). \quad (20)$$

Mit Gleichung (20), der Transversalitätsbedingung $(i\vec{k} + \vec{\nabla}) \cdot \vec{u}_{\vec{k}} = 0$ und den periodischen Randbedingungen $\vec{u}_{\vec{k}}(\vec{r}) = \vec{u}_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R})$ kann die Funktion \vec{u} berechnet werden. Für jeden Wert von \vec{k} existiert eine unendliche Anzahl an Moden unterschiedlicher Frequenz. Diese werden mit dem *Band-Index* n durchnummeriert.

Für ein gegebenes n variiert die Frequenz kontinuierlich mit \vec{k} . Die Moden stellen deshalb einen Satz stetiger Funktionen $\omega_n(\vec{k})$ dar, wobei eine höhere Frequenz per Definition einem höheren n entspricht. Die *photonische Bandstruktur* bezeichnet die Menge dieser stetigen Funktionen.

Um die Eigenschaften eines Photonischen Kristalls einschätzen zu können, reichen die ersten Bänder meistens aus (typischerweise $n = 4-6$). In Abschnitt 2.3 werden unter anderem numerische Verfahren besprochen, die sich zur näherungsweisen Berechnung dieser Bänder eignen.

2.2.6 TE- und TM-Moden

Unter bestimmten Bedingungen ist es möglich, dass Eigenwertproblem (20) in zwei unabhängige Gleichungen zu separieren und diese getrennt zu lösen. Dadurch werden speziell numerische Methoden z.B. zur Analyse der Modenstruktur vereinfacht.

Sei \hat{M} ein Operator, der angewandt auf ein Vektorfeld $\vec{f}(\vec{r})$ eine Reflexion der Ortskoordinaten bewirkt

$$\hat{M}\vec{f}(\vec{r}) = \vec{f}(-\vec{r}), \quad (21)$$

so kann man einen Spiegeloperator \hat{O}_M definieren, der sich wie folgt zusammensetzt

$$\hat{O}_M \vec{f}(\vec{r}) = \hat{M}\vec{f}(\hat{M}\vec{r}). \quad (22)$$

Dieser Operator erzeugt eine Spiegelung des Vektorfeldes, sodass eine doppelte Anwendung wieder zum Ausgangsfeld führt – die Eigenwerte dieses Operators müssen demnach ± 1 sein.

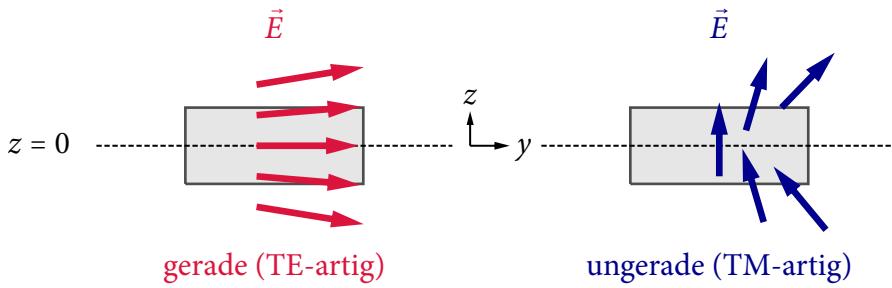


Abbildung 2: Schematische Darstellung der elektrischen Feldlinien für eine dünne dielektrische Struktur (graue Rechtecke) mit einer $z = 0$ -Spiegelsymmetrie-Ebene. Moden, die gerade bezüglich dieser Ebene sind, heißen TE-artig (\vec{E} ist hauptsächlich parallel dazu und exakt parallel für $z = 0$) und Moden, die ungerade bezüglich dieser Ebene sind, heißen TM-artig (\vec{E} ist hauptsächlich senkrecht dazu und exakt senkrecht für $z = 0$). Schema nach [1] (Abb. 7).

Betrachtet man eine dielektrische Struktur, die bezüglich einer Spiegelung an der yz -Ebene symmetrisch ist, so kommutiert der Operator \hat{O}_{M_x} (\hat{M}_x ersetzt x durch $-x$) mit dem Operator $\hat{\Theta}$ (gl. (9)). Man kann zeigen, dass aus dieser Bedingung für die Wirkung des Spiegeloperators \hat{O}_{M_x} auf das Feld $\vec{H}_{\vec{k}}$

$$\hat{O}_{M_x} \vec{H}_{\vec{k}} = e^{i\phi} \vec{H}_{\hat{M}_x \vec{k}} \quad (23)$$

folgt, mit einer beliebigen Phase ϕ (vgl. [1], Kapitel 3). Gilt nun zusätzlich die Bedingung $\hat{M}_x \vec{k} = \vec{k}$, so wird Gl. (23) zu einem Eigenwertproblem und mit Gl. (22) folgt

$$\hat{O}_{M_x} \vec{H}_{\vec{k}}(\vec{r}) = \pm \vec{H}_{\vec{k}}(\vec{r}) = \hat{M}_x \vec{H}_{\vec{k}}(\hat{M}_x \vec{r}). \quad (24)$$

Eine analoge Gleichung lässt sich für $\vec{E}_{\vec{k}}$ ableiten, sodass sowohl das elektrische als auch das magnetische Feld entweder gerade (Eigenwert +1) oder ungerade (Eigenwert -1) unter der Operation \hat{O}_{M_x} sein müssen. Da für die betrachtete dielektrische Struktur aber $\hat{M}_x \vec{r} = \vec{r}$ für jedes \vec{r} innerhalb der xy -Ebene gelten muss und sich das \vec{e} -Feld wie ein Vektor und das \vec{H} -Feld wie ein Pseudovektor transformiert (Beweis s. [6]), können die einzigen nicht verschwindenden Feldkomponenten einer geraden Mode H_x, E_y und E_z sein. Für eine ungerade Mode demnach E_x, H_y und H_z .

Für eine allgemeine Reflexion \hat{M} für die der Spiegeloperator \hat{O}_M mit $\hat{\Theta}$ kommutiert tritt diese Separation nur bei $\hat{M}\vec{r} = \vec{r}$ für $\hat{M}\vec{k} = \vec{k}$ auf. Diese Bedingungen sind aber wie in [1] dargelegt für jeden zweidimensionalen Photonischen Kristall erfüllt. Demnach können alle Moden bei einem 2d-Photonischen Kristall in zwei individuelle Polarisationen aufgeteilt werden. Bei der ersten Polarisation ist das elektrische Feld in der xy -Ebene durch die Komponenten (E_x, E_y, H_z) charakterisiert. Diese Moden heißen **TE-Moden** (transversal elektrisch). Die zweite Polarisation wird durch (H_x, H_y, E_z) beschrieben und ihre Moden heißen **TM-Moden** (transversal magnetisch). Dabei liegt das magnetische Feld innerhalb der xy -Ebene.

Hat die Struktur daher keine Ausdehnung in z -Richtung, spalten alle Moden in TE und TM auf. Gibt es hingegen eine endliche Ausdehnung in z -Richtung, trifft diese Aussage nur in der xy -Ebene exakt zu. Ist die Struktur in z -Richtung jedoch dünn (kleiner als die Wellenlänge des Lichts), sind die Moden zumindest hauptsächlich polarisiert. Abbildung 2 zeigt eine schematische Darstellung der elektrischen Feldlinien für eine dünne dielektrische Struktur (graue Rechtecke) mit einer $z = 0$ -Spiegelsymmetrie-Ebene. Außerhalb der xy -Ebene sind die Moden nicht exakt TE- oder TM-polarisiert. Die Feldvektoren \vec{E} sind aber „eher“ parallel oder „eher“ senkrecht zur Spiegelebene ausgerichtet. Man spricht dann von **TE-artigen** bzw. **TM-artigen** Moden. Diese Unterscheidung spielt in dieser Arbeit eine bedeutende Rolle, da die Polarisationen bei Bandstrukturen immer getrennt betrachtet werden. Eine entscheidende Tatsache ist, dass TE- und TM-(artige)-Moden *nicht koppeln*. TE- und TM-Moden sind Eigenmoden zum Spiegeloperator mit verschiedenen Eigenwerten. Da der Spiegeloperator mit $\hat{\Theta}$ kommutiert, sind sie auch Eigenmoden zu $\hat{\Theta}$. Eigenfunktionen zu verschiedenen Eigenwerten sind orthogonal, daher mischen TE und TM nicht.

2.3 Numerische Methoden

Neben den zuvor besprochenen theoretischen Hintergründen sollen nun die numerischen Verfahren erläutert werden, durch deren Hilfe die Ergebnisse dieser Arbeit nahezu ausschließlich produziert wurden. Dabei ist nur ein kurzer Abriss dieses sehr umfangreichen Gebietes – der numerischen Elektrodynamik – im Rahmen dieses Textes möglich. Orientieren wird sich dieser Teil an einer ebenfalls knapp gehaltenen Einführung in [1] (Appendix D) und dem Buch [7], welches speziell die FDTD-Methode behandelt.

2.3.1 Lösungsmethoden

Die Problemstellungen der numerischen Photonik lassen sich auf unterschiedliche Art und Weise kategorisieren. Zum einen nach der Methode die verwendet wird, um die unendliche Anzahl der Unbekannten zu reduzieren – den Diskretisierungsverfahren. Zum anderen in drei Hauptkategorien, die sich durch die generelle mathematische Methode zur Lösung der Differentialgleichungen unterscheiden. Diese sind zunächst:

Eigenwertprobleme im Frequenzraum (engl.: „frequency-domain eigenproblems“):

Das Problem wird durch ein Matrix-Eigenwertproblem der Form $Ax = \omega^2 Bx$ dargestellt, um die Bandstruktur des gegebenen Systems zu bestimmen. Die Matrix-Gleichung wird dann durch Techniken der linearen Algebra gelöst, um eine *begrenzte* Anzahl an Eigenvektoren x und Eigenwerten ω^2 zu bestimmen.

Frequenzantwort-Probleme (engl.: „frequency-domain responses“):

Bei dieser Methode wird ebenfalls eine Matrixgleichung formuliert und mit Hilfe linearer Algebra gelöst. Jedoch wählt man hierfür eine Stromdichte-Verteilung $\vec{j}(\vec{x})e^{-i\omega t}$ bei einer festen Frequenz ω , sodass die Matrixgleichung die einfachere

Form $Ax = b$ annimmt.

Zeitpropagations-Simulationen (engl.: „time-domain simulations“)

Die Propagation der Felder $\vec{E}(\vec{x}, t)$ und $\vec{H}(\vec{x}, t)$ wird für diskrete Zeitschritte und jeden Raumpunkt der finiten Struktur berechnet. Ausgangspunkt ist im Allgemeinen eine zeitabhängige Lichtquelle $\vec{J}(\vec{x}, t)$.

Jede Lösungsmethode benötigt außerdem ein Diskretisierungsverfahren, sodass sich eine Vielzahl an Möglichkeiten ergibt. Die vier Klassen der unterschiedlichen Diskretisierungsverfahren sind:

Finite Differenzen-Methoden (engl.: „finite differences“):

Die Struktur wird in ein orthogonales Gitter eingeteilt und die unbekannten Funktionen $f(x)$ durch ihre Werte $f_n \approx f(n\Delta x)$ an den diskreten Gitterpunkten dargestellt. Die Ableitungen der Funktionen werden durch Differenzen am Gitter dargestellt, sodass z.B. für ein einheitliches kartesisches Gitter gilt $df/dx \approx (f_{n+1} - f_{n-1})/2\Delta x$.

Finite Elemente-Methoden (engl.: „finite elements“):

Diese Methode ist eine Art Verallgemeinerung der finite Differenzen-Methode. Der Raum wird in eine diskrete Anzahl geometrischer Elemente (z.B. Dreiecke, Tetraeder, etc.) aufgeteilt und unbekannte Funktionen auf jedem Element approximativ dargestellt. Dafür werden in der Regel Polynome niedriger Ordnung gewählt.

Frequenz-Methoden (engl.: „spectral methods“):

Funktionen werden durch eine Reihenentwicklung in einer vollständigen Basis stetiger, periodischer Funktionen dargestellt. Wird eine FOURIER-Entwicklung gewählt, bezeichnet man diesen speziellen Fall als *ebene Wellen-Methode*. Diese wird in Abschnitt 2.3.2 wegen ihrer Bedeutung für diese Arbeit genauer erläutert.

Randelemente-Methoden (engl.: „boundary-element methods“):

Statt den gesamten Raum in ein Gitter aufzuteilen, werden nur die Ränder (bzw. Grenzen) der Bereiche mit homogenem Brechungsindex diskretisiert. Die homogenen Bereiche werden dann analytisch behandelt.

Aus diesem sehr weiten Spektrum an numerischen Möglichkeiten wurden nur die ebene Wellen-Methode zur Berechnung der Bandstrukturen und Zeitpropagations-Simulationen mit der finite Differenzen-Methode, oder kurz der FDTD-Methode (**Finite Difference Time Domain**), zur Berechnung der generellen Lichtausbreitung (Moden, Q-Werte, Transmissionspektra, etc.) verwendet. Diese sind in einer großen Anzahl an kommerziellen oder auch freien Softwarepaketen implementiert. Die nächsten beiden Unterabschnitte geben eine Einführung in die konkreten mathematischen Verfahren dieser Methoden.

2.3.2 Ebene Wellen-Methode

Die ebene Wellen-Methode eignet sich besonders für die Berechnung photonischer Bandstrukturen (Unterabschn. 2.2.5). Die Aufgabe besteht also darin, Gleichung 20 numerisch zu lösen, die an dieser Stelle noch einmal wiederholt werden soll:

$$\left[(\mathrm{i}\vec{k} + \vec{\nabla}) \times \frac{1}{\epsilon(\vec{r})} (\mathrm{i}\vec{k} + \vec{\nabla}) \times \right] \vec{u}_{\vec{k}}(\vec{r}) = \hat{\Theta}_{\vec{k}} \vec{u}_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{\omega(\vec{k})^2}{c^2} \vec{u}_{\vec{k}}(\vec{r}). \quad (25)$$

Die Funktion \vec{u} soll periodisch sein, wie es vom BLOCH'schen Theorem gefordert wird. Jede periodische Funktion kann in eine FOURIER-Reihe entwickelt werden, sodass folgender Ansatz sinnvoll ist

$$\vec{u}_{\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} \vec{c}_{\vec{G}}(\vec{k}) e^{i\vec{G}\cdot\vec{r}}. \quad (26)$$

Dabei läuft \vec{G} über sämtliche reziproke Gittervektoren und die Koeffizienten $\vec{c}_{\vec{G}}$ werden mit dem Volumen der Einheitszelle V dargestellt durch

$$\vec{c}_{\vec{G}} = \frac{1}{V} \int e^{-i\vec{G}\cdot\vec{r}} \vec{u}_{\vec{k}}(\vec{r}) d^3 r. \quad (27)$$

Wie in Unterabschn. 2.2.2 gezeigt, ist das Skalarprodukt $\vec{G}\cdot\vec{R}$ immer ein Vielfaches von 2π , sodass die FOURIER-Reihe automatisch die Periodizität des realen Gitter beinhaltet. Setzt man die Transversalitätsbedingung $(\mathrm{i}\vec{k} + \vec{\nabla}) \cdot \vec{u}_{\vec{k}} = 0$ in (26) ein, erhält man eine Forderung an die Koeffizienten

$$(\vec{k} + \vec{G}) \cdot \vec{c}_{\vec{G}} = 0.$$

Wird also das \vec{H} -Feld gemäß dem BLOCH'schen Theorem (15) aus einer gitterperiodischen Funktion und ebenen Wellen zusammengesetzt, ist die Transversalitätsbedingung immer erfüllt. Des Weiteren werden für jedes \vec{G} zwei senkrecht aufeinander stehende Einheitsvektoren $\vec{e}_{\vec{G}}^{(1)}$ und $\vec{e}_{\vec{G}}^{(2)}$ orthogonal zu $(\vec{k} + \vec{G})$ gewählt, sodass die Koeffizienten wie folgt dargestellt werden

$$\vec{c}_{\vec{G}} = c_{\vec{G}}^{(1)} \vec{e}_{\vec{G}}^{(1)} + c_{\vec{G}}^{(2)} \vec{e}_{\vec{G}}^{(2)}. \quad (28)$$

Die Problemstellung wurde somit darauf vereinfacht, pro Gittervektor \vec{G} zwei Unbekannte $c_{\vec{G}}^{(1)}$ und $c_{\vec{G}}^{(2)}$ zu berechnen.

