

Fakultät für Physik
Institut für
Theorie der Kondensierten Materie

PULSAUSBREITUNG IN
ZWEIDIMENSIONALEN PHOTONISCHEN
KRISTALLEN MIT
INTENSITÄTSABHÄNGIGER
NICHTLINEARITÄT

DIPLOMARBEIT
VON
MEIKEL FRANK



UNIVERSITÄT
KARLSRUHE (TH)

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Photonische Kristalle	5
2.1	Grundlagen	5
2.1.1	Wellengleichung im Photonischen Kristall	6
2.2	Bandstruktur	9
2.3	Daten aus der Bandstruktur	10
2.3.1	Entarteter Fall	13
2.3.2	Nichtentarteter Fall	16
2.3.3	Ergebnisse	16
3	Nichtlinearitäten	23
3.1	Grundlagen	23
3.2	χ^3 -Nichtlinearität	27
3.3	Multi-Skalen-Methode	30
4	Pulspropagation	39
4.1	Grundlagen	39
4.2	Einhüllende im Photonischen Kristall	44
4.2.1	Ordnung μ^1 :	47
4.2.2	Ordnung μ^2 :	47
4.2.3	Ordnung μ^3 :	51
5	Endliche Photonische Kristalle	57
5.1	Allgemeine Betrachtungen	57
5.2	In der Bandlücke nahe einer Bandkante	59
5.3	An der Bandkante	65
5.4	Im Band	66
5.5	Anschlussbedingungen	68
5.6	Gleichungssystem und Lösung	80
5.6.1	Frequenz ω in der Bandlücke nahe der Bandkante	81
5.6.2	Vergleich mit anderen Methoden	85
6	Zusammenfassung und Ausblick	91

A Gruppengeschwindigkeit	97
B Gruppengeschwindigkeitsdispersion	101
C Eindimensionaler Fall	103

Kapitel 1

Einleitung

Über die letzten 50 Jahre hat sich die Halbleiterphysik in jedem nur denkbaren Bereich der modernen Technologie fest etabliert. Dieser Siegeszug der Halbleiter ist vor allem darauf zurückzuführen, dass man die Eigenschaften der benutzten Materialien durch gezielte Manipulation (z.B. Dotierung) auf den jeweiligen Verwendungszweck zuschneiden konnte.

Forschungen haben nun gezeigt, dass Photonen auf ähnliche Weise manipuliert werden können wie Elektronen in Halbleitern. Ausgangspunkt dieser Forschungen waren die Arbeiten von Yablonovitch [1] und John [2]. Die grundlegende Idee war, Materialien zu entwickeln, deren Zweck mit "Halbleiter für Photonen" umschrieben werden kann. Man fand heraus, dass eine periodische Anordnung von Dielektrika mit einer Periodizität im Bereich der Wellenlänge des einfallenden Lichtes, die

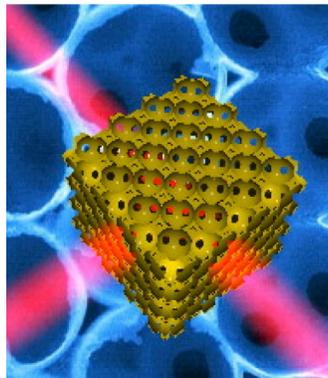


Abbildung 1.1: optischer Transistor

gewünschten Eigenschaften aufweist. Diese neuen Materialien wurden als "Photonische Kristalle" bezeichnet. Sie weisen in Analogie zu Halbleitern ("elektronische Kristalle") eine Bandstruktur für Photonen auf. Damit sind optische Bauelemente, wie z.B. ein optischer Transistor (dargestellt in Abbildung 1.1), denkbar. Die Anwendung von Photonischen Kristallen ist damit aber noch lange nicht erschöpft [3]. Durch den gezielten Einbau von Defekten sind Wellenleiter möglich (siehe Abbildung 1.2). Weiterhin können nicht-lineare Effekte miteinbezogen werden. Dadurch sind Summenfrequenzerzeugungen möglich. Man erlangt durch die Manipulationsmöglichkeiten in Photonischen Kristallen auch die Kontrolle über die spontane Emission, was für den sogenannten Random Laser verwendet werden kann. Diese vielfältigen

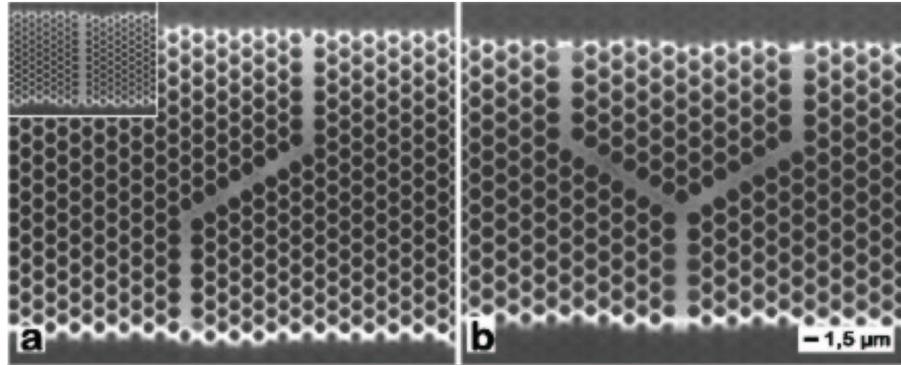


Abbildung 1.2: 2D Photonische Kristalle mit Defekten. (a) Wellenleiter (b) Wellensplitter

Möglichkeiten eröffnen den Photonischen Kristallen eine ähnlich glänzende Zukunft wie den elektronischen Halbleitermaterialien.

Aus der Fülle an Eigenschaften der Photonischen Kristalle beschäftigt sich die hier vorliegende Arbeit mit der *Pulsausbreitung in zweidimensionalen Photonischen Kristallen mit intensitätsabhängiger Nichtlinearität*. Die Pulsausbreitung ist von grundlegender Bedeutung um z.B. das Transmissionsverhalten verstehen zu können. Wir werden zeigen, dass zur Beschreibung der nichtlinearen Pulsausbreitung nur aus der Bandstruktur erchenbare Daten notwendig sind. Dazu ist allerdings eine störungstheoretische Betrachtung der Bandstruktur notwendig, welche teilweise schon in [4] veröffentlicht worden ist. Nach dieser Vorbetrachtung werden wir uns der nichtlinearen Wellengleichung zuwenden und sie mit Hilfe der Multi-Skalen-Methode behandeln. Diese Methode zur Lösung nichtlinearer Gleichungen ist in [5] ausführlich vorgestellt. Durch eine solche Betrachtung werden wir eine grundlegende Gleichung zur Beschreibung der Pulsausbreitung in photonischen Kristallen mit intensitätsabhängiger Nichtlinearität erhalten. Die Vorgehensweise zur Behandlung der nichtlinearen Pulsausbreitung orientiert sich an dem in [6] veröffentlichten eindimensionalen Fall. Wir werden die Gleichung dann für den linearen Fall diskutieren und auf das Transmissionsproblem anwenden. Die daraus erhaltenen Einsichten, ermöglichen es uns, ein sehr effizientes Programm zur Berechnung dieses Problems aufzustellen.

Aufbau:

Die vorliegende Arbeit ist wie folgt gegliedert:

In Kapitel 2 werden wir die Analogie zwischen den “elektronischen” und photonischen Kristallen aufzeigen. Dadurch sind wir in der Lage die Begriffe aus der Festkörperphysik, wie z.B. die Bandstruktur, einzuführen.

Optische Nichtlinearitäten werden in Kapitel 3 näher betrachtet. Es

wird anhand eines anschaulichen Beispiels erklärt, wie die Nichtlinearitäten zustande kommen und welche Effekte sie in dielektrischen Materialien bewirken. Ferner werden Methoden zur mathematischen Behandlung solcher nichtlinearen Gleichungen vorgestellt.

In Kapitel 4 wird dann die Ausbreitung von Pulsen genauer untersucht. Dabei werden wir feststellen, dass ein Puls als Produkt einer Trägerwelle und einer Einhüllenden beschrieben werden kann.

Das bereitgestellte Grundlagenwissen wird dann auf eine im unendlichen Photonischen Kristall laufende Welle angewendet. Es wird sich herausstellen, dass die Einhüllende dabei eine nichtlineare Schrödingergleichung erfüllt, für die die Trägerwelle effektive Parameter wie die Gruppengeschwindigkeit, Gruppengeschwindigkeitsdispersion und effektive Nichtlinearität liefert.

In Kapitel 5 wird der endliche Photonische Kristall behandelt. Es wird eine Methode zur Berechnung des Transmissionsproblems vorgestellt, die auf den zuvor hergeleiteten Erkenntnissen basiert. Diese Methode benutzt zur Beschreibung der Welle im Photonischen Kristall nur Daten aus der Bandstruktur. Diese Welle wird mit Hilfe von Anschlussbedingungen an die äusseren Wellenfelder angekoppelt. Das dadurch entstehende Gleichungssystem wird gelöst und die Ergebnisse werden präsentiert. Wir werden uns im Laufe des Kapitels zwar auf den linearen Fall beschränken, eine Erweiterung auf den nichtlinearen Fall ist jedoch mit etwas mehr Aufwand möglich.

Zum Schluss werden die wichtigsten Erkenntnisse dieser Arbeit zusammengefasst und Erweiterungsmöglichkeiten aufgezeigt.

Kapitel 2

Photonische Kristalle

In Unterkapitel 2.1 wird erklärt, was man unter einem Photonischen Kristall versteht. Es wird angeführt, dass dieser eine Bandstruktur für Photonen hat und es wird die Wellengleichung in einem solchen Kristall hergeleitet.

Im darauf folgenden Unterkapitel 2.2 wird aufgezeigt, wie die Bandstruktur eines Photonischen Kristalls berechnet wird.

In Unterkapitel 2.3 wird gezeigt, welche weiteren Informationen man aus der Bandstruktur gewinnen kann. Diese Informationen werden in den darauf folgenden Kapiteln benötigt.

2.1 Grundlagen

Bei Photonischen Kristallen handelt es sich um Materialien mit periodisch variierendem Brechungsindex. Es sind dabei dreidimensionale, zweidimensionale oder eindimensionale Strukturen möglich. Diese Strukturen sind in Abbildung (2.1) dargestellt. Eindimensionale Photonische Kristalle bestehen aus einer periodischen Abfolge von Ebenen aus dielektrischem Material. Bei zweidimensionalen Photonischen Kristallen hingegen sind beispielsweise Zylinder in Richtung der z -Achse periodisch in der xy -Ebene angeordnet. Die Zylinder besitzen dabei eine andere Dielektrizitätskonstante als das Medium, in das sie eingebettet sind. Im dreidimensionalen Fall sind es Kugeln statt Zylinder.

Die periodische Anordnung der Dielektrika ermöglicht uns die Einführung des aus der Festkörperphysik bekannten Raumgitters. Die Periodizität des Raumgitters ist bei Photonischen Kristallen in der Größenordnung der Wellenlänge der betrachteten elektromagnetischen Strahlung. Dies hat zur Folge, dass es zu Bragg-Streuungen an den Gitterebenen kommt. Durch die Fouriertransformation des Raumgitters erhält man das reziproke Gitter mit den reziproken Gittervektoren \vec{G} . Die primitive Einheitszelle des reziproken Gitters wird als Brillouinzone bezeichnet.

Im Gegensatz zu den “elektronischen” Kristallen aus der Festkörperphy-

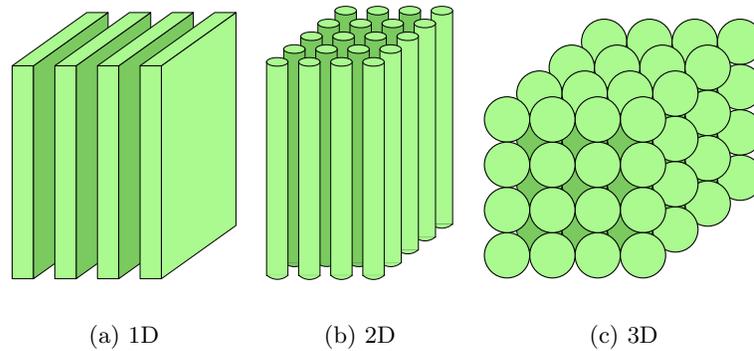


Abbildung 2.1: Mögliche Strukturen Photonischer Kristalle

sik sind hier die verschiedenen Dielektrizitätskonstanten für die Struktur des Raumgitters verantwortlich. Die Unterschiede in den Dielektrizitätskonstanten werden sich im Brechungsindex und somit auch bei der Transmission bzw. Reflektion von Wellenfeldern bemerkbar machen. Eine einfallende elektromagnetische Welle wird an den periodisch angeordneten Dielektrika aufgrund der unterschiedlichen Dielektrizitätskonstanten gestreut. In den “elektronischen” Kristallen sind es dagegen die Elektronen, welche am effektiven Kristallpotential gestreut werden. Wir wissen, dass es in “elektronischen” Kristallen eine Bandstruktur für Elektronen gibt. Die Vermutung liegt also nahe, dass in einem Photonischen Kristall ebenso eine Bandstruktur auftritt, welche allerdings für elektromagnetische Wellen gilt. Diese Vermutung wird im folgenden Abschnitt bestätigt werden. Die Bandstruktur wird uns Aufschluss darüber geben, welche Dispersionsrelation eine sich in einem Photonischen Kristall ausbreitende Welle erfüllen muss. Aus der Bandstruktur lassen sich jedoch noch weitere Daten entnehmen. Es wird später gezeigt, dass man z.B. auch die Gruppengeschwindigkeit eines in einem Photonischen Kristall laufenden Pulses aus ihr bestimmen kann.

2.1.1 Wellengleichung im Photonischen Kristall

Wir wollen zunächst die Wellengleichung für eine in einem Photonischen Kristall laufende Welle herleiten. Ausgangspunkt hierfür sind die Maxwell-

gleichungen im Medium

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{D} = \varrho \quad (2.1)$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0 \quad (2.2)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \quad (2.3)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{H} = \vec{j} + \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} . \quad (2.4)$$

Dabei ist \vec{D} die elektrische Verschiebungsdichte, \vec{B} die magnetische Induktion, \vec{H} das magnetische Feld und \vec{E} das elektrische Feld. Ferner werden die freien Ladungen ϱ im Medium und die Ströme \vec{j} mitberücksichtigt. Aus der Elektrodynamik ist bekannt, dass es in isotropen Medien eine Beziehung zwischen der Verschiebungsdichte \vec{D} und dem elektrischen Feld \vec{E} der Form

$$\vec{D} = \epsilon_0 \epsilon \vec{E} \quad (2.5)$$

gibt. Dabei ist ϵ die Dielektrizitätskonstante des Mediums. Für einen photonischen Kristall ist diese Dielektrizitätskonstante vom Ort \vec{r} abhängig, es gilt daher

$$\epsilon = \epsilon_p(\vec{r}) .$$

Der Index p soll signalisieren, dass die Dielektrizitätskonstante in unserem Fall periodisch variiert. Ebenso ist bekannt, dass es eine Beziehung zwischen dem magnetischen Feld \vec{H} und der magnetischen Induktion \vec{B} gibt. Es gilt für diese

$$\vec{B} = \mu_0 \mu \vec{H} , \quad (2.6)$$

wobei μ die Permeabilität des Mediums ist. Wir gehen davon aus, dass $\mu = 1$ gilt, wollen also nichtmagnetische Materialien betrachten. Ferner setzen wir voraus, dass keine freien Ladungen ($\varrho = 0$) existieren und keine Ströme ($\vec{j} = 0$) fließen. Damit vereinfachen sich die Maxwellgleichungen und die Beziehung zwischen \vec{H} und \vec{B} . Unter diesen Annahmen kann man nun die Rotation von Gleichung (2.3) bilden und mit Hilfe von Gleichungen (2.4) und (2.6) zu folgender Wellengleichung für das elektrische Feld gelangen

$$\vec{\nabla} \times \vec{\nabla} \times \vec{E}(\vec{r}, t) = -\frac{\epsilon_p(\vec{r})}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \vec{E}(\vec{r}, t) , \quad (2.7)$$

wobei $c = 1/\sqrt{\epsilon_0 \mu_0}$ die Lichtgeschwindigkeit im Vakuum ist. Die Wellengleichung für das magnetische Feld lässt sich auf ähnliche Weise herleiten. Man bildet dafür die Rotation von Gleichung (2.4) und ersetzt die rechte Seite durch Gleichung (2.3) mit (2.5). Für $\epsilon_p(\vec{r}) \neq 0$ folgt dann

$$\vec{\nabla} \times \frac{1}{\epsilon_p(\vec{r})} \vec{\nabla} \times \vec{H}(\vec{r}, t) = -\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \vec{H}(\vec{r}, t) . \quad (2.8)$$

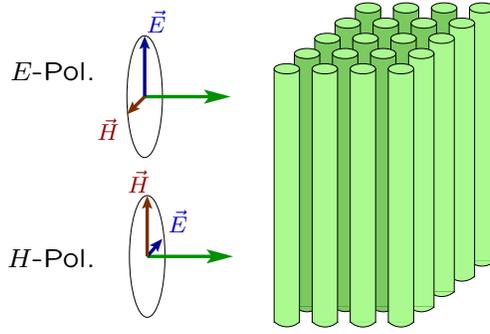


Abbildung 2.2: Mögliche Polarisationen für den 2D Photonischen Kristall

Die Gleichungen (2.7) und (2.8) sind im allgemeinen als Vektorproblem zu behandeln.

Wir beschränken uns in dieser Arbeit auf den zweidimensionalen Photonischen Kristall. Dies bedeutet, dass wir Zylinder in Richtung der z -Achse betrachten, welche periodisch in der xy -Ebene angeordnet sind. Der Wellenvektor des einfallende elektrische Feld soll senkrecht zur Zylinderachse stehen. In Abbildung (2.2) ist dies verdeutlicht. Offensichtlich bilden sich aufgrund der Homogenität von $\epsilon_p(\vec{r})$ in z -Richtung zwei entkoppelte Polarisationsrichtungen aus; die E-Polarisation, in welcher das E-Feld parallel zu den Zylinderachsen liegt und die H-Polarisation, bei der das H-Feld parallel zu den Zylinderachsen liegt. Wir betrachten in dieser Arbeit nur die E-Polarisation. Daher ist das elektrische Feld parallel zu den Zylinderachsen in Richtung der z -Achse, während \vec{r} in der xy -Ebene liegt. Unter Berücksichtigung von Gleichung (2.1) für $\varrho = 0$ gilt

$$\vec{\nabla} \times \vec{\nabla} \times \vec{E}(\vec{r}, t) = -\Delta \vec{E}(\vec{r}, t) .$$

Die Richtung des elektrischen Feldes ist nun allerdings durch die Zylinderachsen festgelegt. Die Wellengleichung in einem zweidimensionalen Photonischen Kristall für die E-Polarisation kann daher skalar geschrieben werden

$$\Delta E(\vec{r}, t) - \frac{\epsilon_p(\vec{r})}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} E(\vec{r}, t) = 0 ,$$

wobei $E(\vec{r}, t)$ parallel zur z -Achse liegt. Zur Berechnung der Eigenmoden verwenden wir einen Separationsansatz, welcher einen harmonischen zeitabhängigen Teil vom ortsabhängigen Anteil trennt

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

Durch Einsetzen erhalten wir eine Eigenwertgleichung der Form

$$\Delta E(\vec{r}) + \frac{\omega^2}{c^2} \epsilon_p(\vec{r}) E(\vec{r}) = 0 \quad (2.9)$$

Diese Gleichung stellt ein verallgemeinertes Eigenwertproblem mit dem Eigenwert ω^2/c^2 für das elektrische Wellenfeld $E(\vec{r})$ dar. Das Lösen dieses Eigenwertproblems unter geeigneten Randbedingungen wird uns auf die Bandstruktur des Photonischen Kristalls führen.

2.2 Bandstruktur

In diesem Abschnitt wird die zuvor hergeleitete Gleichung (2.9) genauer betrachtet und der Lösungsweg aufgezeigt. Aufgrund der Periodizität der Dielektrizitätskonstanten $\epsilon_p(\vec{r})$ können wir das Blochtheorem anwenden, welches besagt, dass die Lösungsfunktion bis auf einen Phasenfaktor gitterperiodisch sein muss. Dies bedeutet, dass der Wellenvektor \vec{k} auf eine Brillouinzone beschränkt werden kann. Die Dispersionsrelation wird damit auf die erste Brillouinzone zurückgefaltet. Dies hat zur Folge, dass einem Wellenvektor \vec{k} verschiedene Frequenzen $\omega_{m\vec{k}}$ zugeordnet werden. Diese Frequenzen werden daher mit dem sogenannten Bandindex m versehen, welcher die verschiedenen Lösungen numeriert. Diese Numerierung muss dann auch in den Eigenfunktionen verwendet werden. Wir setzen daher an

$$E_{m\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}} u_{m\vec{k}}(\vec{r}) .$$

Dabei ist $u_{m\vec{k}}(\vec{r})$ die gitterperiodische Funktion. Der Bandindex m numeriert die verschiedenen Bänder, während \vec{k} den Wellenvektor darstellt. Man bezeichnet die Lösungsfunktion $E_{m\vec{k}}(\vec{r})$ unter den Blochbedingungen als Blochwellen. Das Einsetzen dieses Theorems in Gleichung (2.9) ergibt

$$\left[\hat{H}(\vec{k}) + \frac{\epsilon_p(\vec{r})}{c^2} \omega_{m\vec{k}}^2 \right] u_{m\vec{k}}(\vec{r}) = 0 , \quad (2.10)$$

wobei

$$\hat{H}(\vec{k}) = \Delta + 2i \vec{k} \cdot \vec{\nabla} - \vec{k}^2$$

gesetzt wurde. Offensichtlich ist diese Gleichung ein verallgemeinertes Eigenwertproblem, wobei $u_{m\vec{k}}$ die Eigenfunktion und $\omega_{m\vec{k}}^2/c^2$ der Eigenwert ist. Der Wellenvektor \vec{k} muss dabei als Parameter betrachtet werden. Berechnet man die zu einem \vec{k} gehörenden Eigenwerte und Eigenfunktionen, so bilden die Eigenfunktionen $u_{m\vec{k}}(\vec{r})$ eine vollständige Orthonormalbasis. Man geht nun davon aus, dass es zur Darstellung der wesentlichen Eigenschaften der Bandstruktur eines Photonischen Kristalles wie z.B. Bandlücken und Entartungen ausreicht die Bandstruktur entlang bestimmter Hochsymmetrielinien in der Brillouinzone zu berechnen. Dabei setzt man voraus, dass zwischen diesen Hochsymmetrielinien keine Extrema der Bandstruktur liegen, sie also glatt verläuft. Bei der Berechnung der Zustandsdichte reicht es dagegen nicht aus, sich auf die Symmetrielinien zu beschränken, daher muss man über alle \vec{k} der ersten Brillouinzone integrieren. Die Hochsymmetrieachsen, auf welche