Um das gesamte Problem auf einem Computer lösen zu können, müssen jedoch noch weitere Vereinfachungen getroffen werden. Insbesondere müssen die unendlichen Summen auf endliche reduziert werden. Setzt man Gleichung (26) in die Grundgleichung (25) ein und bildet von beiden Seiten die FOURIER-Transformierte, ergibt sich die wichtige Gleichung

$$\sum_{\vec{G}'} \left[-\epsilon_{\vec{G}'-\vec{G}}^{-1} \cdot (\vec{k} + \vec{G}') \times (\vec{k} + \vec{G}) \times \right] \vec{c}_{\vec{G}} = \frac{\omega^2}{c^2} \vec{c}_{\vec{G}'}. \quad (29)$$

Um die Vereinfachungen zu erreichen werden Terme höherer Ordnung in $|\vec{G}|$ vernachlässigt und $\epsilon_{\vec{G}}^{-1}$ durch eine *diskrete FOURIER*-Transformation approximiert. Damit wird Gl. (29) zu einer finiten Matrix-Eigenwertgleichung der Form $Ax = \omega^2 x$. Dabei ist x ein Spaltenvektor mit den Unbekannten $c_{\vec{G}}^{(l)}$ und A die Koeffizientenmatrix.

Ein weiteres Problem ist die Komplexität $\mathcal{O}(N^2)$ der Berechnung des Produkts Ax . Dadurch würde eine effiziente Lösung großer Probleme unmöglich werden. Es ist jedoch möglich durch schnelle FOURIER-Transformationsalgorithmen (FFT-Algorithmen) die Komplexität auf $\mathcal{O}(N \log N)$ zu reduzieren, was für eine effiziente Berechnung ausreichend ist. Zusätzliche Geschwindigkeitsvorteile können durch so genannte *preconditioners* erreicht werden, mit denen in jedem Iterationsschritt eine Näherungslösung gefunden wird. Für weitere Details wird an dieser Stelle auf den Artikel [8] zur verwendeten freien Software *MPB* verwiesen.

2.3.3 FDTD-Methode

Zeitpropagations-Simulationen – und speziell der FDTD-Algorithmus – sind die allgemeinsten Methoden der numerischen Elektrodynamik. Mit ihnen werden die vollen zeit-abhängigen MAXWELL-Gleichungen simuliert und somit die Propagation der Felder in Raum und Zeit „sichtbar“ gemacht. Dadurch ist es sogar möglich, stark nichtlineare oder zeitlich veränderliche Medien zu untersuchen (vgl. [4], Appendix D).

Beim FDTD-Algorithmus werden sowohl Raum als auch Zeit in ein diskretes Gitter unterteilt. Grundbaustein dieses Gitters ist die sogenannte YEE-Zelle, die in Abbildung 3 dargestellt ist. Die jeweiligen Vektor-Pfeile (rot für die E -Feldkomponenten, blau für die H -Feldkomponenten) sind an den Stellen im Gitter positioniert, an denen die Felder definiert sind und berechnet werden.

Die in den MAXWELL-Gleichungen vorkommenden Ableitungen ($\nabla \times$ und $\partial/\partial t$) werden durch finite Differenzen approximiert. Konkret verwendet man den *zentralen Differenzenquotienten*, der in einer Raumdimension (x) für zeitliche bzw. räumliche Ableitung allgemein definiert ist als

$$\frac{\partial f}{\partial t} \Big|_i^n \simeq \frac{f_i^{n+1} - f_i^{n-1}}{2\Delta t}, \quad \text{bzw.} \quad \frac{\partial f}{\partial x} \Big|_i^n \simeq \frac{f_{i+1}^n - f_{i-1}^n}{2\Delta x}.$$

Dabei ist $f = f(x, t)$ eine beliebige Funktion in x und t . Die Variablen i und n stehen für einen diskreten Gitterpunkt (i, n) , sodass n für die Zeit t_0 steht und $n + 1$ für die Zeit t . Die räumlichen Gitterpunkte werden mit i nummeriert. Die Genauigkeit dieser Approximation ist von zweiter Ordnung in Δt bzw. Δx . Im dreidimensionalen YEE-Gitter ist die partielle Ableitung nach z einer Feldkomponente \mathcal{K} zum Beispiel gegeben durch

$$\frac{\partial \mathcal{K}}{\partial z} \Big|_{i,j,k}^n = \frac{\mathcal{K}_{i,j,k+1/2}^n - \mathcal{K}_{i,j,k-1/2}^n}{2\Delta z} + \mathcal{O}[(\Delta z)^2].$$

Die Zeitpropagation verwendet einen so genannten *leap-frog*-Algorithmus. In diesem werden die \vec{E} -Felder zur Zeit t aus den \vec{E} -Feldern zur Zeit $t - \Delta t$ und den \vec{H} -Feldern zur Zeit

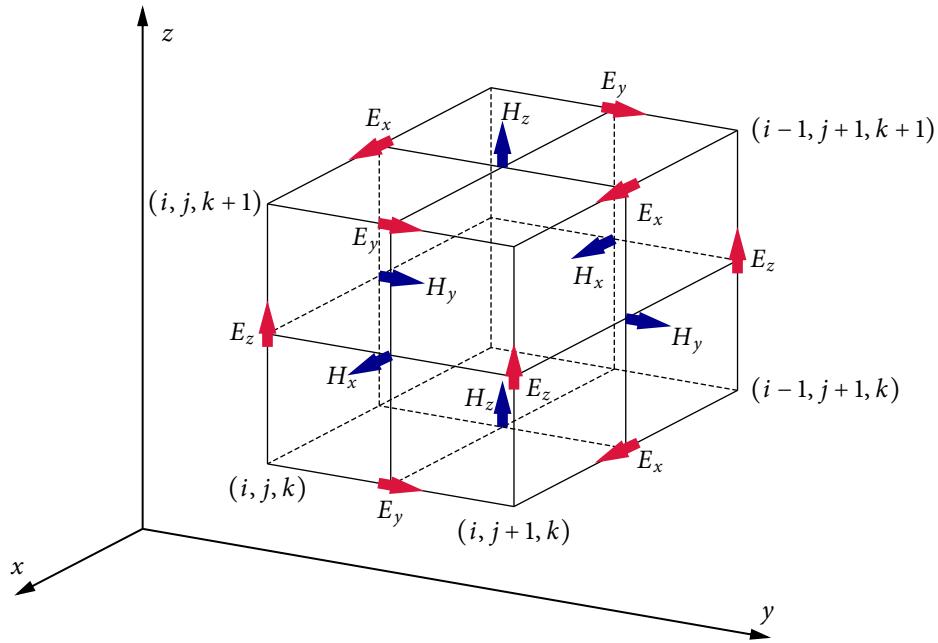


Abbildung 3: Schema der Yee-Zelle und Positionen der elektrischen (rot) und magnetischen (blau) Feldkomponenten. Die jeweiligen Vektor-Pfeile sind an den Stellen im Gitter positioniert, an denen die Felder definiert sind und gespeichert werden.

$t - \Delta t/2$ berechnet, entgegengesetztes gilt für die \vec{H} -Felder zur Zeit $t + \Delta t/2$. Abbildung 4 zeigt den zeitlichen Verlauf der Berechnungen als schematische Darstellung. In dieser Reihenfolge werden alle Feldkomponenten an den entsprechenden YEE-Gitterpunkten Zeitschritt für Zeitschritt näherungsweise berechnet.

Der große Vorteil des FDTD-Algorithmus' gegenüber den anderen Methoden ist die Einfachheit seiner Diskretisierung. Der entsprechende Computer-Code ist schnell zu schreiben und leicht verständlich. Es ist des Weiteren nicht notwendig, lineare Algebra für die Problemlösung zu verwenden, sodass es keine Grenze für die Größe oder Auflösung der zu berechnenden Struktur gibt. Die einzige Limitierung ist durch die steigende Berechnungszeit und den wachsenden Speicherbedarf gegeben. Gegenüber den Frequenzantwort-Methoden besteht ein weiterer Vorteil darin, dass die Berechnung für eine Vielzahl an Frequenzen mit einem Durchlauf durchgeführt werden kann. Dadurch ist es besonders effizient, Transmissions- und Reflexionsspektren auszurechnen.

Das Hauptproblem des FDTD-Algorithmus ist die endliche Ausdehnung der simulierten Struktur. Will man z.B. einen idealisierten Wellenleiter simulieren, so ist dieser theoretisch zumindest in einer Richtung unendlich ausgedehnt. An einem Ende koppelt man Wellen ein und möchte Aussagen über Transmissionen und Ähnliches erhalten. Da die Simulation jedoch endlich ist, kommt es zu Reflexionen an den Wänden, die keine adäquate Beschreibung der idealisierten Struktur zulassen. Im Allgemeinen versucht man

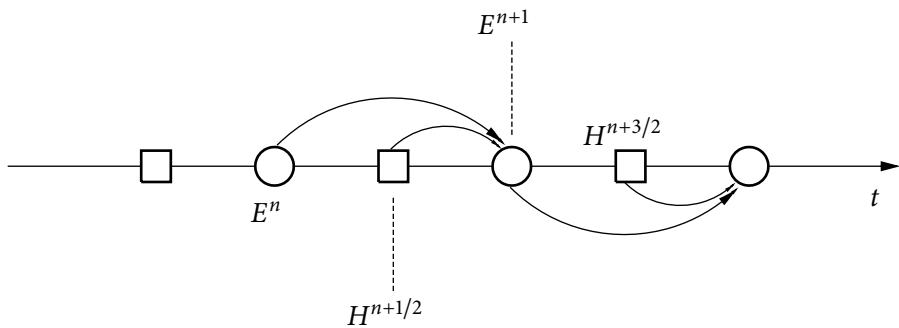


Abbildung 4: Zeitlicher Verlauf der Schritte zur Berechnung der Feldkomponenten im leap-frog-Schema.

daher den unendlichen Raum durch eine absorbierende Randbedingung (engl.: *absorbing boundary condition*) zu approximieren. Die gängige Methode um dies zu erreichen, ist das Hinzufügen eines *PMLs* (*Perfectly Matched Layer*) zur Struktur. Dieser wird in der Regel an den äußeren Wänden der Berechnungszelle positioniert. Innerhalb des PML wird versucht jeder eindringenden Welle eine gegenphasige Welle zu überlagern und diese somit auszulöschen (destruktive Interferenz) – also eine Situation zu erzeugen, die zu einer unendlichen Fortsetzung der Struktur analog ist. Das Problem dabei ist, dass die Wellen meist keine exakten ebenen Wellen sind und auch nicht rechtwinklig auf die Wand treffen. Dadurch ist es numerisch nicht möglich, diese Auslöschung fehlerfrei durchzuführen. Es kommt daher in nahezu jeder Simulation zu ungewünschten Reflexionen an den Wänden, wenn auch mit niedrigen Amplituden. In Transmissionsspektren z.B. entstehen so Schwankungen, die vom realen System nicht gezeigt werden würden. Deshalb muss genau analysiert werden, welche Effekte physikalischer und welche numerischer Natur sind. Eine ausführliche Diskussion dieser Methoden ist in [7] (Kapitel 8 und 9) zu finden.

Ein weiterer Nachteil des FDTD-Algorithmus ist der *Treppeneffekt*, der durch das orthogonale Gitter zustande kommt. Eine gekrümmte Fläche muss zwangsläufig durch Stufen dargestellt werden. Um diesen Effekt zu minimieren, muss entweder die Auflösung erhöht werden, oder die Methode des *subpixel-averaging* verwendet werden. Für eine detaillierte Beschreibung dieser Methode siehe z.B. [9].

3 Ergebnisse und Diskussion

Nachdem die theoretischen Grundlagen in Kapitel 2 skizziert wurden, sollen nun die Ergebnisse der Arbeit dargestellt werden. Alle in diesem Teil betrachteten Strukturen haben als Grundstruktur das *hexagonale Gitter*. Mit dieser Geometrie können unter anderem Resonatoren und Wellenleiter erzeugt werden, die in diesem Kapitel näher untersucht werden. Auch auf Methoden zur Ein- und Auskopplung elektromagnetischer Wellen in zuvor genannte Strukturen, wird in diesem Teil eingegangen.

Ein Hauptgrund der für die Verwendung des hexagonalen Gitters spricht, ist die Verbindung aus einfacher Produzierbarkeit und einer Vielzahl von Anwendungsmöglichkeiten. Zwar können mit 3d-Photonischen Kristallen – dank der vollständigen Bandlücke – immer bessere Werte für Güten und Transmissionen erreicht werden. Diese sind aber wesentlich komplizierter in der Herstellung, sodass jegliche Produktion Schwierigkeiten bereitet. Dennoch ist es einigen Gruppen gelungen diese Schwierigkeiten zu überwinden und vollständige dreidimensionale Bandlücken zu erzeugen (siehe z.B. [10]).

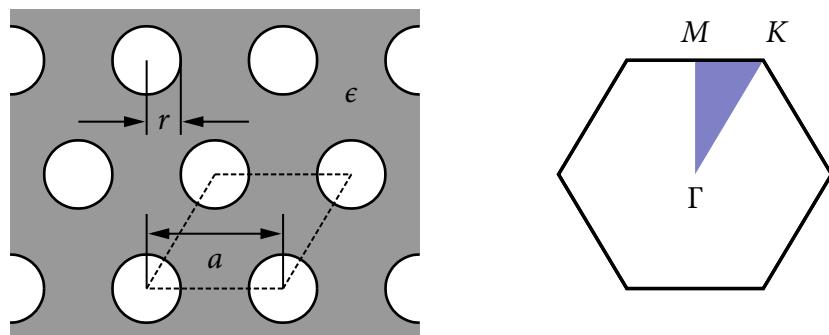


Abbildung 5: Links: Geometrie des hexagonalen Gitters mit Gitterkonstante a , Lochradius r und relativer Permittivität des Materials ϵ . Die gestrichelte Linie zeigt die zugehörige Einheitszelle.
Rechts: Gesamte 1. Brillouin-Zone und hochsymmetrische Punkte M , K und Γ an den Ecken der irreduziblen Brillouin-Zone (blau).

Bei den untersuchten quasi-2d-Photonischen Kristallen handelt es sich um gelochte Membranen. Man macht sich zunutze, dass die Lichtausbreitung in x - und y -Richtung durch die photonische Bandlücke verboten ist, und in z -Richtung durch Totalreflexion. So können Wellenleiter und Resonatoren hohe Güten erreichen, die – wie gezeigt werden wird – durch Modifikationen der Geometrie auch um ein Vielfaches gesteigert werden können.

Abbildung 5 zeigt die verwendete Geometrie und ihre Nomenklatur, sowie die hochsymmetrischen Punkte an den Ecken der irreduziblen BRILLOUIN-Zone (blau). In der Praxis handelt es sich dabei um meist durch Ätzverfahren erzeugte Löcher (Radius r) in einem Dielektrikum aus Gallium-Phosphit (GaP). Dieses durchgängig verwendete Material hat eine relative Permittivität von $\epsilon \approx 10.89$. Die Gitterkonstante a ist in natürlichen Einheiten in der gesamten Arbeit gleich 1 und dient zusätzlich als Einheit zur Charakterisierung der übrigen Parameter. Die gestrichelte Linie zeigt die zugehörige Einheitszelle. Die Dicke des Dielektrikums in z -Richtung wird mit d bezeichnet.

Die Parameter r , d und ϵ dienen dazu, die Eigenschaften der photonischen Bandstruktur zu beeinflussen. Durch die Skaleninvarianz der MAXWELL-Gleichungen kann der Parameter a frei gewählt werden, um z.B. Resonanzfrequenzen so zu legen, dass sie für die verwendete Lichtquelle günstig sind. Im nächsten Abschnitt wird die Bandstruktur dieses Gittertyps konkret betrachtet.