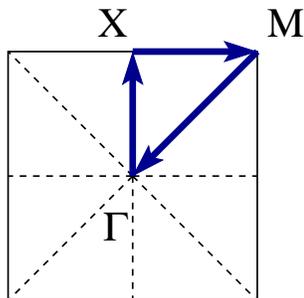


Abbildung 2.3: Bild der Brillouinzone eines Quadratgitters

man sich bei der Berechnung der Bandstruktur beschränkt, verbinden die Hochsymmetriepunkte. In Abbildung (2.2) sind die Hochsymmetrieachsen und die Hochsymmetriepunkte Γ , X und M für die Brillouinzone des Quadratgitters dargestellt. Zur Berechnung der Bandstruktur wählt man daher die Wellenvektoren auf den Hochsymmetrieachsen und berechnet für diese die Eigenfunktionen und Eigenwerte. Aus den Eigenwerten kann man dann die Frequenz $\omega_{m\vec{k}}$ der mit \vec{k} laufenden Welle bestimmen, also die Dispersionsrelation aufstellen. Trägt man nun $\omega_{m\vec{k}}$ über \vec{k} auf, so erhält man die sogenannte Bandstruktur. Ein Beispiel für eine Bandstruktur für ein Quadratgitter mit Seitenlänge a aus Stäben mit Radius $r = 0,45a$ und der Dielektrizitätskonstante $\epsilon = 13$ in Luft ist in Abbildung (2.2) dargestellt. Aus dieser Abbildung ist ersichtlich, dass sich die Bänder kreuzen oder berühren können. Diese Besonderheit der sogenannten entarteten Bänder wird bei der nachfolgenden Betrachtung noch einmal aufgegriffen. Auch Bandlücken sind in dieser Abbildung zu sehen. Auf einer Hauptsymmetrieachse entstehen Bandlücken dadurch, dass Frequenzen in einem Frequenzbereich keinem \vec{k} auf dieser Hauptsymmetrieachse zugeordnet werden können. Dies bedeutet, dass Wellen in Richtung dieser Hauptsymmetrieachse mit den Frequenzen, welche in der Bandlücke liegen, nicht angeregt werden können. Ein Beispiel für eine solche Bandlücke ist zwischen dem ersten und zweiten Band am X -Punkt zu sehen. Sie liegt allerdings nur auf der Hauptsymmetrieachse von ΓX . Diese Bandlücke ist in Abbildung (2.2) schraffiert dargestellt. Eine Beschreibung der einzelnen Methoden zur Berechnung der Bandstruktur ist in [7] und [8] zu finden.

2.3 Daten aus der Bandstruktur

Später, in Kapitel 4, wird hergeleitet, dass für die Beschreibung eines Pulses im Kristall die Gruppengeschwindigkeit und die Gruppengeschwindigkeitsdispersion nützliche Größen sind. Die Gruppengeschwindigkeit ist dabei

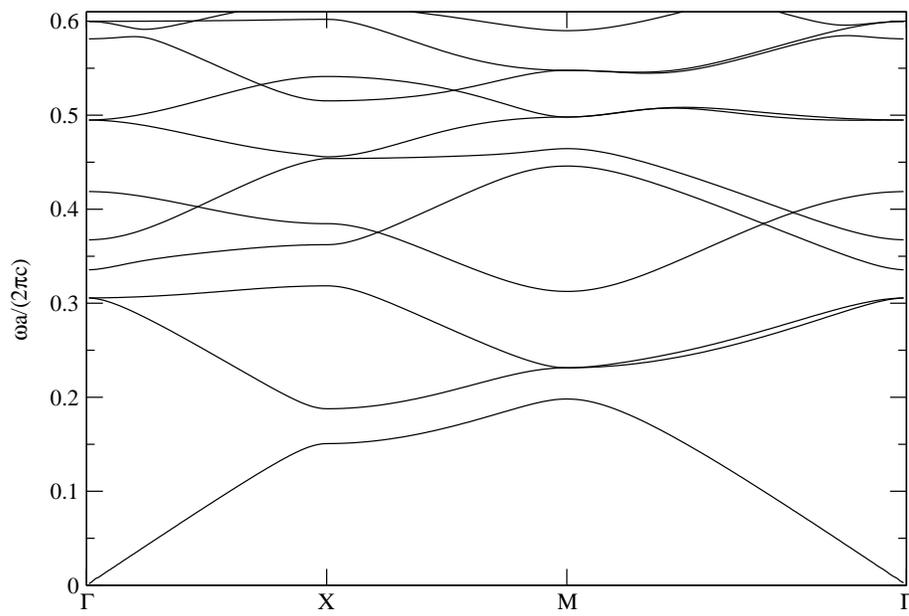
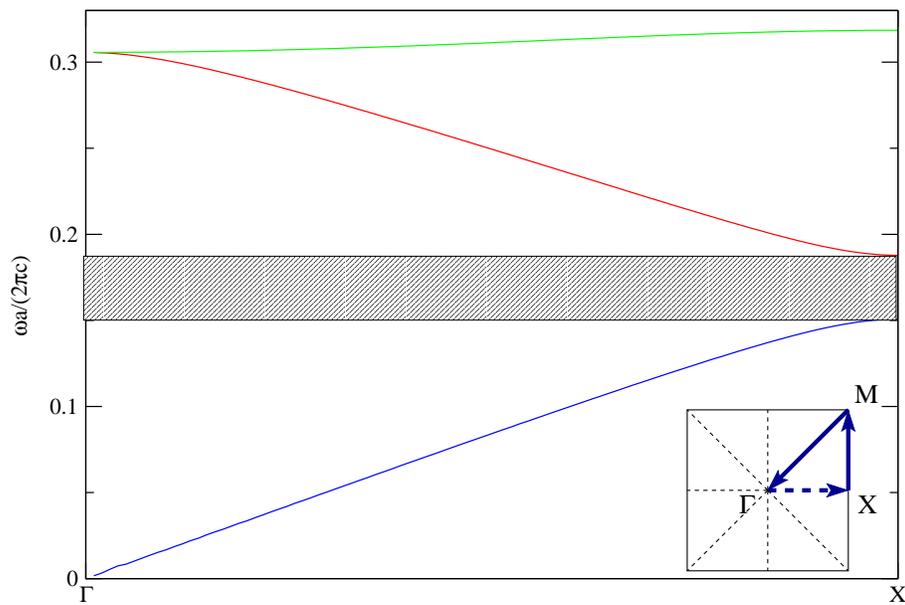


Abbildung 2.4: Bandstruktur eines Quadratgitters

Abbildung 2.5: Bandlücke zwischen dem ersten(blau) und zweiten(rot) Band in ΓX -Richtung

gegeben durch

$$\vec{v}_{m\vec{k}} = \vec{\nabla}_{\vec{k}} \omega_m(\vec{k}) .$$

Sie repräsentiert die Steigung der Bandstruktur an einem bestimmten \vec{k} -Wert. Die Gruppengeschwindigkeitsdispersion ist durch

$$M_{m\vec{k}}^{(ij)} = \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial k_i \partial k_j} \omega_m(\vec{k})$$

gegeben. Daher kann man aus ihr die Krümmung der Bandstruktur ablesen. Im zweidimensionalen Fall ist die Gruppengeschwindigkeit offensichtlich ein Vektor und die Gruppengeschwindigkeitsdispersion eine 2×2 -Matrix. Somit lautet die Taylorreihenentwicklung von ω um \vec{k} mit $|\vec{q}| \ll 1$ also

$$\omega_{\vec{k}+\vec{q}} = \omega_{\vec{k}} + \vec{q} \cdot \vec{v}_{\vec{k}} + \vec{q} \cdot \overleftrightarrow{M}_{\vec{k}} \cdot \vec{q} .$$

Um nun die Gruppengeschwindigkeit und Gruppengeschwindigkeitsdispersion aus der Bandstruktur zu berechnen, bedient man sich der sogenannten kp -Störungstheorie. Diese beruht darauf, dass man einen Verschiebungsvektor \vec{q} mit $|\vec{q}| \ll \pi/a$ zu dem betrachteten \vec{k} addiert. Eingesetzt in Gleichung 2.10 folgt

$$\left[\Delta + 2i(\vec{k} + \vec{q}) \cdot \vec{\nabla} - (\vec{k} + \vec{q})^2 + \frac{\epsilon_p(\vec{r})}{c^2} \omega_{\vec{k}+\vec{q}} \right] u_{\vec{k}+\vec{q}} = 0 .$$

Mit der Definition von $\hat{H}(\vec{k})$ aus dem vorherigen Abschnitt erhält man daraus

$$\left[\hat{H}(\vec{k}) - 2 \vec{q} \cdot \hat{\Omega}(\vec{k}) - \vec{q}^2 + \frac{\epsilon_p(\vec{r})}{c^2} \omega_{\vec{k}+\vec{q}} \right] u_{\vec{k}+\vec{q}} = 0 , \quad (2.11)$$

wobei

$$\hat{\Omega}(\vec{k}) = -i \left(\nabla + i\vec{k} \right)$$

gesetzt wurde. Da $|\vec{q}| \ll \pi/a$ ist eine störungstheoretische Betrachtung von (2.11) möglich

$$\omega_{\vec{k}+\vec{q}} = \omega_{\vec{k}} + 1. \text{ Ordnung} + 2. \text{ Ordnung} + \dots .$$

Durch Vergleich mit der Taylorreihe folgt:

- $\vec{v}_{\vec{k}}$ aus Störungsrechnung 1. Ordnung in \vec{q}
- $\overleftrightarrow{M}_{\vec{k}}$ aus Störungsrechnung 2. Ordnung in \vec{q} .

2.3.1 Entarteter Fall

Wie im Bild der Bandstruktur (2.2) ersichtlich ist, können sich Bänder kreuzen oder berühren. Dies bedeutet, dass für einen festen Wert von \vec{k} mehrere gleiche Eigenwerte $\omega_{m\vec{k}}$ existieren. Die dazugehörigen Eigenfunktionen $u_{m\vec{k}}$ bilden dann einen sogenannten Unterraum. Wir wollen im Folgenden davon ausgehen, dass der Eigenwert $\omega_{m\vec{k}}$ g -fach entartet ist. Dies bedeutet, dass die Eigenwerte $\omega_{m\vec{k}}$ bis $\omega_{m+g-1\vec{k}}$ den gleichen Wert haben. Die Eigenfunktionen $u_{m\vec{k}}$ bis u_{m+g-1} bilden dann die vollständig orthonormierte Basis des Unterraums. Wie aus der Quantenmechanik bekannt ist, kann jede Funktion des Unterraums durch eine Linearkombination der Basisfunktionen gebildet werden. Betrachten wir hierzu ein Beispiel aus der Vektorrechnung

$$\vec{a} = g_1 \hat{e}_1 + g_2 \hat{e}_2 + g_3 \hat{e}_3 = \sum_{i=1}^3 g_i \hat{e}_i .$$

Der Vektor \vec{a} wird durch eine Linearkombination der orthonormierten Basisvektoren \hat{e}_1 , \hat{e}_2 und \hat{e}_3 gebildet. Dabei gibt g_i die Gewichtung des i -ten Basisvektors an. Mann nennt g_i daher auch Gewichtungsfaktor. Durch eine solche Vorschrift kann man alle Vektoren des Raumes generieren, der durch die Basisvektoren aufgespannt wird. Es ist auch ein Basiswechsel möglich. Dazu muss man neue orthonormierte Basisvektoren finden, welche die obige Vorschrift erfüllen.

Nach dieser Vorbetrachtung wenden wir uns nun dem Problem der entarteten Störungsrechnung zu. Dazu wird eine an die Bra-Ket Schreibweise der Quantenmechanik angelehnte Notation eingeführt

$$u_{m\vec{k}}(\vec{r}) = |m\vec{k}\rangle .$$

Somit lautet die Normierungsbedingung folgendermassen

$$\langle m\vec{k} | \epsilon(\vec{r}) | n\vec{k} \rangle = \delta_{mn} .$$

Zu beachten ist jedoch, dass nun

$$\langle m\vec{k} | n\vec{k} \rangle := \int_{\text{WSC}} d\vec{r} u_{m\vec{k}}(\vec{r})^* u_{n\vec{k}}(\vec{r}) \neq \delta_{nm}$$

gilt.