3.1 Bandstruktur des hexagonalen Gitters

Um die Eigenschaften photonischer Kristalle zu verstehen und dadurch sinnvoll beeinflussen zu können, ist es unverzichtbar die photonische Bandstruktur zu kennen. Diese kann für ein beliebiges Gitter numerisch berechnet werden, wofür das freie Software-Paket *MIT Photonic Bands* (MPB) verwendet wurde. Dieses Paket berechnet die Eigenmoden der MAXWELL-Gleichungen mit periodischen Randbedingungen nach der ebene Wellen-Methode. Für eine nähere Beschreibung dieses Programms und den zugrunde liegenden Algorithmen siehe [8].

Da ab jetzt nur noch 2d-Photonische Kristalle eine Rolle spielen, muss darauf geachtet werden, dass die Begriffe 2d und 3d sich nun auf die *räumliche* Dimensionalität der Struktur beziehen. Ist also von einer 2d-Struktur die Rede, ist das hexagonale Gitter mit einer Plattendicke von Null in z -Richtung gemeint. Ist die Plattendicke ungleich Null, spricht man von Photonischen Kristall-Membranen (engl.: photonic crystal slabs).

3.1.1 Zweidimensionaler Fall

Der Fall einer 2d-Struktur soll hier exemplarisch vorgestellt werden, da er das Prinzip der *vollständigen* photonischen Bandlücke veranschaulicht. Abbildung 6 zeigt das numerisch berechnete Banddiagramm für einen Lochradius von $r = 0.25a$. Die roten Linien sind die Bänder der TE-Moden, die blauen die der TM-Moden. Es ist deutlich erkennbar, dass für die TM-Moden keine Bandlücke auftritt, während die TE-Moden eine vollständige Bandlücke aufweisen. Elektromagnetische Wellen mit Frequenzen innerhalb dieser Bandlücke können sich durch die Struktur nicht ausbreiten.

Die 2d-Kristalle sind nur ein theoretisches Modell im zweidimensionalen Raum. Ist die reale 3d-Struktur in z -Richtung jedoch translationsinvariant – also näherungsweise unendlich ausgedehnt – so ergibt sich die vollständige Lösung durch das Produkt aus 2d-Lösung und einer ebenen Welle in z -Richtung.

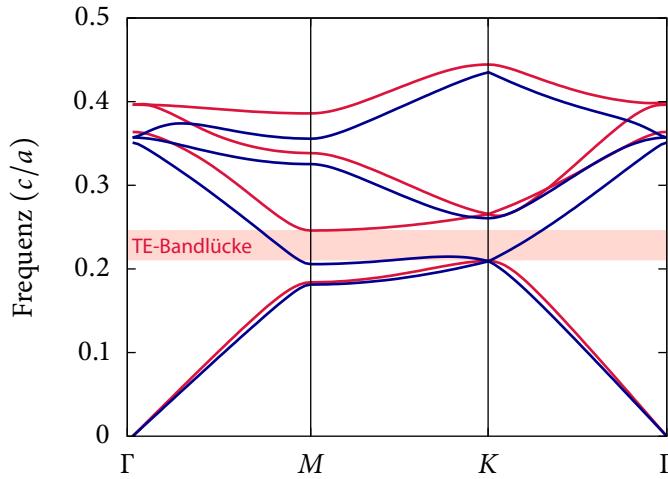


Abbildung 6: Dispersionsdiagramm für die jeweils ersten 4 Bänder der TE- (rot) bzw. TM-Moden (blau) am 2d-hexagonalen Gitter bei einem Lochradius von $r = 0.25a$ und GaP ($n = 3.3$) als Material. Der hellrote Bereich stellt eine vollständige TE-Bandlücke dar.

3.1.2 Dreidimensionaler Fall

Praktisch interessant ist nur der Fall einer endlichen Ausdehnung des Dielektrikums in z -Richtung. Der Wert dieser Dicke hat ebenfalls einen Einfluss auf die Bandstruktur. Viele unterschiedliche Kombinationen von Lochradius und Plattendicke sind denkbar, sodass ein Kompromiss aus guter Produzierbarkeit und möglichst großer Bandlücke gefunden werden muss. Für die folgenden Berechnungen wurden die Parameter zu

$$r = 0.25a \quad \text{und} \quad d = 0.25a$$

gewählt, die ebenfalls in [11] verwendet wurden. Diese Geometrie eignet sich auch gut für die Produktion von Wellenleitern, wie später gezeigt werden wird.

Die Bandstruktur für diesen Fall ist in Abbildung 7 dargestellt. Die schwarze Linie und der darüber liegende graue Bereich stellen den Licht-Kegel dar. Wellen, die in diesem Teil des Phasenraum liegen, können sich auch im Vakuum ausbreiten und die Membran daher ungehindert verlassen. Wellen unterhalb des Lichtkegels unterliegen innerer Totalreflexion in z -Richtung (aufgrund von Impulserhaltung). Analog zum zweidimensionalen Fall (Unterabschn. 3.1.1) gibt es eine Bandlücke der TE-artigen Moden – eine partielle Bandlücke. Wie in [1] (Kap. 8) gezeigt wird, gibt es eine optimale Plattendicke bei der die Bandlücke maximal wird. Allerdings ist, wie bereits erwähnt, die Breite der Bandlücke nicht das einzige entscheidende Merkmal – die einfache Herstellbarkeit muss immer berücksichtigt werden. Für die gewählten Parameter ist die untere bzw. obere Grenzfrequenz der Bandlücke

$$f_{\min} = 0.326\,715\,c/a \quad \text{bzw.} \quad f_{\max} = 0.373\,673\,c/a. \quad (30)$$

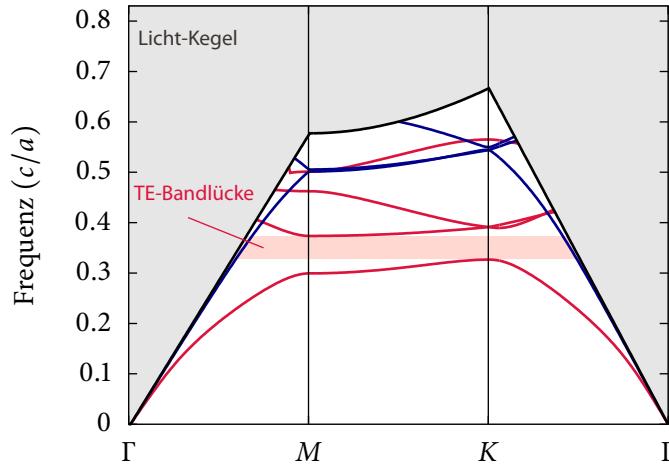


Abbildung 7: Dispersionsdiagramm für die jeweils ersten 4 Bänder der TE- (rot) bzw. TM-artigen Moden (blau) am hexagonalen Gitter bei einem Lochradius von $r = 0.25a$, einer Plattendicke von $d = 0.25a$ und GaP ($n = 3.3$) als Material.

Um eine skaleninvariante Angabe für die Größe der photonischen Bandlücke anzugeben, verwendet man die *gap-midgap ratio* (Lücken-Lückenmitte-Verhältnis). Diese ist definiert als $\Delta\omega/\omega_m$, wobei ω_m die mittlere Frequenz der Bandlücke ist und $\Delta\omega$ die Breite. Ab jetzt wird die Bezeichnung relative Lückenbreite für dieses Verhältnis verwendet und das Ergebnis in Prozent angegeben. Für die Bandlücke aus Abbildung 7 ergibt sich somit eine relative Lückenbreite von ca. 13.4 %. Diese Bandlücke ist für eine sinnvolle Arbeit groß genug.

Abbildung 8 zeigt die Feldverteilungen der ersten beiden Bänder der TE- (E_y -Komponente) bzw. TM-artigen (H_y -Komponente) Moden aus Abbildung 7, jeweils für den M - und den K -Punkt. Die Bilder sind untereinander *nicht farbnormiert*, sodass die Feldstärken nicht verglichen werden können. Die schwarzen Kreise stellen die Umrisse der Luftlöcher dar. Für die TE-artigen Moden ist sehr deutlich zu sehen, dass die Felder bei Band 1 sehr stark innerhalb des Dielektrikums und für Band 2 sehr stark innerhalb der Luft konzentriert sind. Man spricht auch von Luftbändern und dielektrischen Bändern. Die Felder in Luft benötigen eine höhere Energie als im Dielektrikum, was den eigentlichen Grund für die photonische Bandlücke darstellt. Für die TM-artigen Moden ist diese eindeutige Unterscheidung nicht vorhanden und es kommt demnach auch nicht zur Ausprägung einer Bandlücke.

3.2 L3-Resonator

Eine Anwendung von großem praktischen Nutzen ist der *Resonator* – ein Raumbereich den die dort angeregten elektromagnetischen Wellen nicht verlassen können und die Energie somit gespeichert wird. Wie im letzten Abschnitt gezeigt wurde, weisen Photonische

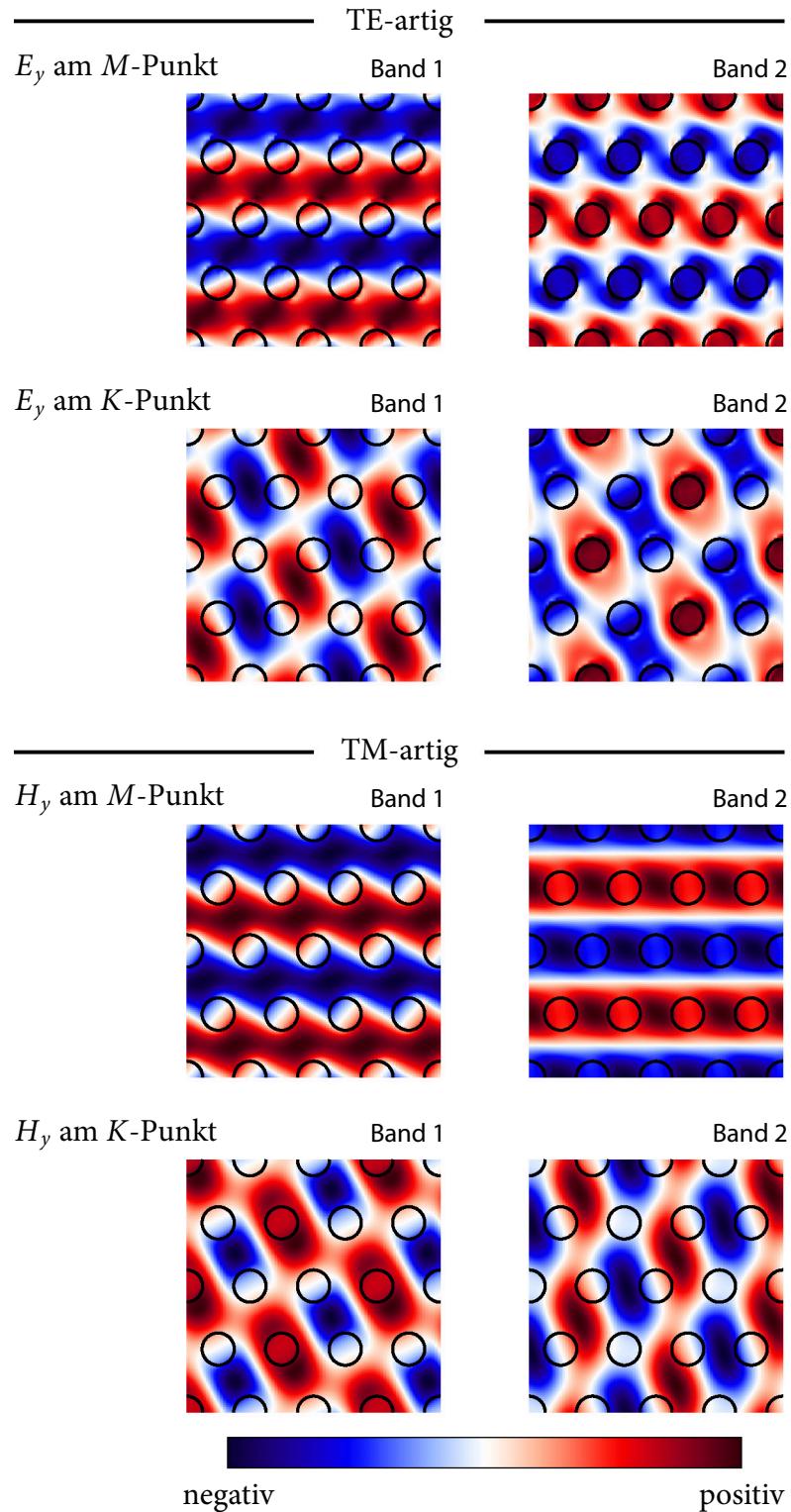


Abbildung 8: Feldverteilungen für die ersten zwei Bänder der TE-artigen (obere 4, E_y -Komponente) und TM-artigen (untere 4, H_y -Komponente) Moden für die Bandstruktur aus Abb. 7 und jeweils für den M - und den K -Punkt. Die Bilder haben individuelle Farbnormierungen, sodass die Feldstärken untereinander nicht vergleichbar sind.

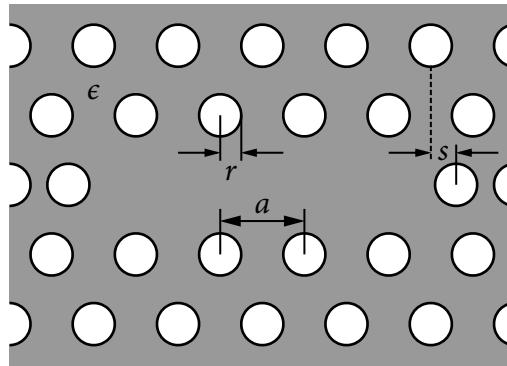


Abbildung 9: Prinzipskizze für den L3-Resonator bestehend aus drei fehlenden Löchern in einem hexagonalen Gitter. Die Löcher haben den Radius r , die Gitterkonstante ist a und die Randlöcher sind um einen Betrag s (in Einheiten von a) nach außen verschoben.

Kristalle bei geschickt gewählter Geometrie eine Bandlücke auf. Im Frequenzbereich der Bandlücke können sich keine Moden ausbilden. Bringt man in diese perfekt periodische Struktur einen Defekt ein, z. B. ein fehlendes Loch im hexagonalen Gitter, ist es in diesem Raumbereich möglich Moden innerhalb der Bandlücke anzuregen. Außerhalb des Defekts sind diese jedoch *evaneszent*, d.h. sie klingen exponentiell ab. Aus diesem Grund kann die Feldenergie den Defektbereich nicht verlassen und bleibt in diesem gespeichert.

Eine bereits häufig untersuchte Struktur ist der *L3-Resonator*. Dieser basiert auf drei fehlenden Löchern in einer Richtung bei der hexagonalen Gitterstruktur. Abbildung 9 zeigt die Prinzipskizze dieses Resonators. Charakterisiert wird die Geometrie durch die Gitterkonstante a , den Lochradius r , die Plattendicke d und die Verschiebung der beiden Löcher am Rand des Resonators s in Einheiten von a . Eine weitere häufig verwendete Modifikation ist die Verkleinerung einzelner Löcher. Diese wird aber wegen der schlechten Produzierbarkeit in dieser Arbeit nicht betrachtet.

3.2.1 Resonatorgüte

Bei der Untersuchung von Resonatoren ist die wichtigste Größe die *Güte*. Man ist daran interessiert Schwingungsenergie möglichst lange in einem bestimmten Raumbereich zu speichern. Die hier betrachteten elektromagnetischen Felder klingen innerhalb eines Resonators exponentiell ab, proportional zu $\exp(-\gamma t/2)$. Die Energie sinkt demnach mit $\exp(-\gamma t)$. Aufgrund der Skaleninvarianz der MAXWELL-Gleichungen ist γ allerdings kein geeignetes Maß um die Verlustrate zu beschreiben. Besser geeignet ist der *Qualitäts-Faktor* (kurz: Q-Faktor)

$$Q := \frac{\omega_0}{\gamma}, \quad (31)$$

wobei ω_0 die Frequenz der betrachteten Mode ist. In zwei Dimensionen (also ohne Ausdehnung in z -Richtung), ist es auf Grund der kompletten photonischen Bandlücke (Abb. 6) möglich, bestimmte Frequenzen perfekt im Resonator gefangen zu halten – also einen Q-Wert von unendlich zu erreichen. In drei Dimensionen sind nur endliche Q-Werte erreichbar, da die Bandlücke nur für k -Werte innerhalb des Lichtkegels auftritt und Strahlungsverluste somit unvermeidbar sind. Die Moden sind räumlich eingeschränkt, was zugleich bedeutet, dass sie im k -Raum weit ausgedehnt sind (Fouriertransformation!). Es gibt daher immer k -Werte die im Lichtkegel liegen und demnach ausstreuen. Unterschiedliche Modifikationen der Geometrie können jedoch erhebliche Steigerung der Resonator-Güte bewirken (s. Unterabschn. 3.2.3), insbesondere dadurch, dass die Fouriertransformierte der räumlichen Feldverteilung möglichst wenige k -Werte innerhalb des Lichtkegels hat.

3.2.2 Moden beim L3-Resonator

Im L₃-Resonator wird meist eine Vielzahl von Moden angeregt, die sich dabei in ihren Q-Werten und Symmetrien unterscheiden. Es ist nicht möglich, alle Moden mit einer einzigen Punktquelle anzuregen, da sich die Knotenpunkte der Felder an unterschiedlichen Positionen befinden.

Einen guten Überblick über die Modenstruktur des L₃-Resonators ist in [12] zu finden. Für die Charakterisierung der einzelnen Moden wird dort die Parität der E_x -Feldkomponente in der xy -Ebene im Zentrum der Membran verwendet. Man platziert die Parität in x -Richtung über der Parität in y -Richtung und fügt einen Index hinzu, der die Energien von 1 beginnend aufsteigend durchnummert. Die Grundmode des L₃-Resonators hat in beiden Raumrichtungen negative Parität und wird somit mit [-1] bezeichnet. Sie hat die niedrigste Energie aller Moden innerhalb des Resonators. Die nächste Mode dieser Parität hätte dann die Bezeichnung [-2].

In den Simulationen wurde eine Punktquelle im Zentrum des Resonators verwendet. Der Q-Wert wird nach Abklingen der Quelle durch die Methode der *harmonischen Inversion* bestimmt, die z.B. in [13] beschrieben ist. Dafür wurde das freie Programm *harminv* verwendet, welches am *MIT* entwickelt wurde. Um das Problem der harmonischen Inversion zu lösen, wird das Schwingungssignal an einem Punkt durch eine endliche Anzahl von Sinus-Schwingungen angenähert. Dabei muss das Signal endliche Länge und Bandbreite haben, kann aber durchaus exponentiell abfallen. Konkret wird eine gegebene Feldkomponente als eine zeitabhängige Funktion $f(t)$ aufgefasst und in eine Reihe der Form

$$f(t) = \sum_n a_n \exp(-i\omega_n t)$$

zerlegt. Dabei sind die a_n die Entwicklungskoeffizienten bzw. Amplituden. Das Programm *harminv* berechnet aus dieser Approximation die Frequenzen, Abklingraten, Amplituden und Phasen der enthaltenen Moden.

Wichtige Faktoren bei der Simulation des L₃-Resonators sind die Auflösung und die Simulationszeit. Bei den ersten Simulationen kam es häufig zu negativen oder stark schwankenden Q-Werten. Eine hohe Auflösung ist entscheidend, um die Auswirkungen des Treppeffekts an den Löchern klein zu halten. Gerade bei großen Q-Werten ist auch eine lange

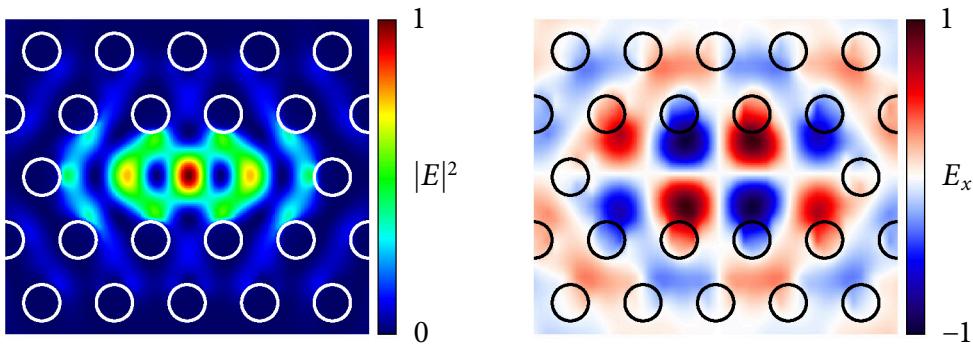


Abbildung 10: Betragsquadrat (links) und x -Komponente (rechts) des elektrischen Feldes der Grundmode beim L3-Resonator ohne Verschiebung der Randlöcher ($s = 0$). Bei der Feldverteilung der E_x -Komponente ist sowohl in x - als auch in y -Richtung eine negative Parität erkennbar.

Simulationszeit wichtig, da die Feldenergie im Resonator nur sehr langsam abnimmt. Es ist daher nötig, sehr lange zu simulieren, damit harminv diesen Abfall gut approximieren kann.

Abbildung 10 zeigt die Energieverteilung $|\vec{E}|^2$ (links) und die Feldverteilung der x -Komponente des elektrischen Feldes der $[-1]$ -Mode – die von nun an kurz als Grundmode bezeichnet wird – in der xy -Ebene (für $z = 0$). Im Zentrum des Resonators hat die E_x -Komponente einen Knotenpunkt. Sowohl in x - als auch in y -Richtung ist eine negative Parität erkennbar, d.h. bei Spiegelung an der jeweiligen Achse muss das Feld mit -1 multipliziert werden, um die vorhandene Feldverteilung darzustellen. Die weißen (bzw. schwarzen) Kreise zeigen die Umrisse der Löcher in der Membran. Diese Mode hat die niedrigste Energie mit einer Frequenz von $f = 0.335\,77\,c/a$ und einem Q-Faktor von $Q = 2346.4$. Im nächsten Unterabschnitt wird gezeigt, wie sich dieser Q-Faktor beeinflussen lässt und sich die Frequenz der Grundmode dabei ändert.

3.2.3 Beeinflussung des Q-Faktors

Die Optimierung der Resonatorgüte ist ein häufig untersuchtes Feld. Viele Veränderungen am Resonatordesign sind denkbar und bieten somit eine große Bandbreite an Parametern, mit denen diese Optimierung vorgenommen werden können. Arbeiten zu diesem Thema sind zum Beispiel in [14], [15], [16] und ebenfalls in [12] zu finden.

In der vorliegenden Arbeit soll nur die Abhängigkeit des Q-Wertes von der Verschiebung der Randlöcher s (s. Abb. 9) untersucht werden. Diese Variation ist sehr einfach zu produzieren und hat zugleich einen großen Einfluss auf den Q-Wert. Es wurde aber Wert auf eine hohe Genauigkeit der Simulationen gelegt, die so in den genannten Arbeiten noch nicht erreicht wurde. Es wurde eine große Struktur von 21×21 Löchern mit einer hohen Auflö-

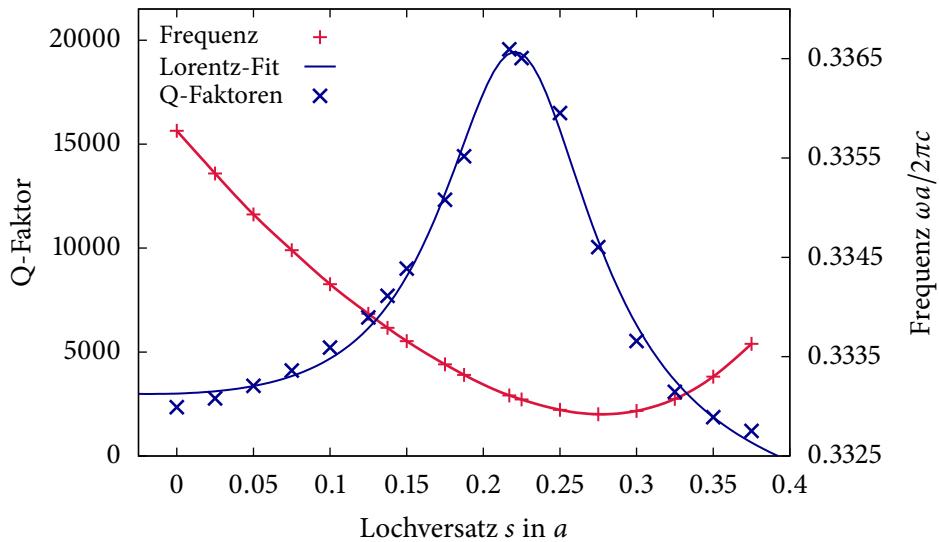


Abbildung 11: Abhängigkeit des Q-Wertes (linke y -Achse) und der Modenfrequenz (rechte y -Achse) von der Verschiebung der äußeren Löcher s beim L3-Resonator.

sung von 20 simuliert. Die Verschiebung s (in Einheiten von a) wurde von 0 bis 0.375 in 18 Schritten durchvariiert und der Q-Wert und die Frequenz der Grundmode aufgenommen.

Abbildung 11 zeigt das Ergebnis der Simulationen. Die blauen Punkte stellen die Q-Werte und die roten die zugehörigen Frequenzen dar. Die Q-Werte wurden mit einem LORENTZ-Fit und einer überlagerten linearen Funktion der Form

$$Q(s) = \underbrace{\frac{2Aw}{4\pi(s - s_c)^2 + w^2}}_{\text{LORENTZ}} + \underbrace{bs + Q_0}_{\text{linear}}$$

angenähert. Dabei ist A die Amplitude, w die Breite und s_c der s -Wert des Maximums der LORENTZ-Kurve. Die Parameter b und Q_0 bestimmen Anstieg und Q-Wert für $s = 0$ der überlagerten linearen Funktion. Die rote Linie verbindet lediglich die Punkte der Frequenzen für eine bessere Erkennbarkeit des Verlaufs. Der maximal erreichte Q-Faktor von $Q_{\max} \approx 19560$ bei einem Lochversatz von $s = 0.217a$ ist um Faktor 8 größer, als der des unmodifizierten Resonators und somit deutlich gesteigert. Nach erreichen des Maximums fällt die Kurve für die Q-Faktoren und liegt ab einem Wert von $s \approx 0.35a$ sogar unterhalb des Wertes für $s = 0$. Die Frequenzen sinken zunächst bei steigendem Q und beginnen erst ab einem Versatz von $s \approx 0.275a$ wieder zu steigen.

3.3 Wellenleiter

Ein wichtiger Aspekt neben der Speicherung der elektromagnetischen Strahlung ist die Leitung dieser Energie in eine bestimmte Richtung. Klassische Lichtleiter verwenden da-

für entweder eine Verspiegelung der Wände oder Totalreflexion aufgrund eines niedrigeren Brechungsindex des umgebenden Materials. Bei Photonischen Kristall-Membranen kann dafür in zwei Richtungen die photonische Bandlücke und in der dritten Totalreflexion genutzt werden. Der W1-Wellenleiter besteht aus einer einfachen fehlenden Lochreihe im hexagonalen Gitter (hier in x -Richtung) und ist in Abb. 12 skizziert.

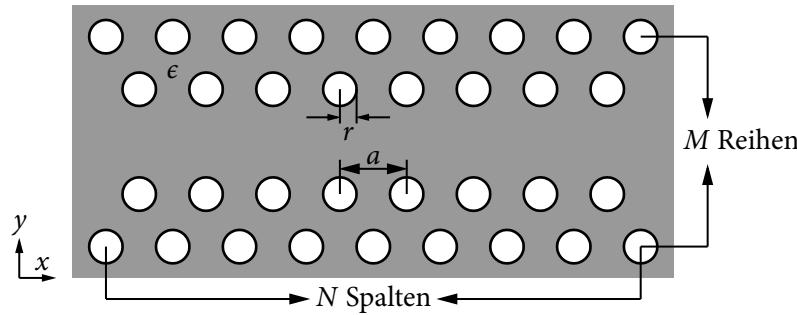


Abbildung 12: Skizze eines 5×9 -W1-Wellenleiters. Die Löcher haben den Radius r und die Gitterkonstante ist a

3.3.1 Transmissionsspektrum des W1-Wellenleiters

In der Simulation werden an einem Ende mit einer Quelle elektromagnetische Wellen im Wellenleiter angeregt, die sich dann in x -Richtung ausbreiten. Die Quelle hat die in y -Richtung eine Ausdehnung von $\sqrt{3}a - 2r$, in z -Richtung von d und keine Ausdehnung in x -Richtung. Sie deckt somit genau die Fläche ab, die der Wellenleiter in der yz -Ebene einnimmt. Ein Flussmonitor am Ende des Wellenleiters summiert die Werte für den Fluss in x -Richtung auf. Um ein Transmissionsspektrum aufnehmen zu können muss jedoch zunächst bekannt sein, wie viel Fluss in den Wellenleiter hinein gegangen ist. Dafür wird die Simulation zunächst *ohne Löcher* durchgeführt und ein Flussmonitor direkt hinter der Quelle positioniert. Durch diese Methode erhält man für jede betrachtete Frequenz zwei Werte für den Fluss in x -Richtung. Der Quotient aus dem Fluss am Ende des Wellenleiters und dem hinter der Quelle ergibt dann die Transmission T . Einige Probleme bei diesem Vorgehen lassen sich jedoch nicht komplett vermeiden. Diese sind:

1. Die Quelle strahlt in beide Richtungen ab. Hinter der Quelle befindet sich zwar ein so genannter *PML* („perfectly matched layer“) um die Strahlung zu absorbieren. Dieser funktioniert aber nicht so „perfect“ wie der Name suggeriert, sodass auch ein Teil reflektiert wird und am Flussmonitor einen positiven Beitrag liefert.
2. Auch am anderen Ende des Wellenleiters wird vom *PML* Strahlung reflektiert. Diese wird vom Flussmonitor negativ gezählt, da die Ausbreitungsrichtung entgegengesetzt ist.

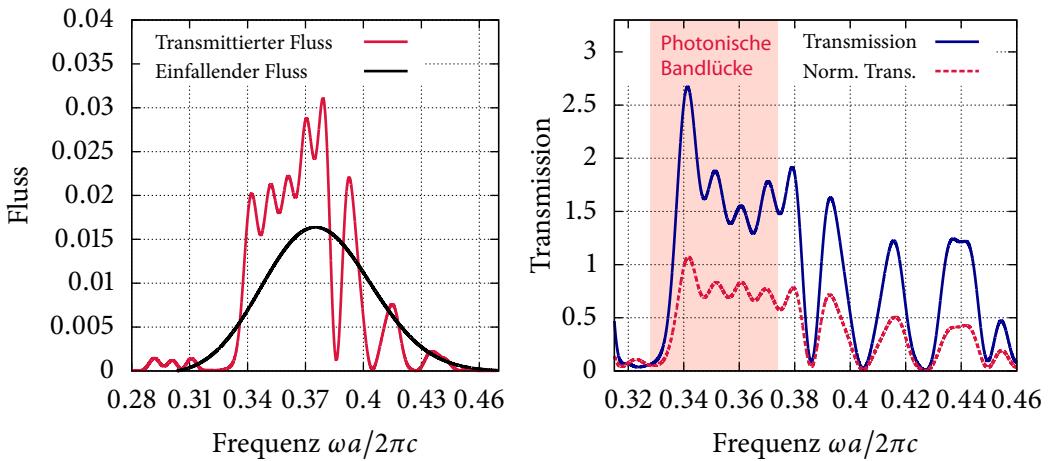


Abbildung 13: Links: Einfallender Fluss der Gauß-Quelle (schwarz) und durch den Wellenleiter transmittierter Fluss (rot).

Rechts: Normiertes Transmissionsspektrum im numerisch stabilen Bereich. Bei Frequenzen innerhalb der photonischen Bandlücke (hellrot) liegen die Transmissionswerte durchgängig höher als 1. Die gestrichelte rote Linie zeigt das selbe Transmissionsspektrum, jedoch mit einer Normierung die durch Simulation mit Löchern und einem Flussmonitor hinter der Quelle erzeugt wurde. Bei diesem Spektrum liegt das Maximum nur etwas höher als 1.