Eine neue Basisfunktion des g -fach entarteten Unterraumes hat die Gestalt

$$|a, m\vec{k}\rangle = \sum_{n=m}^{m+(g-1)} \underbrace{G_n^{(a)}}_{\text{Gewichtungsfaktor}} |n\vec{k}\rangle .$$

Dabei ist n der Bandindex der entarteten Bänder. Er läuft also vom ersten der kreuzenden Bänder mit dem Bandindex m bis zum letzten mit dem Bandindex $m + (g - 1)$.

Ziel der Störungsrechnung ist es nun, herauszufinden, wie diese entarteten Bänder in eine bestimmte Betrachtungsrichtung \vec{q} aufspalten. Im entarteten Unterraum kann man, wie oben gezeigt, die Basisfunktionen frei wählen. Um die Aufspaltung in eine Betrachtungsrichtung zu erhalten, benötigt man somit die Funktionen als Basis, die auch in diese Betrachtungsrichtung aufspalten. Die Entwicklung einer solchen neuen Basisfunktion in die Betrachtungsrichtung \vec{q} lautet nun

$$\left| a, m\vec{k} + \vec{q} \right\rangle = \left| a, m\vec{k} \right\rangle + \sum_{l \neq n} \vec{q} \cdot \vec{A}_{l\vec{k}}^{(a)} \left| l\vec{k} \right\rangle .$$

Die Summe läuft dabei über alle Bänder, die nicht im entarteten Unterraum $m \leq n \leq m + g - 1$ liegen.

1. Störungsrechnung erster Ordnung in \vec{q} :

In erster Ordnung setzt man für die Basisfunktion in Betrachtungsrichtung an

$$\left| a, m\vec{k} + \vec{q} \right\rangle = \left| a, m\vec{k} \right\rangle + \sum_{l \neq n} \vec{q} \cdot \vec{A}_{l\vec{k}}^{(a)} \left| l\vec{k} \right\rangle .$$

Für die Eigenfrequenz in Betrachtungsrichtung gilt

$$\omega_{m\vec{k} + \vec{q}}^{(a)} = \omega_{m\vec{k}} + \vec{q} \cdot \vec{v}_{m\vec{k}}^{(a)} ,$$

wobei die Eigenfrequenz an der entarteten Stelle durch $\omega_{m\vec{k}}$ gegeben ist. Die Gruppengeschwindigkeit hängt dabei auch von der jeweils betrachteten Basisfunktion $\left| a, m\vec{k} \right\rangle$ ab. Dies wird in Gleichung (2.11) eingesetzt und man erhält

$$\begin{aligned} 0 &= \left(\hat{H}(\vec{k}) + \frac{\epsilon_p(\vec{r})}{c^2} \omega_{m\vec{k}}^2 \right) \sum_{l \neq n} \vec{q} \cdot \vec{A}_{l\vec{k}}^{(a)} \left| l\vec{k} \right\rangle \\ &+ \left(-2\vec{q} \cdot \hat{\Omega}(\vec{k}) + 2\vec{q} \cdot \vec{v}_{m\vec{k}}^{(a)} \frac{\epsilon_p(\vec{r})}{c^2} \omega_{m\vec{k}} \right) \left| a, m\vec{k} \right\rangle . \end{aligned}$$

Diese Gleichung wird nun auf eine der g linear unabhängigen Basisfunktionen $\left| b, m\vec{k} \right\rangle$ projiziert. Aufgrund der Normierungsbedingung entfällt dann der Term mit $\vec{A}_{l\vec{k}}^{(a)}$. Dadurch erhält man einen Ausdruck für die Gruppengeschwindigkeit

$$\vec{v}_{m\vec{k}}^{(a)} = \frac{c^2}{\omega_{m\vec{k}}} \left(b, m\vec{k} \left| \hat{\Omega}(\vec{k}) \right| a, m\vec{k} \right) \delta_{ab} . \quad (2.12)$$

Dieses Ergebnis ist nicht verwunderlich. Da die neuen Basisfunktionen orthogonal zueinander stehen müssen, hat man nur eine Geschwindigkeitskomponente, wenn auf die betrachtete Richtung projiziert wird. Das Ergebnis lässt sich leicht auf den nichtentarteten Fall übertragen (siehe folgendes Kapitel).

Zur numerischen Berechnung der Gruppengeschwindigkeit stellt man eine Matrixgleichung auf, in der die Geschwindigkeitskomponenten als Eigenwerte und die Gewichtungsfaktoren als Eigenvektoren vorkommen. Das genaue Verfahren zur numerische Berechnung der Gruppengeschwindigkeit aus der Bandstruktur wird in Anhang A geschildert.

Das Projizieren auf eine nicht im Unterraum liegende Funktion $|L\vec{k}\rangle$ ergibt den Ausdruck

$$\vec{A}_{L\vec{k}}^{(a)} = \frac{2c^2}{\omega_{m\vec{k}}^2 - \omega_{L\vec{k}}} \langle L\vec{k} | \hat{\Omega}(\vec{k}) | a, m\vec{k} \rangle . \quad (2.13)$$

Dieser wird in der folgenden Rechnung zur Gruppengeschwindigkeitsdispersion noch eine Rolle spielen.

2. Störungsrechnung zweiter Ordnung in \vec{q} :

In der zweiten Ordnung setzt man für die Basisfunktion in Beobachtungsrichtung \vec{q} an

$$|a, m\vec{k} + \vec{q}\rangle = |a, m\vec{k}\rangle + \sum_{l \neq n} \vec{q} \cdot \vec{A}_{l\vec{k}}^{(a)} |l\vec{k}\rangle + \sum_{t \neq n} \vec{q} \cdot \overset{\leftrightarrow}{C}_{t\vec{k}}^{(a)} \cdot \vec{q} |t\vec{k}\rangle .$$

Die Eigenfrequenz erhält nun zusätzlich den Term der Gruppengeschwindigkeitsdispersion

$$\omega_{m\vec{k} + \vec{q}}^{(a)} = \omega_{m\vec{k}} + \vec{q} \cdot \vec{v}_{m\vec{k}}^{(a)} + \vec{q} \cdot \overset{\leftrightarrow}{M}_{m\vec{k}}^{(a)} \cdot \vec{q} .$$

Einsetzen in Gleichung (2.11) liefert für die zweite Ordnung in \vec{q} die Gleichung

$$\begin{aligned} 0 &= \left(\hat{H}(\vec{k}) + \frac{\epsilon_p(\vec{r})}{c^2} \omega_{m\vec{k}} \right) \sum_{t \neq n} \vec{q} \cdot \overset{\leftrightarrow}{C}_{t\vec{k}}^{(a)} \cdot \vec{q} |t\vec{k}\rangle \\ &+ \left(-2\vec{q} \cdot \hat{\Omega}(\vec{k}) + 2 \frac{\epsilon_p(\vec{r})}{c^2} \omega_{m\vec{k}} \vec{q} \cdot \vec{v}_{m\vec{k}}^{(a)} \right) \sum_{l \neq n} \vec{q} \cdot \vec{A}_{l\vec{k}}^{(a)} |l\vec{k}\rangle \\ &+ \left(-\vec{q}^2 + 2 \frac{\epsilon_p(\vec{r})}{c^2} \omega_{m\vec{k}} \vec{q} \cdot \overset{\leftrightarrow}{M}_{m\vec{k}}^{(a)} \cdot \vec{q} + \frac{\epsilon_p(\vec{r})}{c^2} (\vec{q} \cdot \vec{v}_{m\vec{k}}^{(a)})^2 \right) |a, m\vec{k}\rangle \end{aligned}$$

Durch das Projizieren auf eine der neuen Basisfunktionen des Untervektorraums $|b, m\vec{k}\rangle$ entfallen Terme mit $\vec{v}_{m\vec{k}}^{(a)} \cdot \vec{A}_{l\vec{k}}^{(a)}$ und $\overset{\leftrightarrow}{C}_{t\vec{k}}^{(a)}$. Man

erhält für $a = b$ die folgende Gleichung für die Gruppengeschwindigkeitsdispersion

$$\begin{aligned} \vec{q} \cdot \overleftrightarrow{M}_{m\vec{k}} \cdot \vec{q} &= \vec{q}^2 \frac{c^2}{2\omega_{m\vec{k}}} \left(a, m\vec{k} | a, m\vec{k} \right) - \frac{1}{2\omega_{m\vec{k}}} \left(\vec{q} \cdot \vec{v}_{m\vec{k}}^{(a)} \right)^2 \\ &+ \frac{c^2}{\omega_{m\vec{k}}} \sum_{l \neq n} \left(a, m\vec{k} | \vec{q} \cdot \hat{\Omega}(\vec{k}) | l\vec{k} \right) \vec{q} \cdot \vec{A}_{l\vec{k}}^{(a)} \end{aligned} \quad (2.14)$$

Die numerische Auswertung dieser Gleichung ist in Anhang B geschildert.

2.3.2 Nichtentarteter Fall

Der nichtentartete Fall geht aus der entarteten Rechnung hervor, wenn man die Basisfunktionen des Unterraumes einfach durch Funktionen der Bandstrukturrechnung $|m\vec{k}\rangle$ ersetzt.

- Gruppengeschwindigkeit für den nichtentarteten Fall:

$$\vec{v}_{m\vec{k}} = \frac{c^2}{\omega_{m\vec{k}}} \left\langle m\vec{k} | \vec{\Omega} | m\vec{k} \right\rangle. \quad (2.15)$$

- Tensor der Gruppengeschwindigkeitsdispersion für den nichtentarteten Fall

$$\begin{aligned} \vec{q} \cdot \overleftrightarrow{M}_{m\vec{k}} \cdot \vec{q} &= |\vec{q}|^2 \frac{c^2}{2\omega_{m\vec{k}}} \left\langle m\vec{k} | m\vec{k} \right\rangle - \frac{1}{2\omega_{m\vec{k}}} \left(\vec{q} \cdot \vec{v}_{m\vec{k}} \right)^2 \\ &+ \frac{2c^4}{\omega_{m\vec{k}}} \sum_{l \neq m} \frac{\left\langle m\vec{k} | \vec{q} \cdot \vec{\Omega} | l\vec{k} \right\rangle \left\langle l\vec{k} | \vec{q} \cdot \vec{\Omega} | m\vec{k} \right\rangle}{\omega_{m\vec{k}}^2 - \omega_{l\vec{k}}^2}. \end{aligned} \quad (2.16)$$

2.3.3 Ergebnisse

Zur Illustration wollen wir die berechneten Daten der Gruppengeschwindigkeit und Gruppengeschwindigkeitsdispersion für die ersten drei Bänder der in Abbildung (2.2) dargestellten Bandstruktur des Quadratgitters betrachten. In Abbildung (2.6) sind die ersten drei Bänder dieser Bandstruktur nocheinmal herausgegriffen. Die Bandstruktur ist entlang der Hochsymmetrieachsen dargestellt. Daher legen wir den Betrachtungsvektor \vec{q} entlang dieser Hochsymmetrieachsen und projizieren den Geschwindigkeitsvektor darauf. Somit wird $\vec{q} \cdot \vec{v}_{m\vec{k}}$ über den Hochsymmetrieachsen aufgetragen. Für die Gruppengeschwindigkeitsdispersion stellen wir folglich $\vec{q} \cdot \overleftrightarrow{M}_{m\vec{k}} \cdot \vec{q}$ über den Hochsymmetrieachsen dar.