3. Aufgrund der endlichen Länge des Wellenleiters kommt es auch zu weiteren Reflexionen der schnellsten Moden. Das Hin- und Herreflektieren erzeugt Oszillationen im Transmissionsspektrum. Die Simulationszeit muss daher möglichst so gewählt werden, dass die Felder selten hin- und herlaufen, aber dennoch der gesamte Fluss einmal den Wellenleiter passieren konnte.
4. Die simulierten Quellen haben eine von der sie umgebenden Struktur abhängige Abstrahlcharakteristik. Bei der Simulation ohne Löcher ist der Fluss daher rein gaußförmig. Simuliert man mit Löchern, strahlt die Quelle bei einigen Frequenzen stärker als sie es ohne Löcher tut. Grund dafür ist, dass es sich um eine Dipolquelle handelt und die Abstrahlung eines Dipols proportional zur Modendichte $d\omega/dk$ ist. Im Ergebnis erhält man somit Transmissionswerte die größer als 1 sind, da die Modendichte mit Wellenleiter größer ist als ohne. Diese Transmissionswerte liefern somit keine Aussage darüber, welcher Teil der eingegangenen Energie wirklich transmittiert wurde. Es kann davon ausgegangen werden, dass der Wert maximaler Transmission innerhalb der Bandlücke in etwa dem Wert 1 entspricht. Simulationen mit unterschiedlichen Normierungsverfahren, die diesbezüglich durchgeführt wurden, erhärten diesen Verdacht.

Trotz dieser Schwierigkeiten macht die Aufnahme von Transmissionsspektren Sinn, besonders weil sie sich untereinander vergleichen lassen. Auf eine Renormierung der Transmissionswerte auf das Maximum innerhalb der Bandlücke wurde verzichtet, da nicht kon-

kret bewiesen werden konnte, dass die Annahme richtig ist, dass das Maximum dem Wert eins entspricht.

Abbildung 13 zeigt die Ergebnisse der beiden Flussmonitore und das Transmissionsspektrum für einen W1-Wellenleiter von 13×29 Löchern. Wie erwartet treten Transmissionswerte auf, die größer sind als 1. Die größten Werte befinden sich innerhalb der photonischen Bandlücke. Auffällig ist jedoch, dass am unteren Rand der Bandlücke sehr schlechte Werte auftreten, oberhalb des oberen Randes (also außerhalb der Bandlücke) allerdings sehr gute. Diese „Verschiebung“ zu höheren Frequenzen wurde bei allen Simulationen in der gleichen Weise festgestellt, konnte aber nicht erklärt werden. Es wäre zunächst notwendig über reale Messungen festzustellen, ob es sich dabei um ein numerisches Problem (z.B. bei der Berechnung der Bandlücke) oder um einen realen Effekt handelt.

Die rote gestrichelte Linie im linken Diagramm von Abbildung 13 zeigt den Versuch das Problem der zu großen Transmissionswerte zu lösen. Dafür wurde die Normierung nicht mit einem Durchlauf ohne Löcher, sondern mit Löchern und einem Monitor hinter der Quelle durchgeführt. Wie erwartet liegt das Maximum innerhalb der Bandlücke nun bei rund 1. Allerdings nicht exakt bei 1, sodass auch diese Normierung nicht zufriedenstellend ist. Da bei den weiteren Untersuchungen eher der Vergleich zwischen den Ergebnissen eine Rolle spielt, wurde daher auf diese Methode verzichtet.

3.3.2 Effizienz des W1-Wellenleiters

Die Transmission für eine einzige Struktur (sprich Kombination von Löchern in x - und y -Richtung) zu kennen liefert natürlich keine Aussage über die Effizienz des Wellenleiters. Von Interesse ist eine Größe die angibt, wie stark die Dämpfung pro Loch (und damit pro Gitterkonstante) ist. Dafür wurden die Transmissionsspektren noch für 10 weitere Längen des Wellenleiters, bis hin zu 79 Löchern in x -Richtung aufgenommen. Die Transmission wurde dann für den Bereich innerhalb der photonischen Bandlücke (Werte s. Gl. (30)) integriert und diese Ergebnisse in Abhängigkeit von der Anzahl der Löcher N in x -Richtung des Wellenleiters in Abbildung 14 dargestellt. Die Werte lassen sich mit einem exponentiellen Abfall der Form

$$T(N) = A \exp\left(\frac{N - N_c}{N_{\text{loss}}}\right)$$

approximieren. Über den Parameter N_{loss} lässt sich eine Dämpfung pro Loch gemäß $N_D = 1 - \exp(-1/N_{\text{loss}})$ berechnen, für die man erhält

$$\text{Dämpfung pro Loch: } N_D = 0.93\%. \quad (32)$$

Hat die Strahlung also eine Gitterkonstante zurückgelegt, sind noch 99.07 % der eingegangenen Strahlung innerhalb des Wellenleiters vorhanden. Die restliche Energie ist durch Strahlungsverluste verloren gegangen.

Verglichen mit kommerziellen Lichtwellenleitern ist dieser Wert allerdings unbefriedigend. Ein Einmoden-Glasfaserkabel hat beispielsweise eine Dämpfung von weniger als

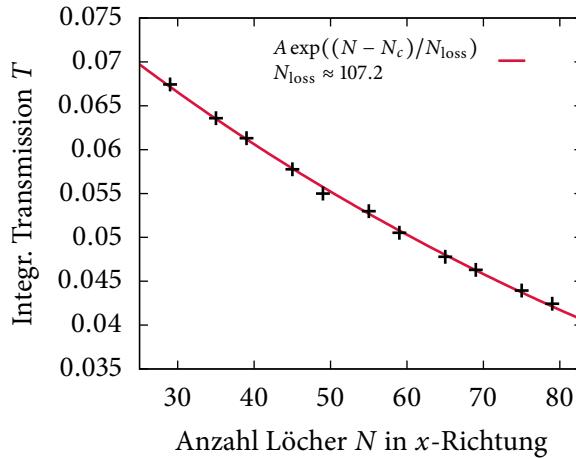


Abbildung 14: Integrierte und normierte Gesamttransmission innerhalb der Bandlücke als Funktion der Lochanzahl N in x -Richtung beim W1-Wellenleiter. Die Fit-Funktion entspricht einem exponentiellem Abfall.

0.3 dB km⁻¹, also ca. 6.6 % pro km. Da die Gitterkonstanten typischerweise im Mikrometer-Bereich liegen, ist die hier berechnete Dämpfung des W1-Wellenleiters somit um Größenordnungen schlechter.

3.4 Koppler

Die bisherigen Simulationen zu Resonatoren und Wellenleitern nutzten Quellen, die an irgendeiner Stelle innerhalb der Membran positioniert wurden. Bei realen Anwendungen und Experimenten stellt sich oft das Problem, Licht senkrecht zur Membran ein- oder auszukoppeln. Hierbei wird die elektromagnetische Strahlung nicht von allein im rechten Winkel in den Wellenleiter einkoppeln. Zunächst wird ein *Koppler* benötigt, der diese Aufgabe möglichst verlustfrei erfüllt. Gleicher gilt für die Auskopplung aus einer solchen Struktur. Wenn z.B. die Energie, die temporär in einem Resonator gespeichert wurde, entnommen bzw. von einem über der Struktur befindlichen Detektor registriert werden soll.

In den nächsten Unterabschnitten wird zunächst die allgemeine Vorgehensweise erklärt und im Anschluss gezeigt, dass eine Koppelstruktur notwendig ist. Im Anschluss wird eine bereits bekannte Struktur auf ihre Koppelgüte hin untersucht und Modifikationen vorgenommen um diese zu beeinflussen.

3.4.1 Vorgehensweise bei den Simulationen

Bei allen Simulationen zur **Auskopplung** wurde eine Quelle an der gegenüberliegenden Seite des Kopplers positioniert. Diese regt wie bei den Simulationen zum Wellenleiter Schwingungsmoden an, die sich in x -Richtung ausbreiten. Mit einem Monitor hinter der

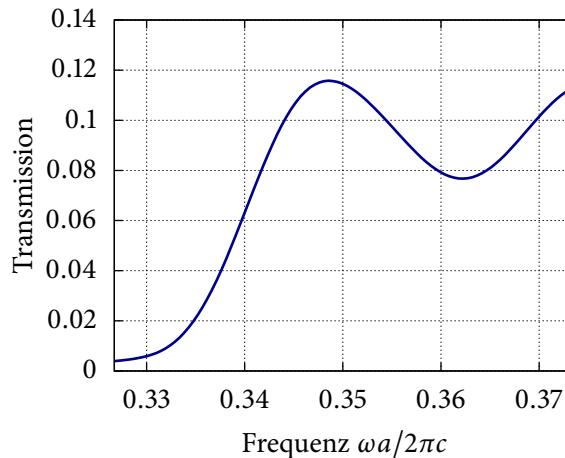


Abbildung 15: Transmission für die Auskopplung ohne Koppelstruktur innerhalb der photischen Bandlücke. Zwar gibt es eine Transmission die von 0 verschieden ist, diese ist im Vergleich zu der mit Koppler jedoch gering und die Feldverteilung (Abb. 16) zeigt die mangelnde Fokussierung.

Quelle wird wie zuvor ohne Löcher eine Normierungssimulation durchgeführt um den einfallenden Fluss zu bestimmen. In der Simulation mit Löchern (und eventuell Koppelerstruktur) befindet sich der Monitor in z -Richtung über dem Bereich, in dem die Auskopplung beobachtet werden soll. Dieser Monitor ist in x - und y -Richtung ausgedehnt und möglichst groß, um den gesamten nach oben gerichteten Fluss einzufangen. Bei der „Umlenkung“ der elektromagnetischen Strahlung muss darauf geachtet werden, welche Feldkomponente entscheidend ist. Im Wellenleiter (also in der xy -Ebene) werden die Moden mit einer E_y -Quelle angeregt, also eine Quelle die in y -Richtung Schwingungen des elektrischen Feldes anregt. Für die Ausbreitung in z -Richtung muss allerdings die H_x -Komponente betrachtet werden.

Für die **Einkopplung** ist die Vorgehensweise genau umgekehrt. Es wird mit einer H_x -Quelle angeregt, die in z -Richtung über der Koppelstruktur zentriert ist und die gesamte Koppelfläche abdeckt. Dieser Quelle wird eine Modulationsfunktion überlagert, sodass ein Gauß-Strahl entsteht. Damit wird der Situation einer Fokussierung des in der Praxis verwendeten Laserstrahls Rechnung getragen. Als Breite dieser Gauß-Modulation wurde der Radius des Kopplers gewählt. Bei der Normierungssimulation befindet sich der Monitor zwischen Quelle und Membran und fängt den gesamten Fluss auf. Die Simulation mit Löchern und Koppler wird dann mit einem Monitor am Ende des Wellenleiters, in den der Koppler mündet, durchgeführt.

Bei beiden Koppelverfahren kann die Güte des Kopplers dadurch bestimmt werden, dass die Transmissionswerte mit denen des Wellenleiters der gleichen Länge ohne Kopplung verglichen werden. Integriert man die Transmissionen dieser beiden Simulationen innerhalb der Bandlücke auf und bildet den Quotienten, erhält man eine Abschätzung für die *Kopplungseffizienz*.

3.4.2 Auskopplung ohne Koppelstruktur

Um die Notwendigkeit einer Koppelstruktur zu zeigen, wurde zunächst die Auskopplung ohne eine solche untersucht. Das hexagonale Gitter wurde also ab einer Position in x -Richtung unterbrochen (im Prinzip der Aufbau aus Abbildung 17 ohne die Koppelstruktur). Abbildung 15 zeigt die Transmission innerhalb der Bandlücke für diese Struktur. Es gibt zwar eine messbare Transmission, allerdings ist es wichtig die Feldverteilung mit zu betrachten! Wie in den kommenden Abschnitten gezeigt werden wird, sind die Transmissionswerte mit Koppler bis zu ca. 7 mal höher. Die Strahlung wird aber zusätzlich auch stärker fokussiert abgegeben. Das ist sehr wichtig, da man in der Praxis die Signale im Fernfeld betrachtet. Breitet sich die geringe transmittierte Strahlung ungefähr gleichverteilt in alle Raumrichtungen aus, sinkt die Intensität proportional zu $1/r^2$, also quadratisch mit dem Abstand. Die Feldverteilung der H_x -Komponente für einen yz -Schnitt ist in Abbildung 16 gezeigt:

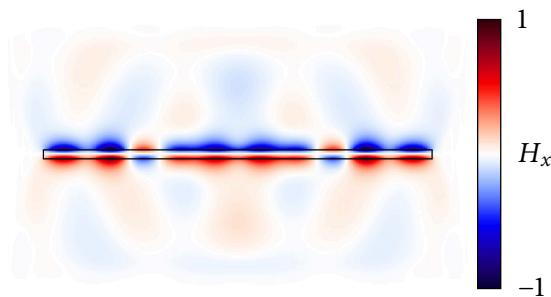


Abbildung 16: H_x -Komponente im yz -Schnitt bei der Auskopplung ohne Koppelstruktur.

Offenbar ist schon aus dieser Darstellung erkennbar, dass es keine ausgezeichnete Richtung für die Abstrahlung gibt. Die Felder sind stark in der Nähe oder innerhalb der Membran lokalisiert. Eine Fokussierung ist nicht erkennbar.

3.4.3 Grundlegende Koppler-Struktur

Die verwendete Koppler-Struktur taucht bereits in mehreren Artikeln auf. Sie ist unter anderem in [17] beschrieben und wird ebenfalls in [11] und [18] benutzt. Das Schema dieser Struktur in der xy -Ebene mit Wellenleiter ist in Abbildung 17 zu sehen. Die beiden ringförmigen Luflöcher des Kopplers haben eine Breite von $\lambda/2$ und sind somit auf eine bestimmte Wellenlänge bzw. Frequenz abgestimmt. Dafür wird in der Regel die Frequenz verwendet, bei der der Wellenleiter die beste Transmission besitzt. Der Abstand zwischen den beiden Ringen beträgt $\lambda/2n$, hängt also zusätzlich vom Brechungsindex des Materials ab. Der Koppler wirkt somit zunächst wie eine Antireflexionsschicht. Laut [17] erzeugt der Koppler destruktive Interferenz in Ausbreitungsrichtung und streut das Licht daher in z -Richtung. Der Radius des innersten Kreises beträgt zunächst $r_0 = (1/2)\sqrt{3}a - r$ und

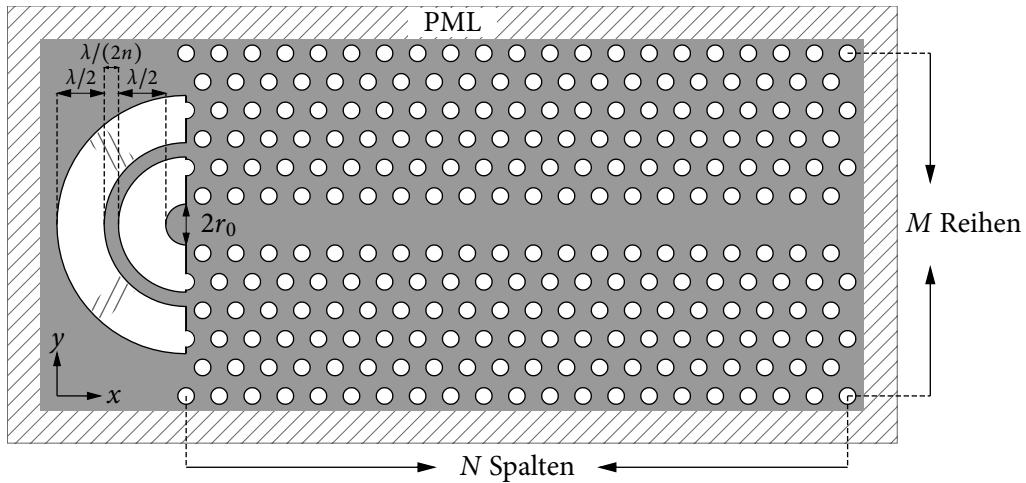


Abbildung 17: xy -Schnitt der gesamten simulierten Koppler-Struktur (Design des Kopplers gemäß [18]) ohne Träger. Die beiden Halbkreissegmente des Kopplers haben jeweils eine Breite von $\lambda/2$ und einen Abstand von $\lambda/2n$. In den schraffierten Bereichen im äußeren Ring des Kopplers sind bei der Produktion die Träger.

deckt somit die volle Breite des Wellenleiters ab. Die x -Position der Ringe ist in der Darstellung zunächst willkürlich so gewählt, dass die Löcher des Photonischen Kristalls, die den Koppler berühren, genau halbiert werden. Der Einfluss dieser beiden Parameter wird in Unterabschnitt 3.4.7 näher untersucht.

Da der äußere Ring, in der Form wie er in Abbildung 17 gezeigt ist, bei einer Produktion die Stabilität der Membran beeinflussen würde, sind in den genannten Artikeln *Träger* hinzugefügt (schraffierte Bereiche des äußeren Rings in Abb. 17). Konkret sind dies zwei radiale Unterbrechungen des äußeren Ringes, die ihn in drei Stücke teilen. Der Einfluss dieser Träger wird sowohl bei der Aus- als auch bei der Einkopplung mit betrachtet.

3.4.4 Auskopplung mit Kopplerstruktur

Für das System aus Abbildung 17 wurde zunächst die Auskopplung wie in Unterabschnitt 3.4.1 beschrieben simuliert. Der innere Radius r_0 und die x -Position wurden dabei zunächst nicht variiert. Allerdings wurde die selbe Simulation einmal mit Trägern und einmal ohne durchgeführt. Abbildung 18 zeigt die so gewonnenen Transmissionsspektren für Frequenzen innerhalb der Bandlücke. Im Vergleich zu Abbildung 15 wird zunächst deutlich, dass die Transmissionswerte um ca. Faktor 6 höher liegen. Der Kurvenverlauf ist dabei sehr ähnlich. Interessant ist wieder die zusätzliche Betrachtung der Feldverteilung, die in Abbildung 19 zu sehen ist. Im Gegensatz zur Feldverteilung ohne Koppler (Abb. 16) gibt es eine deutliche Abstrahlung in positiver und negativer z -Richtung – vermutlich eine Fokussierung. Die Felder sind stark außerhalb der Membran lokalisiert. Es kann demnach davon ausgegangen werden, dass es mit diesem Koppler möglich ist Signale deutlich besser über

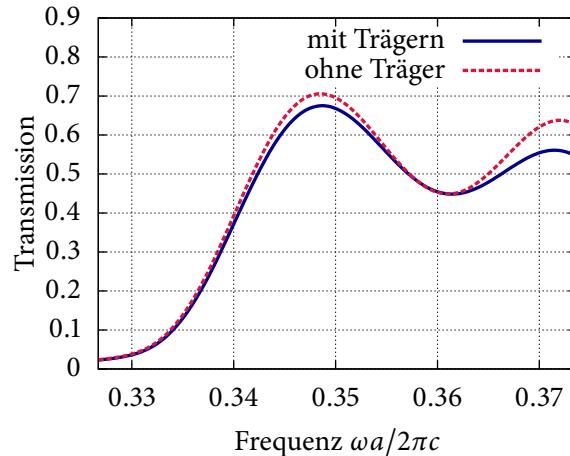


Abbildung 18: Vergleich der Transmissionswerte innerhalb der Bandlücke für den Koppler mit und ohne Träger bei der Auskopplung. Der Verlauf der Kurven ist qualitativ sehr ähnlich, ohne Träger sind die Transmissionswerte speziell im Bereich der lokalen Maxima jedoch besser.

der Membran zu messen. Um diese Vermutung zu untermauern müsste eine Fernfeldprojektion der Felddaten durchgeführt werden.

Des Weiteren zeigt Abb. 18 den Vergleich zwischen der Auskopplung mit und ohne Träger. Der qualitative Kurvenverlauf ist für beide Fälle sehr ähnlich. Bei den lokalen Maxima liefert der Koppler ohne Träger etwas bessere Werte, die jedoch maximal 12.7 % von denen mit Träger abweichen. Es kann demnach bei der Auskopplung nicht von einer signifikanten Beeinflussung der Koppelgüte durch die Träger gesprochen werden. Das Transmissionsmaximum liegt bei einem Frequenzwert von ca. $0.348 c/a$, wobei der Koppler auf die Frequenz $0.35 c/a$ eingestellt wurde. Die Werte stimmen somit näherungsweise überein. Die Abweichung kann erneut daraus resultieren, dass die Quelle aufgrund der unterschiedlichen Modendichte verglichen mit der Normierungssimulation nicht exakt gleich strahlt.

Integriert man die Transmissionswerte innerhalb der Bandlücke auf und teilt durch die ebenfalls integrierte Transmission für den reinen Wellenleiter gleicher Länge, erhält man eine Abschätzung für die Kopplungseffizienz. Dividiert man die Transmissionswerte für die einzelnen Frequenzen erhält man ein Effizienzspektrum. Folgende Tabelle zeigt die Ergebnisse für die Strukturen ohne und mit Koppler, sowie den Fall mit Trägern:

Struktur	Effizienzmaximum	Integr. Effizienz
ohne Koppler	7.4 %	3.6 %
mit Koppler, mit Trägern	39.4 %	20.7 %
mit Koppler, ohne Träger	41.1 %	21.8 %

Der Wert für die Simulation ohne Koppler ist nur der Vollständigkeit halber mit angegeben, da diese Struktur, wie bereits dargelegt, ohnehin keine Fokussierung aufweist. Die

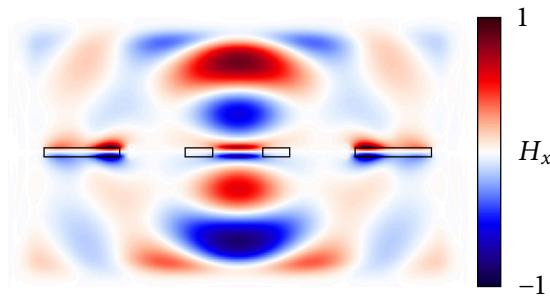


Abbildung 19: H_x -Komponente im yz -Schnitt bei der Auskopplung mit Koppelstruktur.

Maximalwerte des Effizienzspektrums sind ca. doppelt so hoch wie die integrierte Effizienz. Verwendet man eine schmalbandige Lichtquelle kann man demnach sehr hohe Kopplungsgüten erhalten. Mit Koppler gelingt es $1/5$ der Strahlung in $+z$ -Richtung umzulenken, als Maximalwert sogar $2/5$. Dabei muss bedacht werden, dass bei dieser symmetrischen Struktur der gleiche Anteil auch in $-z$ -Richtung abgestrahlt wird und der Koppler somit insgesamt über 40 % der Energie umleitet, im Maximum 80 %. Die Träger machen nur einen Verlust von rund 1 % aus. Vermutlich überwiegt der Vorteil der größeren Stabilität der Membran mit Trägern daher diesen Nachteil.

3.4.5 Halbierter Koppler

Um die Abstrahlung des Kopplers in positive z -Richtung zu verbessern, wurden die Simulationen mit einem „halbierter“ Koppler durchgeführt. Diese Idee basiert auf einem kreisförmigen Koppler der in [19] beschrieben wurde. Abbildung 20 (links) zeigt eine 3d-Skizze dieser Struktur. Bei der Herstellung würde man den Koppler nur bis zur Hälfte durchätzen.

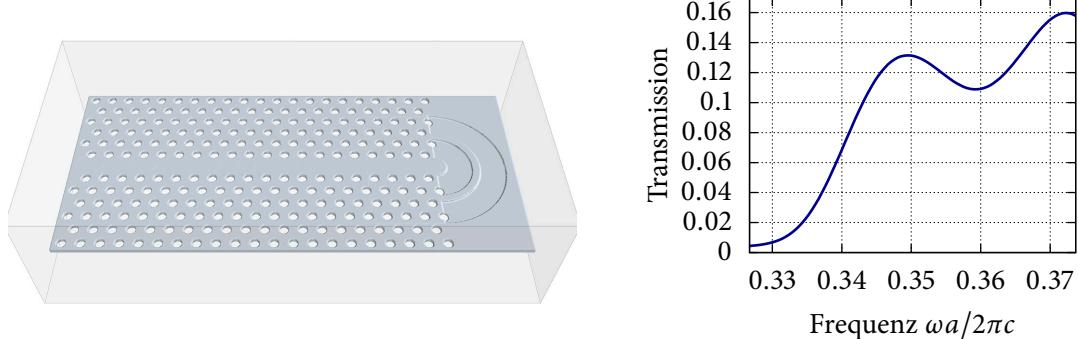


Abbildung 20: Links: 3d-Skizze des halbierten Kopplers. Rechts: Transmissionsspektrum für den halbierten Koppler für Frequenzen innerhalb der Bandlücke.

Es lag die Vermutung nahe, dass der Koppler bei diesem Design stärker gerichtet abstrahlt, um von den insgesamt ca. 40 % Transmission einen höheren Anteil in die gewünschte Richtung zu leiten.

Das in Abbildung 20 (rechts) gezeigte Transmissionsspektrum zeigt, dass sich die Vermutung nicht mit der Simulation deckt. Die Werte sind ähnlich schlecht wie bei der Struktur ohne Koppler und zeigen qualitativ wieder den bekannten Verlauf. Eine Auswertung mit einem Flussmonitor auf der nicht geätzten Seite der Struktur hat gezeigt, dass die Transmissionswerte in diese Richtung sogar besser sind. Ergebnisse, die mit dem voll durchgeätzten Koppler vergleichbar sind, ließen sich nicht erreichen. Um den Fluss stärker zu richten, müssen daher andere Ansätze gewählt werden.

3.4.6 Einkopplung mit und ohne Träger

Die Einkopplung in den Photonischen Kristall ist physikalisch fast der gleiche Vorgang wie die Auskopplung. Die Koppelstruktur aus Abbildung 17 sollte somit für die Einkopplung ebenfalls sehr gut geeignet sein. Speziell für die Laborarbeit ist es wichtig, Licht in die Struktur einzukoppeln. Oft ist es dabei am leichtesten von oben auf die Struktur zu leuchten.

Die Simulation läuft wie in Unterabschnitt 3.4.1 beschrieben ganz anders ab, als bei der Auskopplung. Abbildung 21 zeigt 6 Momentaufnahmen in der yz -Ebene die exakt durch die Mitte des Koplplers verlaufen (hier jedoch für die Normierungssimulation ohne Löcher und ohne Koppler).

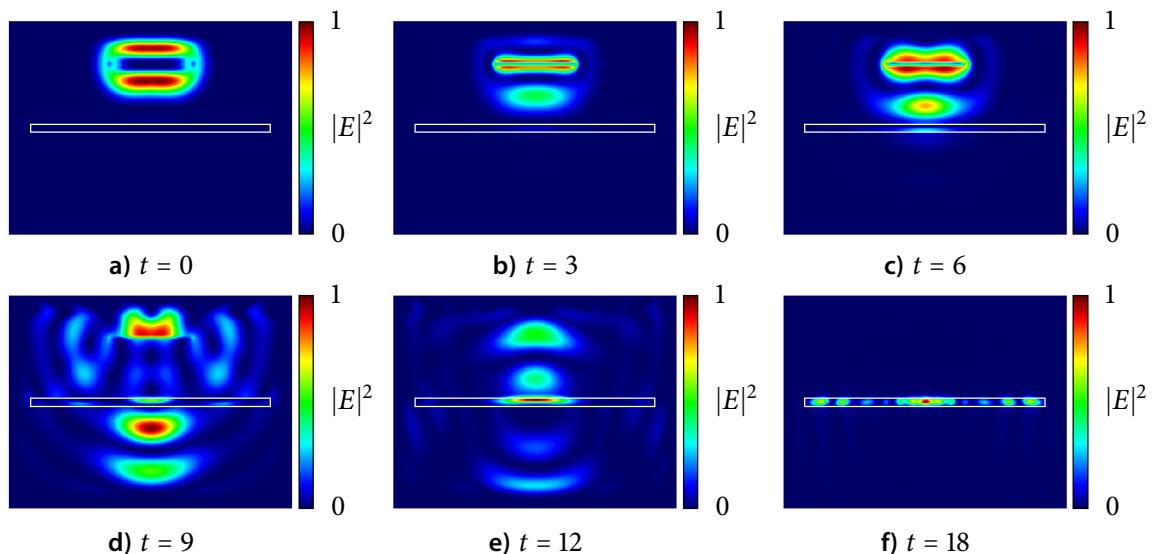


Abbildung 21: yz -Schnitt auf x -Höhe der Lichtquelle zu verschiedenen Zeiten t . Die Quelle befindet sich in z -Richtung über der Membran und strahlt auf sie ein. In den Bildern c) bis f) ist der Anstieg der Konzentration der Feldenergie innerhalb der Membran erkennbar.

Die Quelle hat einen Abstand von $3/(4f_c)$ von der Mitte der Membran, wobei f_c die Zentraleffizienz der Quelle ist. Dadurch befindet sich innerhalb der Membran ein Maximum der Feldenergie. Es ist deutlich erkennbar, dass sich die Wellen in negativer z -Richtung ausbreiten und ein Großteil der Membran passieren (Teilbild d)). Dennoch werden auch in diesem Fall Schwingungen innerhalb der Membran angeregt und somit eingekoppelt (Teilbild f)), deren Energie aber sehr klein ist. Die Abbildungen sind untereinander nicht farbnormiert, da man dann auf den Teilbildern a), b), e) und f) überhaupt keine Feldenergie sehen würde!

Bei der Untersuchung der Transmissionsspektren für den Koppler mit und ohne Träger konnten interessante Ergebnisse erzielt werden. Bei der Auskopplung waren die Werte mit Trägern speziell im Bereich der Maxima etwas geringer. In der gesamten Kopplungs effizienz innerhalb der Bandlücke äußerte sich dies in einem Unterschied von ca. 1 % (s. Unterabschn. 3.4.4 und Abb. 18). Die Transmissionsspektren für die Einkopplung sind in Abbildung 22 (links) dargestellt. Im Bereich des Maximums und bei niedrigeren Frequenzen sind die Transmissionsspektren nahezu identisch. Bei höheren Frequenzen liefert der Koppler mit Trägern dagegen sogar etwas bessere Werte. Folgende Tabelle stellt noch einmal alle Ergebnisse der Auskopplung mit denen für die Einkopplung zusammen:

Kopplungsart	Struktur	Effizienzmaximum	Integr. Effizienz
Auskopplung	ohne Koppler	7.4 %	3.6 %
	mit Koppler, mit Trägern	39.4 %	20.7 %
	mit Koppler, ohne Träger	41.1 %	21.8 %
Einkopplung	mit Koppler, mit Trägern	21.5 %	9.9 %
	mit Koppler, ohne Träger	20.9 %	9.7 %

Die Werte für die Effizienz beziehen sich wieder auf den Vergleich mit dem reinen Wellenleiter gleicher Länge. Es wird deutlich, dass der Koppler bei der Einkopplung, verglichen mit der Auskopplung, insgesamt nur etwa die Hälfte der Effizienz aufweist. Ein möglicher Grund dafür ist, dass bei der Einkopplung schon ein Großteil neben dem Wellenleiter vom Gitter zurückreflektiert wird. Eine Betrachtung der Feldenergie im zeitlichen Verlauf legt diesen Schluss nahe. Des Weiteren muss davon ausgegangen werden, dass es nicht möglich ist die identischen Moden im Koppler anzuregen, die bei der Auskopplung angeregt werden. Dafür müsste man zumindest mit zwei Quellen von beiden Seiten auf den Koppler strahlen, um die z -Symmetrie zu beachten.