Die Gruppengeschwindigkeit und die Gruppengeschwindigkeitsdispersion des ersten Bandes sind in Abbildung (2.7) dargestellt. Man erkennt auf dem

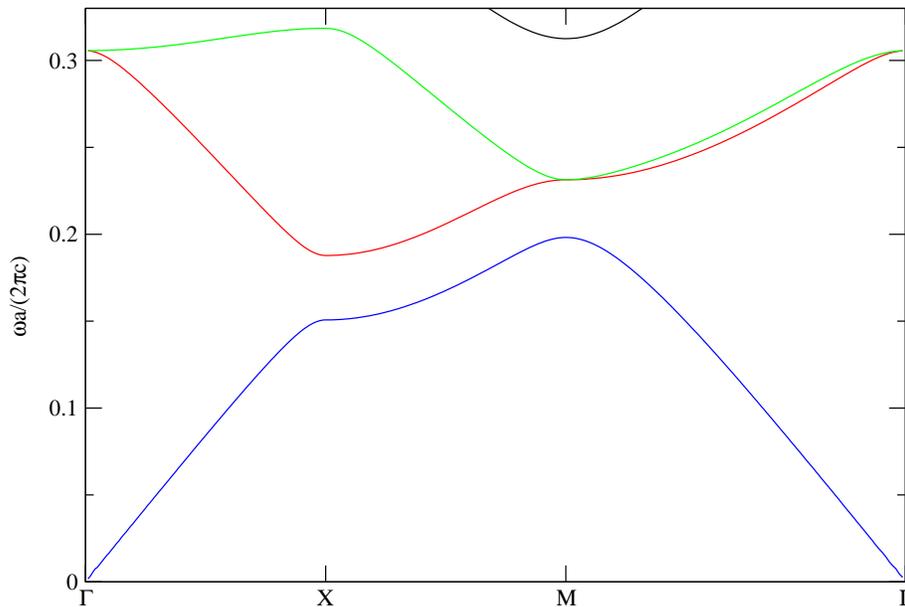


Abbildung 2.6: Die ersten 3 Bänder, wobei das 2. und 3. Band an den Stellen Γ und M entartet sind

Abschnitt ΓX , dass die Gruppengeschwindigkeit nahezu konstant bleibt und erst in der Nähe des X -Punktes auf Null abfällt. Dies entspricht dem Verlauf der Steigung der Bandstruktur. Die Steigung ist fast konstant und fällt zum X -Punkt hin auf Null ab. Die physikalische Interpretation ist die folgende. Für kleine Frequenzen, also lange Wellenlängen des einfallenden Feldes, sieht dieses nur ein effektiv homogenes Medium, statt eines photonischen Kristalls. Da man in einem homogenen Medium eine lineare Dispersion hat, taucht diese im Grenzfall der kleinen Frequenzen auf. Der Abfall der Gruppengeschwindigkeit am X -Punkt kommt nun daher, dass dieser am Rand der Brillouinzone liegt und sich dort, aufgrund der erfüllten Braggbedingung, stehende Wellen ausbilden. Dies gilt auch für den M -Punkt. Der Verlauf der Steigung im Bereich XM ist von Null am X -Punkt ansteigend, bis zu einem Maximum, dann fällt sie am M -Punkt wieder auf Null ab. Auch dieser Verlauf ist in der Gruppengeschwindigkeit gut zu sehen. Der letzte Abschnitt $M\Gamma$ ist ähnlich dem ersten. Die Gruppengeschwindigkeit beginnt hier am M -Punkt bei Null und fällt dann auf eine Konstante ab. Die Gruppengeschwindigkeit des ersten Bandes verschwindet also an den Hochsymmetriepunkten X und M . Betrachten wir nun die Gruppengeschwindigkeitsdispersion des ersten Bandes. Die Gruppengeschwindigkeitsdispersion ist proportional zur Ableitung der Gruppengeschwindigkeit. Im Bereich ΓX ist die Steigung der Gruppengeschwindigkeit anfangs sehr klein, dann fällt sie zum X -Punkt schnell ab. Dieses Verhalten spiegelt sich in der Gruppengeschwindigkeits-

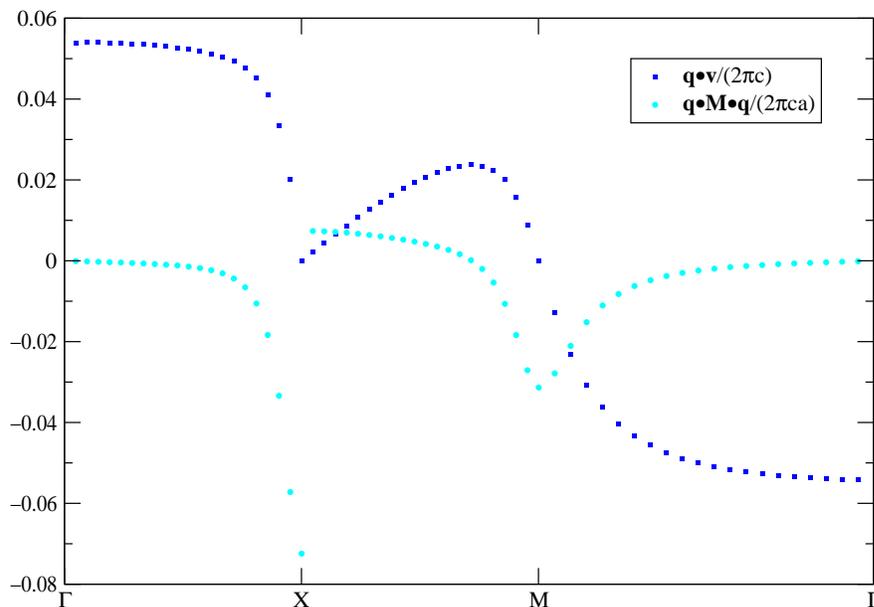


Abbildung 2.7: Gruppengeschwindigkeit (blau) und Gruppengeschwindigkeitsdispersion (cyan) für erstes Band

dispersion wieder. Die physikalische Erklärung des Verhaltens ist wiederum die des effektiv homogenen Mediums bei kleinen Frequenzen um Γ . Da im homogenen Medium eine lineare Dispersion vorliegt, kann keine Gruppengeschwindigkeitsdispersion existieren. Am X -Punkt hat die Gruppengeschwindigkeit einen Knick, daher ist die Ableitung an dieser Stelle nicht definiert. Die Gruppengeschwindigkeitsdispersion springt nach X auf einen positiven Wert und fällt dann bis zu M in den negativen Bereich ab. Dabei hat sie an der Stelle den Wert Null, an der die Gruppengeschwindigkeit ihr Maximum erreicht. Die Gruppengeschwindigkeit weist am M -Punkt keinen Knick auf, die Gruppengeschwindigkeitsdispersion hat an dieser Stelle keinen Sprung. Sie erreicht ein Minimum und steigt zum Γ -Punkt hin erst steil, dann sehr langsam auf Null an. Dieses Verhalten ist auch in der Steigung der Gruppengeschwindigkeit zu finden.

Die gewonnenen Daten aus dem Programm zur Berechnung der Gruppengeschwindigkeit und Gruppengeschwindigkeitsdispersion geben also genau den erwarteten Verlauf wieder. Bisher hatten wir allerdings noch keinen entarteten Punkt. Dies wird nun durch die Betrachtung des zweiten und dritten Bandes nachgeholt.

Da sich die Bänder des zweiten und dritten Bandes am Punkt M berühren, ist die Gruppengeschwindigkeit dieser beiden Bänder in Abbildung (2.8) und die Gruppengeschwindigkeitsdispersion in Abbildung (2.9) aufgetragen. Offensichtlich ist die Gruppengeschwindigkeit an den Hochsymmetriepunkten

Γ , X und M Null. Der Grund hierfür ist die erfüllte Braggbedingung. Diese besagt, dass die Änderung des Wellenvektors $\Delta\vec{k}$ ein Vielfaches des reziproken Gittervektors \vec{G} sein muss. Wenn diese Bedingung erfüllt ist, bilden sich stehende Wellen mit $\vec{v}_{m\vec{k}} = 0$. Man kann allgemein sagen, dass die Gruppengeschwindigkeit an den Hochsymmetriepunkten immer Null ist, nur das erste Band bildet eine Ausnahme am Γ -Punkt, da dies den Grenzfall des homogenen Mediums bildet.

Uns interessiert nun der entartete Punkt M . Dort hat das zweite Band einen Wendepunkt und das dritte Band ein Minimum. Für den Verlauf der Gruppengeschwindigkeit bedeutet dies, dass die Gruppengeschwindigkeit des zweiten Bandes nur den Nullpunkt berührt, während die Gruppengeschwindigkeit des dritten Bandes die Nulllinie schneidet. In Abbildung (2.8) ist das Schneiden der Gruppengeschwindigkeit des dritten Bandes mit der Nulllinie zu sehen. Die Gruppengeschwindigkeit des zweiten Bandes fällt am M -Punkt ebenfalls auf Null ab, steigt dann aber wieder. Dies ist auch in der Gruppengeschwindigkeitsdispersion des zweiten Bandes ersichtlich, da diese einen Sprung aufweist. Die Gruppengeschwindigkeitsdispersion des dritten Bandes zeigt in Abbildung (2.9) einen kontinuierlichen Verlauf ohne Sprung. Für die Werte am entarteten Punkt M erwarten wir, dass die Gruppengeschwindigkeit Null ist, während die Gruppengeschwindigkeitsdispersion endliche Werte annimmt. Für das zweite Band sollte die Gruppengeschwindigkeitsdispersion einen negativen Wert haben, da die Krümmung des Bandes negativ ist. Für das dritte Band muss die Gruppengeschwindigkeitsdispersion jedoch einen positiven Wert haben. Dies können wir in den Abbildungen erkennen. Auch der entartete Fall wird daher richtig dargestellt.

Nachdem wir den Verlauf der berechneten Werte qualitativ bestätigt haben, wollen wir nun auch einen quantitativen Vergleich anführen. In Abbildung (2.10) ist daher die Störungsrechnung in schwarz mit der Bandstruktur abgebildet. Für die Störungsrechnung wurde dabei der Wert der Bandstruktur als Ausgangspunkt gelegt. Dann wurde mit Hilfe der daraus berechneten Gruppengeschwindigkeit und Gruppengeschwindigkeitsdispersion in die jeweilige Richtung erweitert. Die Übereinstimmung der Näherung mit der Bandstruktur ist in dieser Abbildung ersichtlich.

Zusammenfassung

Wir wollen hier noch einmal die wichtigsten Punkte dieses Kapitels zusammenfassen.

- Photonische Kristalle bestehen aus einer periodischen Anordnung von Dielektrika.
- Sie besitzen aufgrund dieser Periodizität eine Bandstruktur für elek-

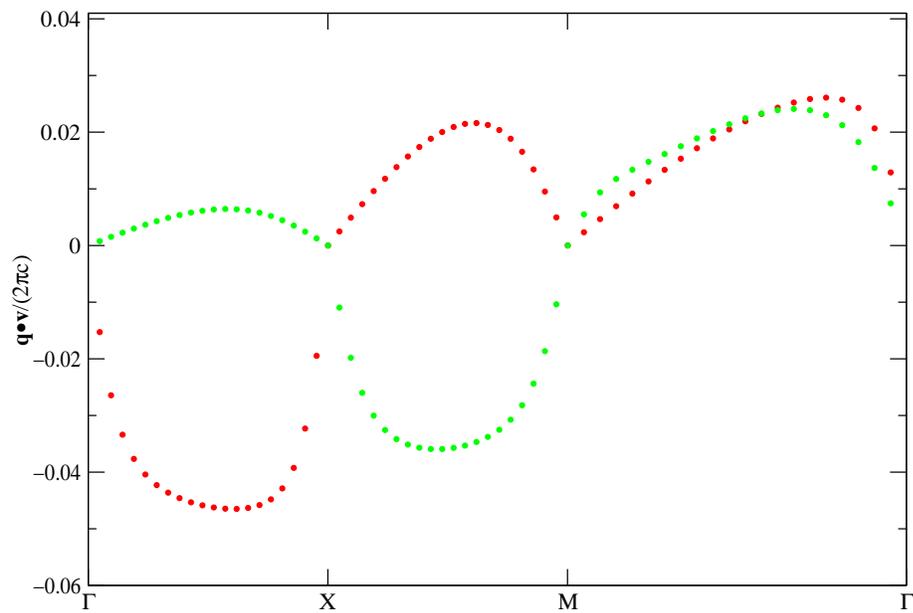


Abbildung 2.8: Gruppengeschwindigkeit für zweites (rot) und drittes (grün) Band

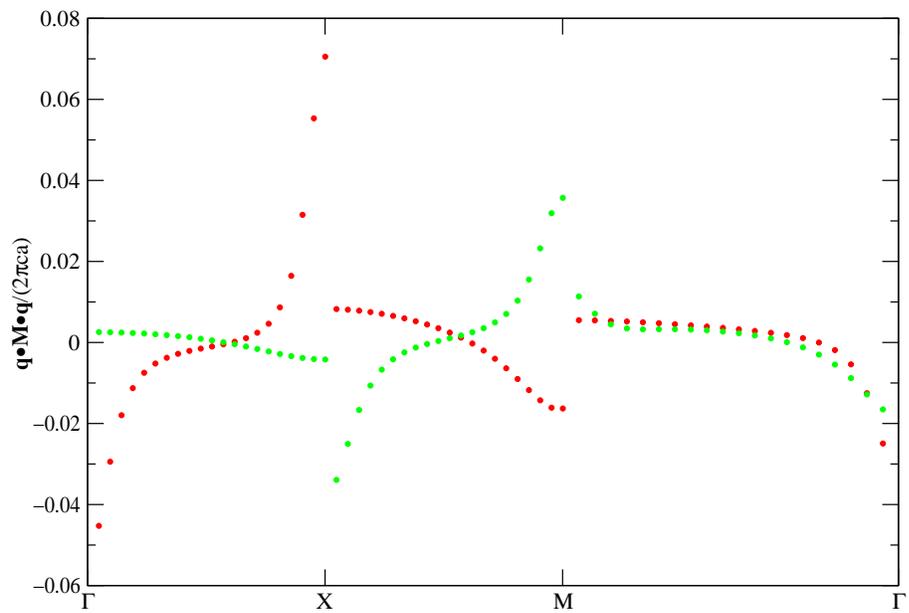


Abbildung 2.9: Gruppengeschwindigkeitsdispersion für zweites (rot) und drittes (grün) Band

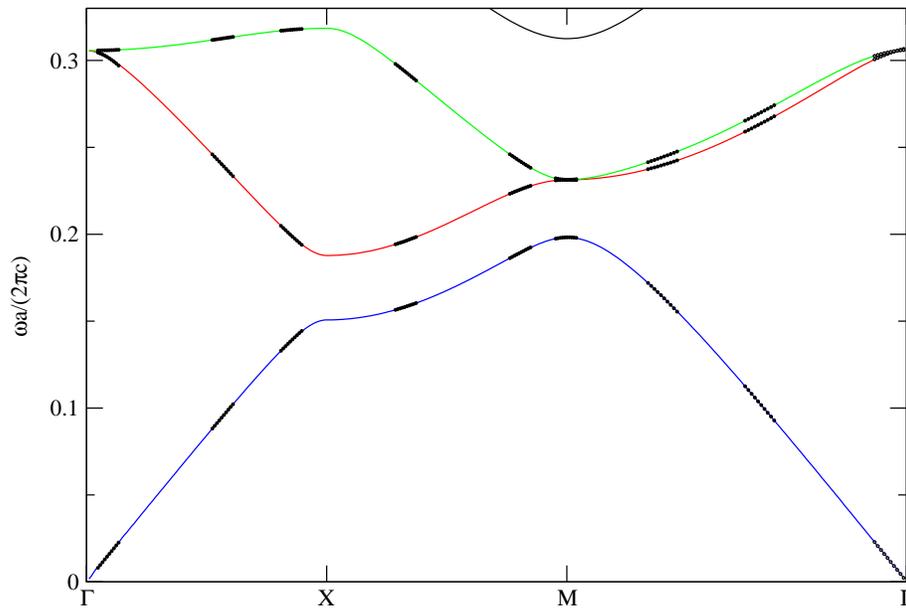


Abbildung 2.10: Ergebnisse der Störungsrechnung in der Bandstruktur

tromagnetische Wellen.

- Aus dieser Bandstruktur lassen sich mittels der kp-Störungstheorie die Gruppengeschwindigkeit $\vec{v}_{m\vec{k}}$ und die Gruppengeschwindigkeitsdispersion $\vec{M}_{m\vec{k}}$ bestimmen.

Kapitel 3

Nichtlinearitäten

In Unterkapitel 3.1 wird die Reaktion eines Mediums auf ein äusseres elektrisches Feld erklärt. Vor allem sollen mögliche nichtlineare Effekte motiviert werden. Dazu wird ein anschauliches klassisches Modell diskutiert.

Im darauf folgenden Abschnitt 3.2 wird näher auf die Effekte der nichtlinearen Terme eingegangen. Es wird ferner gezeigt, welcher nichtlineare Term für uns interessant ist.

Das Unterkapitel 3.3 beschäftigt sich mit der mathematischen Behandlung von nichtlinearen Gleichungen. Es wird die Multi-Skalen-Methode vorgestellt und motiviert. Diese Methode wird dann in den folgenden Kapiteln benutzt.

3.1 Grundlagen

Stabile Systeme haben die besondere Eigenschaft, dass sie nach einer äusseren Störung wieder in ihren Ausgangszustand, den sogenannten Grundzustand, zurückkehren wollen. Dies wird folgendermassen erklärt. Das System versucht den Zustand mit der niedrigsten erreichbaren Energie einzunehmen. Es befindet sich also in einem Minimum der Potentialfunktion. In erster Näherung kann die Potentialfunktion um dieses Minimum als Parabel angenommen werden, dies entspricht dem linearen Fall, welcher schematisch in Abbildung (3.1 a) dargestellt ist. Jedes stabile System kann daher für kleine Auslenkungen als linear betrachtet werden. Mit Auslenkung ist dabei gemeint, dass das System durch äussere Kräfte z.B. einem Schlag aus seiner Ruhelage gebracht wird. Der nichtlineare Charakter kommt nun erst ab einer gewissen Auslenkung zum Tragen. Dies bedeutet, dass die Parabelnäherung für das Potential nicht mehr angenommen werden kann, siehe Abbildung (3.1 b). Es müssen also bisher vernachlässigte Kräfte im System miteinbezogen werden. Lineare Systeme sind daher als ein Spezialfall der nichtlinearen aufzufassen. Um dies zu veranschaulichen bedienen wir uns eines einfachen Experimentes. In Abbildung (3.2) ist der Versuchsaufbau dargestellt.

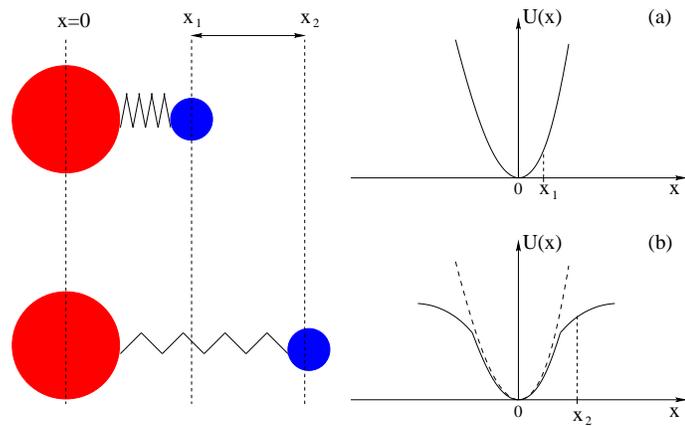


Abbildung 3.1: Schematische Darstellung der harmonischen Auslenkung (a) und anharmonischen Auslenkung (b) einer Feder

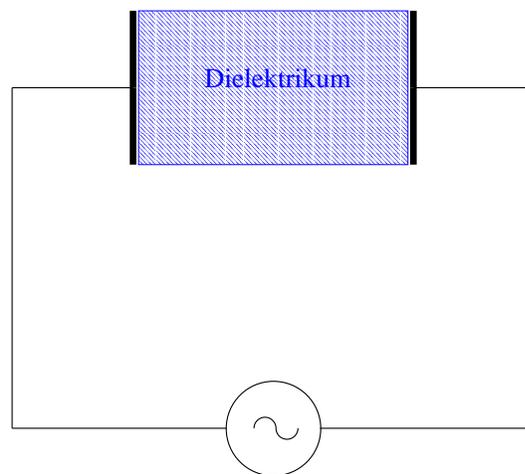


Abbildung 3.2: Versuchsaufbau

Wir betrachten ein in einen Kondensator eingespanntes Dielektrikum. Der Kondensator werde mit Wechselspannungen im Frequenzbereich des optischen Lichtes betrieben. Das jeweils anliegende elektrische Feld induziert nun eine ihm entgegengerichtete Polarisation des Dielektrikums. Diese Polarisation entsteht dadurch, dass Elektronen und Atomkerne in unterschiedliche Richtungen ausgelenkt werden, sich also ein Dipol ausbildet. Die Stärke der Auslenkung wird dabei durch die Amplitude des angelegten Feldes bestimmt.

Da sich die Atome in einem Festkörper befinden, bilden sie ein für das jeweilige Dielektrikum charakteristisches Gittersystem aus. In unserem Modell gehen wir somit davon aus, dass sich die Atomkerne nicht verschieben. Die Elektronen hingegen können in diesem Modell aus ihrer Ruhelage ausgelenkt werden. Die Bindung der Elektronen an die Atomkerne wird durch eine Feder dargestellt. In Abbildung (3.3) ist das Modell graphisch veranschaulicht. Dabei sind die Atomkerne rot und die Elektronen blau dargestellt.

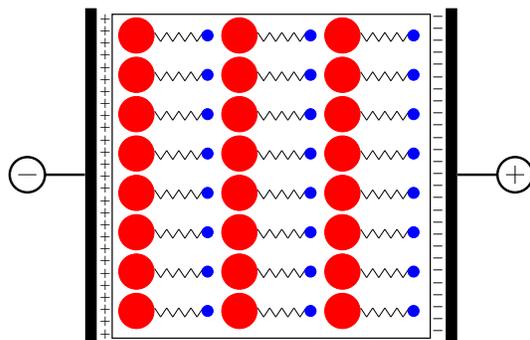


Abbildung 3.3: Klassisches Modell zur Polarisation des Dielektrikums

Oszilliert nun das angelegte Feld, so oszillieren die Elektronen um ihre Ruhelage. Die Polarisation oszilliert folglich um ihren Ausgangswert. Die Ruhelage der Elektronen ist im Modell aus Abbildung (3.3) die Position, in der Atomkerne und Elektronen am gleichen Ort sind, daher ist der Ausgangswert der Polarisation in diesem Modell auch Null. Je nach Stärke des anliegenden Feldes, also der äusseren Kraft, kann man diese Oszillation der Elektronen in einem harmonischen oder anharmonischen Potential beschreiben. In Abbildung (3.1) wird dies verdeutlicht. Wird das Elektron um die Länge x_1 ausgelenkt, so befindet sich die Feder noch im linearen Betrieb. Bei der Auslenkung zu x_2 müssen jedoch die nichtlinearen Terme berücksichtigt werden, das Potential wird anharmonisch.