Abbildung 22 (rechts) zeigt die Koppelgüten für den Koppler mit Trägern bei der Einkopplung in Abhängigkeit von der Frequenz. Um die Werte zu berechnen wurden jeweils die Transmissionswerte des Koplplers durch die des reinen Wellenleiters gleicher Länge dividiert. Der steile Anstieg am linken Rand der Bandlücke ist mit hoher Wahrscheinlichkeit ein numerisches Phänomen, da die Transmissionen in diesem Bereich sehr klein sind. Rechts davon gibt es einen relativ breiten Bereich von ca. $0.35 c/a$ in dem der Koppler Güten über 10 % aufweist. Regt man demnach schmalbandig an, kann man im kompletten Bandbereich gute Koppelgüten erreichen. Die Schwankungen der Güte kommen hier nur

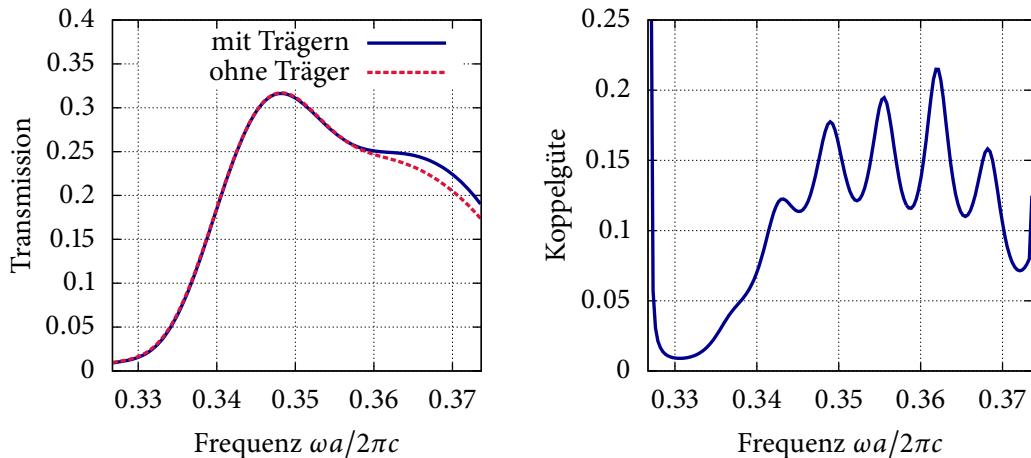


Abbildung 22: Links: Vergleich der Transmissionswerte innerhalb der Bandlücke für den Koppler mit und ohne Träger bei der Einkopplung. Ab einer Frequenz von ca. 0.358 zeigt der Koppler mit Trägern eine leicht bessere Transmission. Im Bereich darunter sind die Transmissionswerte nahezu identisch.
Rechts: Koppelgüte bei der Einkopplung in Abhängigkeit von der Frequenz innerhalb der Bandlücke. Der steile Anstieg am linken Rand ist sehr wahrscheinlich eine numerische Instabilität.

wegen den Schwankungen im Transmissionsspektrum des reinen Wellenleiters zustande, die ja wie bereits erwähnt, durch Reflexionen am PML erzeugt werden und keine physikalische Bedeutung haben. Diese numerischen Artefakte werden zwar im realen Experiment nicht zu beobachten sein, allerdings können auch dort ungewollte Reflexionen und Interferenzen eine Rolle spielen.

3.4.7 Modifikation des Koppler-Designs

Zuletzt soll nun der Einfluss der x -Position und des inneren Radius r_0 des Kopplers auf die Koppeleffizienz untersucht werden (zur näheren Beschreibung der Parameter s. Unterabschnitt 3.4.3). Diese wurden zunächst relativ willkürlich gewählt, sodass eine genauere Betrachtung sinnvoll ist.

Dafür wurden die Simulationen für die Einkopplung erneut mit Variation jeweils eines dieser Parameter durchgeführt. Die Transmissionswerte innerhalb der Bandlücke wurden dann integriert um einen Vergleich zwischen ihnen anstellen zu können. In Abbildung 23 sind die Ergebnisse dieser beiden Simulationsreihen dargestellt.

Im linken Teilbild wurde der Radius des innersten Kreises jeweils um einen Faktor variiert. Der Faktor 1 steht somit für die bisherige Struktur, für Faktor 0 ist der innere Ring nicht mehr vorhanden. Die Breite der beiden Ringe von $\lambda/2$ und ihr Abstand von $\lambda/2n$ blieben dabei unverändert. Der willkürlich gewählte Radius von $r_0 = (1/2)\sqrt{3}a - r$ lieferte offensichtlich bereits den besten Wert – jede Verkleinerung führt zu einer Verschlechterung der Transmission. Interessant ist jedoch, dass es anscheinend eine Periodizität gibt,

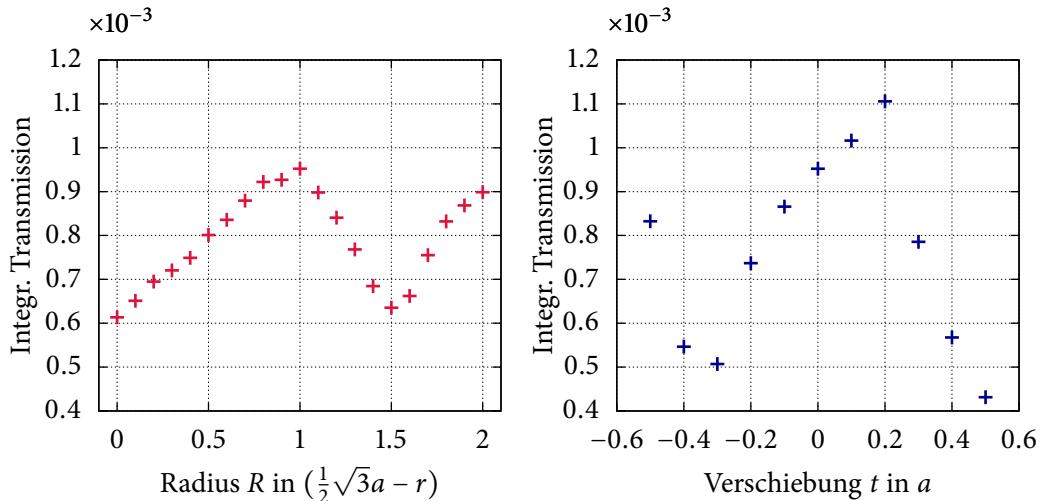


Abbildung 23: Links: Integrierte Transmissionswerte innerhalb der Bandlücke für eine Struktur mit Koppler in Abhängigkeit vom Radius des innersten Kreises. Dabei wurde durch $(\frac{1}{2}\sqrt{3}a - r)$ geteilt, sodass der Wert für 1 dem unveränderten Koppler aus Abbildung 17 entspricht. Eine Verkleinerung dieses Radius' führt demnach zu einer schlechteren Transmission.
Rechts: Gleiche Größe wie links, nur in Abhängigkeit von der Verschiebung der gesamten Kopplerstruktur in x -Richtung. Offenbar gibt es einen Wert, für den eine Verbesserung des Koplplers aus Abbildung 17 vorliegt (hier ca. $0.2a$).

da bei einer Vergrößerung dieses Radius nach einem Abfall der Transmission wieder ein Anstieg folgt. Bei dem doppelten Radius erreicht die Transmission wieder einen hohen Wert, der jedoch etwas niedriger liegt als der Wert für $r_0 = (1/2)\sqrt{3}a - r$.

Im rechten Teilbild wurde die x -Position jeweils um einen Wert t in Einheiten von a verschoben. In Abbildung 17 würde ein negativer Wert von t eine Verschiebung der Koppelstruktur nach links verursachen. Auch in diesem Fall gibt es scheinbar eine Periodizität, die in diesem Fall jedoch auch erwartet wurde, da das Gitter in x -Richtung periodisch ist. Diese ist aber natürlich nicht ganz perfekt, da die Struktur z.B. für den Wert $t = -0.5$ einen Abstand zum Gitter hat und für $t = +0.5$ in das Gitter hinein ragt. In diesem Fall war die willkürliche Wahl der x -Position nicht optimal. Der beste Wert wurde für eine Verschiebung von $t = +0.2$ erreicht, bei dem die integrierte Transmission ca. 16 % besser ist als für $t = 0$.

4 Schlussfolgerungen

Da, wie in der Einleitung erwähnt, ein Hauptschwerpunkt der Arbeit auf der Verwendung freier Software lag, sind nicht alle gewonnenen Erkenntnisse „neu“ (im Sinne von: zuvor nicht bekannt). Beispielsweise die Optimierung des L₃-Resonators durch die Verschiebung der Randlöcher wurde bereits häufig untersucht. Dennoch konnte auch bei den bekannten Ergebnissen dahingehend ein Fortschritt erzielt werden, dass zum Teil hohe Auflösungen, lange Simulationszeit und große Strukturen simuliert wurden, die den Zuwachs an heutiger verfügbarer Rechenleistung ausnutzen. Im Folgenden werden die Schlussfolgerungen detailliert auf die unterschiedlichen Gesichtspunkte der Arbeit bezogen.

4.1 Freie Software

Die Verwendung freier Software, die insbesondere unter der freien Software-Lizenz *GNU GPL* lizenziert und somit quelloffen ist, hat speziell in der Wissenschaft viele Vorteile. Neben der Möglichkeit den Programmcode selbst zu editieren bzw. an der Entwicklung aktiv teilzunehmen, spielt natürlich auch der Kosten-Faktor eine große Rolle. Möchte man ein kommerzielles Softwareprodukt z.B. allen Mitarbeitern einer Arbeitsgruppe zur Verfügung stellen, fallen jährlich hohe Kosten an. Entscheidet sich die Arbeitsgruppe daher nur einige wenige Rechner damit auszustatten, liegen die Nachteile auf der Hand. Ein freies Programm kann problemlos auf jedem Rechner installiert werden, ist auch bei Neuinstallation aufgrund der fehlenden Registrierungsschwierigkeiten leicht handhabbar und zudem immer auf dem neuesten Stand der Entwicklung.

Da es oft nur wenige quelloffene Programme für eine Simulationsart gibt, ist der Nutzerkreis zudem groß und sorgt somit für eine rege Beteiligung in Foren. Viele dieser Programme sind kaum schlechter dokumentiert, als ihre kommerziellen Pendants. Die große Anzahl an kommerziellen Programmen sorgt meist für einen überschaubaren Nutzerkreis und Kompatibilitätsprobleme beim Erfahrungsaustausch mit anderen Arbeitsgruppen. Mit den verwendeten Programmen wurden sowohl bezüglich der Funktionalität, als auch der Möglichkeit im Internet Hilfe zu finden, sehr gute Erfahrungen gemacht. Die Dokumentationen sind lückenlos und für den Einstieg stehen Tutorien zur Verfügung.

Ein Vorteil der kommerziellen Systeme kann lediglich in der grafischen Benutzeroberfläche und der oft vorhandenen Implementierung mehrerer numerischer Verfahren gesehen werden. Die freien Programme im Bereich der numerischen Elektrodynamik bleiben bisher skriptbasiert und bieten meist nur eine Lösungsmethode an, sodass bei Bedarf mehrere Programme installiert werden müssen.

4.2 L3-Resonator

Wie bereits dargelegt wurden bezüglich des L₃-Resonators keine neuen Erkenntnisse gewonnen. Er diente vielmehr der Einarbeitung in die verwendete Software. Nichtsdestotrotz wurde für die Verschiebung der Randlöcher eine Simulationsreihe durchgeführt, die eine höhere Präzision als in den zu diesem Zeitpunkt verfügbaren Veröffentlichungen aufweist. Diese 18 Simulationen liefen auf einem 4-Kern-Prozessor über eine Woche und die so erhaltenen Ergebnisse zeigen einen sehr glatten Verlauf. Das Maximum für die simulierte Struktur weist eine Steigerung des Q-Wertes um Faktor 10 auf fast 20 000 bei einer Verschiebung von $s = 0.217$. Es ist daher sinnvoll bei einer etwaigen Produktion diesen Wert auch zu wählen.

4.3 Wellenleiter

Beim W₁-Wellenleiter wurde vor Allem eine Abschätzung für die Dämpfung gewonnen, ohne diese jedoch zu optimieren. Trotz der Problematik bei der Normierung der Transmissionsspektren konnte diese durch eine Reihe von Simulationen zu $N_D = 0.93\%$ pro Gitterkonstante berechnet werden. Eine Abschätzung für die Unsicherheit dieser Angabe konnte allerdings nicht getroffen werden, sodass weitere Untersuchungen nötig wären. Interessant wäre natürlich eine reale Messung dieser Größe, auch wenn dabei natürlich noch mehr Einflussgrößen, wie z.B. Ungenauigkeiten bei der Produktion, eine Rolle spielen.

Der getroffene Vergleich dieser Größe mit einem kommerziellen Lichtleitkabel ist natürlich nicht ganz sinnvoll, da das Anwendungsgebiet eines Photonischen Kristall-Wellenleiters ein anderes ist. Es sollte lediglich eine Vergleichsgröße herangezogen werden. Bei der zukünftig denkbaren Anwendung eines W₁-Wellenleiters auf einem integrierten optischen Chip zum Beispiel, wäre der berechnete Dämpfungskoeffizient durchaus zufriedenstellend, da es ausreichen würde ein Signal über wenige Gitterkonstanten zu leiten.

Dennoch wäre es für eine Produktion nötig, im Vorfeld zu versuchen die Geometrie so zu verändern, dass eine Minimierung der Dämpfung erreicht wird. Dafür kann es sinnvoll sein, die Dämpfung in Abhängigkeit von der Breite des Wellenleiters zu bestimmen. Um diese Untersuchung durchzuführen wäre jedoch zunächst nötig, eine Methode für die Bestimmung dieser Dämpfung zu finden, die weniger rechenaufwendig ist und deren Unsicherheit sich besser abschätzen lässt. Auch für dieses Problem wäre eine zuverlässige Normierung der Transmissionsspektren hilfreich.

Des Weiteren wurde die Dämpfung nur im gesamten Bereich der photonischen Bandlücke untersucht. Diese kann jedoch für einen kleineren Frequenzbereich, z.B. im Bereich des Transmissionsmaximums des Wellenleiter, wesentlich geringer sein. Eine schmalbandigere Anregung würde in der Praxis keine Probleme bereiten. Weiterführende Untersuchungen was dies betrifft wären demnach ebenfalls sinnvoll.

4.4 Koppler

Die Untersuchungen bezüglich des Kopplers haben gezeigt, dass dieser in der Lage ist einen wesentlichen Anteil der Wellenenergie in z -Richtung umzuleiten. Bei der Auskopplung lag der Spitzenwert bei über 40 %, bei der Einkopplung bei über 20 %. Diese Werte lassen eine Signalübertragung aus der Struktur, bzw. eine Einkopplung von Energie in die Struktur bereits zu. Durch die Verschiebung des Kopplers in x -Richtung konnte noch zusätzlich eine Steigerung der Effizienz von rund 16 % erreicht werden. Eine Produktion dieser Struktur mit den optimierten Parametern wäre daher bereits sinnvoll, um eine reale Vergleichsmessung durchzuführen.

Natürlich ist eine weitere Steigerung der Effizienz durchaus denkbar, sodass auch zusätzliche Simulationen sinnvoll wären. Dabei muss aber bedacht werden, dass bei einer Struktur, die spiegelsymmetrisch gegenüber der xy -Ebene ist, das Maximum für die Abstrahlung der Energie in $+z$ -Richtung bei 50 % liegt. Aufgrund der Symmetrie wird der gleiche Anteil immer in $-z$ -Richtung emittiert. Mit dem halbierten Koppler (Unterabschnitt 3.4.5) wurde ein erster Versuch unternommen, die Abstrahlung besser zu richten. Die Ergebnisse für diese Struktur waren jedoch nicht befriedigend.

Es muss daher überlegt werden, wie sich diese Fokussierung in eine Raumrichtung verbessern lässt. Weiterführende Simulationen zu diesem Thema konnten aufgrund des begrenzten Zeitrahmens in dieser Arbeit nicht durchgeführt werden. Vor der Produktion einer solchen Kopplerstruktur wäre es jedoch sehr sinnvoll dahingehend noch Simulationen durchzuführen. Schließlich wären Effizienzen weit über 5 % so durchaus denkbar.

A Anhang

A.1 Verwendete Software und Arbeitsweise

Für die notwendigen numerischen Berechnungen dieser Arbeit wurden zwei freie Software-Pakete verwendet, die beide am Massachusetts Institute of Technology entwickelt wurden. Dies ist zum einen das Paket *MPB* (*MIT Photonic Bands*, siehe [8]), welches die Eigenmoden der MAXWELL-Gleichungen mit periodischen Randbedingungen nach der ebene Wellen-Methode berechnet. Mit diesem wurden Bandstrukturen für das hexagonale Gitter und die Feldverteilungen für verschiedene k -Punkte berechnet.