Mathematisch lautet die allgemeine Bewegungsgleichung des Elektrons:

$$m \left[\frac{\partial^2 x}{\partial t^2} + 2\Gamma \frac{\partial x}{\partial t} + \Omega^2 x - \left(\xi^{(2)} x^2 + \xi^{(3)} x^3 + \dots \right) \right] = -eE(t) ,$$

wobei x die Auslenkung aus der Ruhelage, Ω die Resonanzfrequenz und Γ die Dämpfungskonstante ist. Das vom Kondensator erzeugte elektrische Feld wird durch die rechte Seite der Gleichung repräsentiert. Die ξ -Terme sind für die Anharmonizität verantwortlich. Für den harmonischen Fall, also ohne die ξ -Terme ergibt sich mit $E(t) = E_0 \cos(\omega t)$ die Lösung

$$x = \frac{-eE_0}{2m} \frac{e^{-i\omega t}}{\Omega^2 - 2i\Gamma\omega - \omega^2} + c.c. ,$$

c.c. bezeichnet dabei den komplex konjugierten Ausdruck. Die Polarisation des Dielektrikums ergibt sich dann für N Dipole pro Volumen zu

$$P = -Nex = \frac{1}{2}\epsilon_0\chi E_0 e^{-i\omega t} + c.c. ,$$

wobei die lineare Suszeptibilität χ gegeben ist durch

$$\chi = \frac{Ne^2}{\epsilon_0 m} \frac{1}{\Omega^2 - 2i\Gamma\omega - \omega^2} .$$

Die Polarisation schwingt mit derselben Frequenz ω , wie das anregende Feld. Trägt man nun die Polarisation über das angelegte Feld auf, so erhält man eine Gerade. Daher wird dieser Fall als linear bezeichnet. Dies ist in Abbildung (3.4) gezeigt. Die durchgezogene Linie ist der lineare Fall, die gestrichelte der nichtlineare. Für ein äusseres Feld bis zur Stärke E_1 kann man den linearen Fall betrachten.

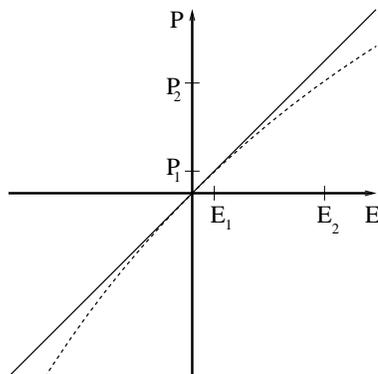


Abbildung 3.4: Darstellung der linearen (durchgezogene Linie) und nichtlinearen (gestrichelte Linie) Antwort des Dielektrikums auf ein äusseres Feld

Legt man nun jedoch ein stärkeres elektrisches Feld an, so werden die Federn so weit ausgelenkt, dass die lineare Approximation nicht mehr gilt. In Abbildung (3.4) ist dies durch das Feld E_2 dargestellt. In diesem Fall muss den anharmonischen ξ -Termen Rechnung getragen werden. Es kommen also

noch anharmonische Rückstellkräfte der Form $m(\xi^{(2)}x^2 + \xi^{(3)}x^3 + \dots)$ hinzu. Die daraus resultierenden Effekte in der Polarisation werden im folgenden Kapitel behandelt.

Um die Bewegungsgleichung zu lösen macht man sich die Störungsrechnung zu Nutze und geht somit davon aus, dass die anharmonischen Terme klein sind im Vergleich zum harmonischen Term. Man entwickelt daher x in eine Potenzreihe von E . Darum kann auch die Polarisation in eine Potenzreihe entwickelt werden und man erhält

$$P = \epsilon_0 \left(\chi^{(1)} E + \chi^{(2)} E^2 + \chi^{(3)} E^3 + \dots \right) .$$

Hierbei ist $\chi^{(1)}$ die *lineare* Suszeptibilität aus der vorherigen Betrachtung. Und es gilt $\chi^{(1)} \gg \chi^{(2)}, \chi^{(3)}$. Für uns ist der Störterm $\chi^{(3)}$ von Interesse, da der $\chi^{(2)}$ -Term für unsere zentrosymmetrischen Materialien entfällt (siehe folgendes Kapitel).

3.2 χ^3 -Nichtlinearität

Im vorhergehenden Abschnitt wurde gezeigt, dass wir die Polarisation als eine Reihenentwicklung betrachten können. Im Allgemeinen ist die Polarisation ein Vektor und die Suszeptibilitäten $\chi^{(1)}, \chi^{(2)}, \chi^{(3)}, \dots$ sind Tensoren. Somit lautet die allgemeine Form für die i -te Komponente des Polarisationsvektors

$$P_i = \sum_j \chi_{ij}^{(1)} E_j + \sum_{j,k} \chi_{ijk}^{(2)} E_j E_k + \sum_{j,k,l} \chi_{ijkl}^{(3)} E_j E_k E_l + \dots . \quad (3.1)$$

Dabei werden $\chi^{(2)}, \chi^{(3)}, \dots$ als *nichtlineare* Suszeptibilitäten bezeichnet. Sie erweitern die Eigenschaften des Mediums sobald die Abweichung vom linearen Fall zu gross werden. Es ist ferner ersichtlich, dass durch den Tensorcharakter der Suszeptibilitäten die Richtungen von Polarisation und E-Feld nicht immer übereinstimmen.

Die nichtlinearen Terme werden im Folgenden genauer untersucht. Wir beschränken uns dabei auf die ersten zwei nichtlinearen Terme. Zusätzlich nehmen wir ein isotropes Medium an, dies bedeutet, dass die Richtung der Polarisation und die des E-Feldes übereinstimmen. Wir können daher die Reihenentwicklung

$$P = \epsilon_0 \left(\chi^{(1)} E + \chi^{(2)} E^2 + \chi^{(3)} E^3 + \dots \right)$$

des vorherigen Abschnittes übernehmen. Betrachten wir weiterhin ein linear polarisiertes einfallendes Feld der Form

$$E = A \sin(\omega t) .$$

Eingesetzt in Gleichung (3.1) folgt

$$\begin{aligned} P &= \chi^{(1)} A \sin(\omega t) \\ &+ \frac{1}{2} \chi^{(2)} A^2 - \frac{1}{2} \chi^{(2)} A^2 \cos(2\omega t) \\ &+ \frac{3}{4} \chi^{(3)} A^3 \sin(\omega t) - \frac{1}{4} \chi^{(3)} A^3 \sin(3\omega t) . \end{aligned}$$

Neben dem linearen $\chi^{(1)}$ -Term haben wir zwei $\chi^{(2)}$ -Terme und zwei $\chi^{(3)}$ -Terme erhalten.

Auffallend ist zunächst, dass einer der $\chi^{(2)}$ -Terme nicht oszilliert. Dieser Term bewirkt also die *Erzeugung eines Gleichspannungsfeldes* im Medium, obwohl das einfallende elektrische Feld oszilliert. Die Richtung dieser Gleichspannung hängt von der nichtlinearen Suszeptibilität $\chi^{(2)}$, welche im Allgemeinen ein Tensor ist, ab.

Der oszillierende Term von $\chi^{(2)}$ hat ebenso eine Besonderheit. Er besitzt die Frequenz 2ω . Dies bedeutet, dass im Medium ein Dipolmoment dieser Frequenz induziert wird. Diese oszillierenden Dipole erzeugen dann ihrerseits ein elektrisches Feld der Frequenz 2ω . Dieser Effekt wird *Erzeugung der zweiten Harmonischen (SHG)* genannt.

Der eine der $\chi^{(3)}$ -Terme erzeugt, ähnlich dem oszillierenden $\chi^{(2)}$ -Term, ein Feld der Frequenz 3ω und wird daher *Erzeugung der dritten Harmonischen (THG)* genannt.

Es gibt aber noch einen weiteren Term, welcher mit der gleichen Frequenz ω schwingt, wie die anregende Kraft. Wir können also diesen und den linearen Term zusammenziehen und die Polarisation folgendermassen schreiben

$$P = \left(\chi^{(1)} + \chi^{(3)} E^2 \right) E + \dots$$

In dieser Schreibweise kann man den Ausdruck in Klammern als effektive Suszeptibilität χ_{eff} ansehen. Dies bedeutet, dass man nun eine nichtlineare Suszeptibilität erhält, deren Grösse von der Intensität E^2 des einfallenden Feldes abhängt. Dies wird Auswirkungen auf die Pulsausbreitung haben, da das Maximum des Pulses aufgrund der dort höheren Intensität eine andere Polarisation "sehen" wird als die Pulsschwänze. Auf diese Effekte wird später noch einmal eingegangen werden.

Der erste nichtlineare Term in Photonischen Kristallen:

In der späteren Rechnung soll nur die führende nichtlineare Ordnung der Polarisation berücksichtigt werden. Aufgrund der in unserem Fall für den Photonischen Kristall verwendeten zentrosymmetrischen Materialien, entfällt

$\chi^{(2)}$. Um dies zu beweisen betrachten wir den nichtlinearen Polarisations-term

$$P_i^{(2)} = \sum_{j,k} \chi_{ijk}^{(2)} E_j E_k ,$$

wobei $\{i, j, k\} \in \{x, y, z\}$. Kehrt man nun die Richtung der Koordinatenachsen um, ändert sich das Vorzeichen der Polarisation, sowie das des einfallenden Feldes. Aufgrund der Inversionsymmetrie bleibt das Vorzeichen von $\chi^{(2)}$ davon unbeeinflusst. Die Inversionsymmetrie besagt, dass der Kristall die gleichen Eigenschaften unter der Inversionsoperation aufweist, wie zuvor. Somit folgt

$$-P_i^{(2)} = \sum_{j,k} \chi_{ijk}^{(2)} (-E_j) (-E_k) = P_i^{(2)} .$$

Diese Gleichung ist nur erfüllt, wenn $P_i^{(2)} = 0$ gilt. Da das einfallende Feld oszilliert, bleibt nur die Möglichkeit

$$\chi_{ijk}^{(2)} = 0$$

für inversionssymmetrische Kristalle (Medien). Der erste nichtlineare Term wird für unser System somit der $\chi^{(3)}$ -Term sein.

Zusammenfassung

In diesem Kapitel haben wir gezeigt:

- Der führende nichtlineare Term in nicht zentrosymmetrischen Medien ist $\chi^{(2)}$.
- Die Effekte der $\chi^{(2)}$ -Nichtlinearität sind
 - Erzeugung der zweiten Harmonischen,
 - Erzeugung eines Gleichspannungsfeldes.
- Der führende nichtlineare Term in zentrosymmetrischen Medien ist $\chi^{(3)}$.
- Die Effekte der $\chi^{(3)}$ -Nichtlinearität sind
 - Erzeugung der dritten Harmonischen,
 - Erzeugung einer Intensitätsabhängigen Polarisation.

3.3 Multi-Skalen-Methode

Zur Behandlung von nichtlinearen Gleichungen werden zwei Methoden vorgestellt. Die erste Methode, von Krylov, Bogoliubov und Mitropolski entwickelt [5, 9], beruht auf einem physikalischen Ansatz. Sie wird an dieser Stelle erläutert um darauf aufbauend den systematischen Ansatz der Multi-Skalen-Methode darzulegen und dessen Vorteile aufzuzeigen. Als nichtlineare Gleichung dient hierfür der Duffing-Oszillator. Wir werden die Multi-Skalen-Methode im folgenden Kapitel auf die Gleichung der Einhüllenden eines Pulses in einem Photonischen Kristall anwenden.

Die Gleichung des Duffing-Oszillators lautet

$$\frac{d^2 u(t)}{dt^2} + \omega_0^2 u(t) + \epsilon u^3(t) = 0, \text{ mit } \epsilon \ll 1.$$

Die Lineare Gleichung für $\epsilon = 0$ hat die Lösung

$$u(t) = a \cos(\omega_0 t + \phi).$$

Krylov-Bogoliubov-Mitropolski-Methode:

Der Ausgangspunkt der Krylov-Bogoliubov-Mitropolski-Methode ist, dass die Konstanten der linearen Lösung durch die Nichtlinearität zeitlich verändert werden. Es wird daher

$$a \rightarrow a(t) \text{ und } \phi \rightarrow \phi(t)$$

gesetzt. Man führt somit zwei weitere unbekannte Variablen ein. Die physikalische Interpretation dieses Ansatzes ist die, dass die lineare Lösung durch die Nichtlinearitäten auf der Zeitskala verändert wird. Da die Nichtlinearitäten als kleine Störungen des linearen Systems aufgefasst werden können, d.h. $\epsilon \ll 1$, sind die zeitlichen Variationen der Variablen langsam. $a(t)$ und $\phi(t)$ stellen langsam veränderliche Funktionen dar. Die Lösung des linearen Systems bildet den schnell oszillierenden Teil die sogenannte Trägerfunktion. Es ist jedoch anzumerken, dass man für diese Methode die Lösung des linearen Systems benötigt.