Der wesentliche Teil der Arbeit bestand jedoch darin, für viele unterschiedliche Strukturen die zeitliche Propagation der Felder mit Hilfe der FDTD-Methode zu simulieren, wofür ausschließlich das Paket *Meep* (*MIT Electromagnetic Equation Propagation*, siehe [20]) verwendet wurde. Sowohl Meep als auch MPB haben keine grafische Benutzeroberfläche, wie dies bei kommerziellen Programmen oft der Fall ist. Die Steuerung erfolgt über die Skriptsprache *Scheme* (die noch um einiges erweitert wurde) und setzt somit Programmierkenntnisse voraus. Für die Bestimmung von Q-Faktoren und Modenfrequenzen wurde zusätzlich das Paket *harminv* verwendet. Dieses löst das Problem der harmonischen Inversion und nutzt dabei eine Filter-Diagonalisierungsmethode, die in [21] beschrieben wird.

Da eine Vielzahl unterschiedlicher Strukturen simuliert werden musste, die jedoch alle auf der hexagonalen Gitterstruktur basieren, war es sinnvoll einen Satz nahezu vollständig parametrisierter Skripten zu entwickeln, die sich insbesondere weitestgehend über Kommandozeilen-Parameter steuern lassen. Im nächsten Abschnitt werden die dafür geschriebenen Grundskripten `crystal.ctl` und `functions.scm` konkret beschrieben. Alle Simulationen konnten fast ausschließlich mit diesen beiden zuvor entwickelten Skripten durchgeführt werden.

A.2 Programmbeschreibung

Im Folgenden werden die wichtigsten Parameter und Funktionen der beiden Grundskripten `crystal.ctl` und `functions.scm`, sowie die generelle Arbeitsweise dieser beschrieben. Dabei wird auf den konkreten Code weitestgehend verzichtet. Zusätzlich zu diesen beiden Skripten wurde noch das Skript `help.scm` geschrieben. Dieses tätigt einige Abfragen bezüglich der richtigen Eingabe der Parameter und bietet dem Nutzer eine Hilfefunktion in der die Variablen, Parameter und Funktionen kurz erklärt werden.

A.2.1 functions.scm

Die grundlegende Datei ist `functions.scm`, da in dieser alle selbst definierten Funktionen enthalten sind. Die Aufspaltung des gesamten Programms in zwei (bzw. drei) Dateien sollte vor Allem die Übersichtlichkeit erhöhen. Die folgende Tabelle listet die wichtigsten Funktionen auf und gibt eine kurze Erklärung:

Funktionsname	Erklärung
<code>make-slab</code>	Erzeugung einer dielektrischen (quaderförmigen) Membran im Zentrum der Berechnungszelle aus einem Material mit einem bestimmten Brechungsindex.
<code>make-coords</code>	Erzeugung einer Matrix, die als Einträge die Koordinaten der Löcher im $M \times N$ -hexagonalen Gitter hat. Die Löcher können dann über Indizes (i, j) referenziert werden.
<code>make-hex</code>	Erzeugung der Löcher in der Membran mit einem gegebenen Radius r an den Koordinaten, die durch die Matrix gegeben wird, die mit <code>make-coords</code> erzeugt wurde.
<code>make-hole/remove-hole</code>	Erzeugt bzw. entfernt ein Loch mit Radius r an einem Gitterpunkt (i, j) .
<code>make-wvg</code>	Erzeugt einen Wellenleiter (Reihe fehlender Löcher) bestimmter Länge, beginnend an einem Gitterpunkt (i, j)
<code>make-L3</code>	Erzeugt einen L ₃ -Resonator mit Zentrum (i, j) und Verschiebung der Randlöcher s .
<code>make-coupler</code>	Erzeugt die Kopplerstruktur aus Abb. 17 am linken Ende der Membran für eine bestimmte Lichtwellenlänge.
<code>make-carriers</code>	Erzeugt die Träger der Kopplerstruktur.
<code>make-source/make-beam</code>	Erzeugt eine Quelle (bzw. eine gauß-fokussierte Quelle) mit bestimmten Abmessungen an einer bestimmten Position innerhalb der Membran. Dabei wird des weiteren die mittlere Frequenz, die Frequenzbandbreite und bei <code>make-beam</code> die Breite der Gaussverteilung angegeben.
<code>make-sym</code>	Nutzt Symmetrie der Struktur in eine bestimmte Raumrichtung um die Simulationszeit zu verkürzen.

Die wichtigste dieser Funktionen ist `make-coords`, da die Erzeugung eines hexagonalen Gitters in Meep bisher problematisch war. Über den Umweg einer Koordinatenmatrix wird dies jedoch wesentlich vereinfacht. Nicht nur, dass mit nur einer Zeile ein Gitter beliebiger Größe erzeugt werden kann, sondern dass die Löcher zusätzlich noch referenziert werden können, bietet immense Vorteile. Eine Referenzierung eines erzeugten Objektes ist in Meep nicht implementiert, sodass z.B. ein erzeugter Zylinder nicht einfach wieder entfernt werden kann. Dieser muss mit einem identischen Zylinder an der selben Position und anderem Brechungsindex überschrieben werden. Durch die Referenzierung ist dies nun sehr

einfach und es können auch z.B. Löcher in einer Schleife entfernt werden, um etwa einen Wellenleiter zu erzeugen. Die weiteren Funktionen bauen fast alle auf diesem Vorteil auf.

Bei der Erzeugung des Kopplers muss natürlich neben der Lochstruktur zusätzlicher Platz erzeugt werden. Das geschieht allerdings direkt in `crystal.ctl`, in der durch eine Abfrage ob ein Koppler erzeugt wird, die Variable für die Länge der Membran in x -Richtung automatisch korrigiert wird. Die Funktionen für die Quellen- und Symmetrieerzeugung vereinfachen im Endeffekt nur die Schreibweise in `crystal.ctl`, bzw. machen es sehr einfach auch mehrere unterschiedliche Quellen in wenigen Zeilen zu erzeugen.

Neben den Funktionen ist der zweite wichtige Teil von `functions.scml` die Definition so genannter *running-types*. Diese führen die Simulation letztendlich durch, steuern die Ausgabe von Dateien und erzeugen Flussmonitore und Quellen. Dieses Vorgehen hat sich als äußerst nützlich erwiesen, da sich diese Parameter oft für ganze Simulationsreihen unterscheiden. Ein Beispiel ist die Aufnahme von Transmissionsspektren, bei der zuvor eine Normierungssimulation durchgeführt werden muss, die andere Positionen von Quelle und Flussmonitor erfordert. Da für die Ausführung der Programme meist noch ein zusätzliches Shell-Skript verwendet wurde, musste dort nur der Aufrufparameter für `run-type` auf die entsprechende Zahl gesetzt werden.

A.2.2 `crystal.ctl`

Die Datei `crystal.ctl` ist die eigentliche Arbeitsdatei. In dieser soll der Nutzer bei Bedarf Änderungen vornehmen und diese wird auch von Meep ausgeführt. Im Wesentlichen werden hier jedoch die zahlreichen Parameter für die Geometrie definiert. Dazu zählen die Dimensionalität der Struktur, die Lochanzahlen $M \times N$, die Dicke der Luftsicht um die Membran und des PML, sowie zahlreiche Parameter für die Erzeugung von Quellen, Resonatoren, Wellenleitern, des Kopplers, Symmetrien und viele mehr. Auf eine detaillierte Aufführung aller Parameter wurde abgesehen. Wichtig ist jedoch, dass das Programm `crystal.ctl` durch die Implementierung von `functions.scml` sehr klein und übersichtlich ist. Der folgende Programmcode zeigt diese Stärke am Beispiel der Erzeugung der Geometrie:

```
(set! geometry
      (make-slab xsize ysize zsize mat))
)
(if holes (begin
    (if coupler (make-coupler fcen n xsize rad zsize mat))
    (define coords (make-array #f M N))
    (make-coords M N coords (/ rcoupler 2))
    (make-hex M N rad zsize coords)
    (if wvg (make-wvg rad zsize wvg-i wvg-j wvg-len coords))
    (if cavity (make-L3 rad zsize cav-i cav-j s coords)))
)
)
```

In diesen (vom Prinzip her 9) Zeilen Code wird die Membran, die Löcher, ein Wellenleiter, ein Resonator und der Koppler erzeugt. Die gesamten Abmaße dieser Struktur sind para-

metrisiert und somit von der Kommandozeile steuerbar. Sogar ob überhaupt Löcher, der Resonator usw. erzeugt werden, ist steuerbar.

Durch diese Vorteile konnten neue Strukturen und Simulationsreihen ausnahmslos innerhalb weniger Minuten vorgenommen werden, sodass bei der Erstellung dieser Arbeit mehr Zeit in die physikalische Auseinandersetzung mit der Thematik investiert werden konnte.

Literatur

- [1] JOANNOPOULOS, John D. ; JOHNSON, Steven G. ; WINN, Joshua N. ; MEADE, Robert D.: *Photonic Crystals: Molding the Flow of Light.* 2. Edition. Princeton University Press, 2008 <http://ab-initio.mit.edu/book>
- [2] SALEH, B.E.A. ; TEICH, M.C.: *Grundlagen der Photonik.* 2. Edition. Wiley-VCH, 2008
- [3] KOPITZKI, Konrad ; HERZOG, Peter: *Einführung in die Festkörperphysik.* 6., überarbeitete Auflage. Vieweg+Teubner | GWV Fachverlage GmbH, 2009
- [4] SUKHOIVANOV, I.A. ; GURYEV, I.V.: *Photonic crystals: physics and practical modeling.* Bd. 152. Springer Verlag, 2009
- [5] HAKEN, H.: *Quantenfeldtheorie des Festkörpers.* 2., durchgesehene und erweiterte Auflage. Teubner, 1993
- [6] JACKSON, J.D. ; WITTE, C. ; MÜLLER, K.: *Klassische Elektrodynamik.* de Gruyter, 2006
- [7] INAN, U.S. ; MARSHALL, R.A.: *Numerical Electromagnetics: The FDTD Method.* Cambridge University Press, 2011
- [8] JOHNSON, Steven G. ; JOANNOPOULOS, J. D.: Block-iterative frequency-domain methods for Maxwell's equations in a planewave basis. In: *Opt. Express* 8 (2001), Nr. 3, 173–190. <http://www.opticsexpress.org/abstract.cfm?URI=OPEX-8-3-173>
- [9] FARJADPOUR, Ardavan ; ROUNDY, David ; RODRIGUEZ, Alejandro ; IBANESCU, Mihai ; BERMEL, Peter ; JOANNOPOULOS, J. D. ; JOHNSON, Steven G. ; BURR, Geoffrey: Improving accuracy by subpixel smoothing in FDTD. In: *Optics Letters* 31 (2006), October, 2972–2974. <http://www.opticsinfobase.org/abstract.cfm?URI=ol-31-20-2972>
- [10] NODA, S. ; TOMODA, K. ; YAMAMOTO, N. ; CHUTINAN, A.: Full three-dimensional photonic bandgap crystals at near-infrared wavelengths. In: *Science* 289 (2000), Nr. 5479, S. 604
- [11] RIVOIRE, K. ; BUCKLEY, S. ; HATAMI, F. ; VučKOVIĆ, J.: Second harmonic generation in GaP photonic crystal waveguides. In: *Applied Physics Letters* 98 (2011), S. 263113
- [12] CHALCRAFT, A.R.A. ; LAM, S. ; O'BRIEN, D. ; KRAUSS, T.F. ; SAHIN, M. ; SZYMANSKI, D. ; SANVITTO, D. ; OULTON, R. ; SKOLNICK, M.S. ; FOX, A.M. u. a.: Mode structure of the L₃ photonic crystal cavity. In: *Applied physics letters* 90 (2007), S. 241117

- [13] MAIN, J. ; MANDELSHTAM, V.A. ; TAYLOR, H.S.: Periodic orbit quantization by harmonic inversion of Gutzwiller's recurrence function. In: *Physical review letters* 79 (1997), Nr. 5, S. 825–828
- [14] BARTH, Michael: *Hybrid nanophotonic elements and sensing devices based on photonic crystal structures*, Humboldt-Universität zu Berlin, Mathematisch-Naturwissenschaftliche Fakultät I, Diss., 2010. \url{http://edoc.hu-berlin.de/docviews/abstract.php?id=36921}. – [Online: Stand 2011-07-24T11:43:50Z]
- [15] KHANKHOJE, UK ; KIM, SH ; RICHARDS, BC ; HENDRICKSON, J. ; SWEET, J. ; OLITZKY, JD ; KHITROVA, G. ; GIBBS, HM ; SCHERER, A.: Modelling and fabrication of GaAs photonic-crystal cavities for cavity quantum electrodynamics. In: *Nanotechnology* 21 (2010), S. 065202
- [16] STINGL, Johannes: *Theoretische und experimentelle Untersuchung der Kopplung von Emittern und Mikroresonatoren in photonischen Kristallen*, Humboldt-Universität zu Berlin, Mathematisch-Naturwissenschaftliche Fakultät I, Diplomarbeit, 2008
- [17] FARAON, A. ; FUSHMAN, I. ; ENGLUND, D. ; STOLTZ, N. ; PETROFF, P. ; VUČKOVIĆ, J.: Dipole induced transparency in waveguide coupled photonic crystal cavities. In: *IEEE Lasers and Electro-Optics Society, 2008. LEOS 2008. 21st Annual Meeting of the IEEE*, 2008, S. 622–623
- [18] FARAON, A. ; MAJUMDAR, A. ; ENGLUND, D. ; KIM, E. ; BAJCSY, M. ; VUČKOVIĆ, J.: Integrated quantum optical networks based on quantum dots and photonic crystals. In: *New Journal of Physics* 13 (2011), S. 055025
- [19] DAVANCO, M. ; RAKHER, MT ; SCHUH, D. ; BADOLATO, A. ; SRINIVASAN, K.: A circular dielectric grating for vertical extraction of single quantum dot emission. In: *Arxiv preprint arXiv:1104.0271* (2011)
- [20] OSKOOI, Ardavan F. ; ROUNDY, David ; IBANESCU, Mihai ; BERMEL, Peter ; JOANNOPOULOS, J. D. ; JOHNSON, Steven G.: MEEP: A flexible free-software package for electromagnetic simulations by the FDTD method. In: *Computer Physics Communications* 181 (2010), January, S. 687–702. <http://dx.doi.org/doi:10.1016/j.cpc.2009.11.008> – DOI doi:10.1016/j.cpc.2009.11.008
- [21] MANDELSHTAM, V.A. ; TAYLOR, H.S.: Harmonic inversion of time signals and its applications. In: *The Journal of chemical physics* 107 (1997), S. 6756

Danksagung

An dieser Stelle möchte ich zunächst Janik Wolters meinen besonderen Dank aussprechen. Ohne seine Ideen und sein mehrfaches, sehr ausführliches Lesen und Korrigieren, wäre diese Arbeit in dieser Form nicht möglich gewesen. Dabei hat er sich stets um eine entspannte, freundschaftliche Arbeitsatmosphäre bemüht, was ich sehr zu schätzen weiß. Auch Herrn Prof. Oliver Benson bin ich für die Aufnahme in die Arbeitsgruppe und für seine Geduld zu Dank verpflichtet. Die finanzielle Unterstützung in Form eines sehr modernen Rechners hat die Arbeit überhaupt erst ermöglicht.

Des Weiteren möchte ich meiner Freundin Yvonne Szag und ihrer ganzen Familie, für die Unterstützung, den Rückhalt und die Entlastung in dieser manchmal auch stressigen Zeit danken. Zuletzt sei meiner Mama und meinem Opa Rüdiger für die offenen Ohren, das Vertrauen und die finanzielle und moralische Unterstützung während des gesamten Studiums der Dank ausgesprochen.

Eigenständigkeitserklärung

Hiermit versichere ich, dass ich die vorliegende Arbeit selbständig verfasst und keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel verwendet habe.

Berlin, den 26. Oktober 2011

Carlo Barth