Die zeitliche Ableitung der Lösung $u(t)$ ist daher

$$\begin{aligned} \frac{du(t)}{dt} &= \frac{da(t)}{dt} \cos(\omega_0 t + \phi(t)) \\ &\quad - \frac{d\phi(t)}{dt} a(t) \sin(\omega_0 t + \phi(t)) \\ &\quad - \omega_0 a(t) \sin(\omega_0 t + \phi(t)) \end{aligned}$$

Wir haben mit $a(t)$ und $\phi(t)$ zwei weitere Unbekannte eingeführt. Es steht aber nur eine Bewegungsgleichung für deren Festlegung zur Verfügung. Diese

Überbestimmtheit löst sich auf, wenn man berücksichtigt, dass die neuen Variablen $a(t)$ und $\phi(t)$ langsam in der Zeit variieren. Ihre Ableitungen müssen darum von erster Ordnung in ϵ sein. Die Bedingung

$$\frac{da(t)}{dt} \cos(\omega_0 t + \phi(t)) = \frac{d\phi(t)}{dt} a(t) \sin(\omega_0 t + \phi(t)) \quad (3.2)$$

wird, wie wir später sehen werden, genau dies liefern. Gleichung (3.2) hat nun ersteinmal zur Folge, dass in der ersten Ableitung von $u(t)$ die Ableitungen von $a(t)$ und $\phi(t)$ nach der Zeit entfallen. Damit treten in der zweiten Ableitung von $u(t)$ nur die ersten Ableitungen von $a(t)$ und $\phi(t)$ nach der Zeit auf. Man erhält

$$\begin{aligned} \frac{du(t)}{dt} &= -\omega_0 a(t) \sin(\omega_0 t + \phi(t)) \\ \frac{d^2 u(t)}{dt^2} &= -\omega_0 \frac{da(t)}{dt} \sin(\omega_0 t + \phi(t)) \\ &\quad -\omega_0 a(t) \left(\omega_0 + \frac{d\phi(t)}{dt} \right) \cos(\omega_0 t + \phi(t)) . \end{aligned}$$

In die Gleichung für den Duffing-Oszillator eingesetzt folgt

$$\begin{aligned} \epsilon a^3(t) \cos^3(\omega_0 t + \phi(t)) &= -\omega_0 \sin(\omega_0 t + \phi(t)) \frac{da(t)}{dt} \\ &\quad - \omega_0 a(t) \cos(\omega_0 t + \phi(t)) \frac{d\phi(t)}{dt} \end{aligned} \quad (3.3)$$

Mit den Gleichungen (3.2) und (3.3) erhält man ein neues Gleichungssystem, welches man in Bezug auf die Ableitungen von $a(t)$ und $\phi(t)$ auflösen muss. Dies führt zu zwei gekoppelten Differentialgleichungen

$$\frac{da(t)}{dt} = \frac{\epsilon}{\omega_0} a^3(t) \sin(\omega_0 t + \phi(t)) \cos^3(\omega_0 t + \phi(t)) \quad (3.4)$$

$$\frac{d\phi(t)}{dt} = \frac{\epsilon}{\omega_0} a^2(t) \cos^4(\omega_0 t + \phi(t)) . \quad (3.5)$$

Das Problem der Differentialgleichung zweiter Ordnung für $u(t)$ wurde durch zwei gekoppelte Differentialgleichungen erster Ordnung ersetzt. Ferner sieht man, dass die Ableitungen von erster Ordnung in ϵ sind. Unsere Wahl der Nebenbedingungen (3.2) hat also das gewünschte Resultat geliefert.

Da ϵ als klein angenommen wird, sind die Ableitungen $da(t)/dt \sim O(\epsilon/\omega_0)$ und $d\phi(t)/dt \sim O(\epsilon/\omega_0)$ ebenfalls klein. Somit sind $a(t)$ und $\phi(t)$ langsam variierende Funktionen in der Zeit. Im Zeitintervall $0 \leq t \leq 2\pi/\omega_0$ werden sich $a(t)$ und $\phi(t)$ also nicht wesentlich verändern, ebensowenig ihre Ableitungen. Dies nutzt man nun aus, indem man die Differentialgleichungen (3.4) und (3.5) über das Zeitintervall $0 \leq t \leq 2\pi/\omega_0$ integriert, d.h. man

mittelt über eine Periode der schnell variierenden Trägerfunktion

$$\begin{aligned} \frac{\omega_0}{2\pi} \int_t^{t+2\pi/\omega_0} \frac{da(\tau)}{d\tau} d\tau \\ = \frac{\omega_0}{2\pi} \int_t^{t+2\pi/\omega_0} d\tau \frac{\epsilon}{\omega_0} a^3(\tau) \sin(\omega_0\tau + \phi(\tau)) \cos^3(\omega_0\tau + \phi(\tau)) \end{aligned}$$

$$\frac{\omega_0}{2\pi} \int_t^{t+2\pi/\omega_0} \frac{d\phi(\tau)}{d\tau} d\tau = \frac{\omega_0}{2\pi} \int_t^{t+2\pi/\omega_0} d\tau \frac{\epsilon}{\omega_0} a^2(\tau) \cos^4(\omega_0\tau + \phi(\tau)) .$$

Da sich $a(t)$ und $\phi(t)$ nur langsam in diesem Intervall verändern, benutzt man folgende Näherung

$$\frac{\omega_0}{2\pi} \int_t^{t+2\pi/\omega_0} d\tau a(\tau) \approx a(t) , \quad \frac{\omega_0}{2\pi} \int_t^{t+2\pi/\omega_0} d\tau \frac{da(\tau)}{d\tau} \approx \frac{da(t)}{dt}$$

$$\frac{\omega_0}{2\pi} \int_t^{t+2\pi/\omega_0} d\tau \phi(\tau) \approx \phi(t) , \quad \frac{\omega_0}{2\pi} \int_t^{t+2\pi/\omega_0} d\tau \frac{d\phi(\tau)}{d\tau} \approx \frac{d\phi(t)}{dt} .$$

Eingesetzt erhält man dann, wobei die Zeitabhängigkeit von ϕ in den Sinus- und Cosinus-Funktionen vernachlässigt wird

$$\begin{aligned} \frac{da(t)}{dt} &\approx \frac{\epsilon}{\omega_0} a^3(t) \frac{\omega_0}{2\pi} \int_t^{t+2\pi/\omega_0} d\tau \sin(\omega_0\tau + \phi) \cos^3(\omega_0\tau + \phi) \\ \frac{d\phi(t)}{dt} &\approx \frac{\epsilon}{\omega_0} a^2(t) \frac{\omega_0}{2\pi} \int_t^{t+2\pi/\omega_0} d\tau \cos^4(\omega_0\tau + \phi) . \end{aligned}$$

Die so vereinfachten Integrale können gelöst werden

$$\begin{aligned} \frac{\omega_0}{2\pi} \int_t^{t+2\pi/\omega_0} d\tau \sin(\omega_0\tau + \phi) \cos^3(\omega_0\tau + \phi) &= 0 \\ \frac{\omega_0}{2\pi} \int_t^{t+2\pi/\omega_0} d\tau \cos^4(\omega_0\tau + \phi) &= \frac{3}{8} . \end{aligned}$$

Somit folgt für die gesuchten Funktionen $a(t)$ und $\phi(t)$

$$\begin{aligned} \frac{da(t)}{dt} \approx 0 &\implies a(t) \approx a_0 \\ \frac{d\phi(t)}{dt} \approx \frac{3\epsilon}{8\omega_0} a^2(t) &\implies \phi(t) \approx \frac{3\epsilon a_0^2}{8\omega_0} t + \phi_0, \end{aligned}$$

dabei sind a_0 und ϕ_0 Konstanten, die durch Anfangsbedingungen festgelegt sind. Diese Lösungen für $a(t)$ und $\phi(t)$ legen nun die gesuchte Näherungslösung $u(t)$ des Duffing-Oszillators fest

$$u(t) \approx a_0 \cos\left(\omega_0 t + \frac{3a_0}{8\omega_0^2} (\epsilon\omega_0 t) + \phi_0\right).$$

Man kann die für unsere Zwecke wichtige Auswirkung der Nichtlinearitäten aus der Lösung ablesen. Vergleicht man die Lösung mit der des linearen Systems, so erkennt man, dass eine neue Zeitskala ϵt hinzugekommen ist. Die Nichtlinearität sorgt also dafür, dass sich neue Skalen ergeben, auf denen sich die Lösungsfunktion verändert. Der in der Rechnung verwendete Ansatz lieferte allerdings nur die führende Korrektur der Lösung $u(t)$ zum linearen Fall. Um Korrekturen höherer Ordnungen zu erhalten, muss man den Ansatz

$$u(t) = a(t) \cos(\omega_0 t + \phi(t)) + \sum_{n=1}^{\infty} \epsilon^n u_n(a(t), \phi(t))$$

wählen. Ein solcher Ansatz erschwert das Berechnen höherer Terme erheblich.

Multi-Skalen-Methode

Im vorangegangenen Abschnitt haben wir gesehen, dass Nichtlinearitäten verschiedene Zeitskalen generieren, auf denen sich die Lösungsfunktion ändert. In der jetzt angewandten Multi-Skalen-Methode führt man daher zuerst verschiedene Zeitskalen ein, die dann als unabhängige Variablen behandelt werden. Wir beschränken uns hier auf zwei Zeitskalen

$$T_0 < T_1 \text{ mit } T_0 \equiv t \text{ und } T_1 \equiv \epsilon t.$$

Der Ansatz zur Lösung der Differentialgleichung (3.3) ist bei dieser Methode nicht durch die Lösung des linearen Problems vorgegeben. Wir setzen daher allgemein an

$$u(t) = u_0(T_0, T_1) + \epsilon u_1(T_0, T_1).$$

Da die Lösung in Nullter Ordnung bereits von zwei Variablen abhängt, benötigt man zwei Gleichungen, um sie festzulegen. Wir werden später sehen, dass dies durch die Gleichung in nullter Ordnung von ϵ und die Gleichung für

$u_1(T_0, T_1)$ in erster Ordnung von ϵ erreicht wird. Die zeitliche Ableitung wird nun durch die beiden unabhängigen Variablen ausgedrückt

$$\frac{d}{dt} = \frac{d}{dT_0} + \epsilon \frac{d}{dT_1} .$$

Für die zweifache zeitliche Ableitung ergibt sich folglich

$$\frac{d^2}{dt^2} = \frac{d^2}{dT_0^2} + 2\epsilon \frac{d}{dT_0} \frac{d}{dT_1} + \epsilon^2 \frac{d^2}{dT_1^2} .$$

Setzt man nun den neuen Ansatz für $u(t)$ und die Ableitungen in Gleichung (3.3), so erhält man

$$\begin{aligned} & \left[\frac{d^2}{dT_0^2} + 2\epsilon \frac{d}{dT_0} \frac{d}{dT_1} + \epsilon^2 \frac{d^2}{dT_1^2} \right] (u_0(T_0, T_1) + \epsilon u_1(T_0, T_1)) \\ & + \omega_0^2 (u_0(T_0, T_1) + \epsilon u_1(T_0, T_1)) + \epsilon (u_0(T_0, T_1) + \epsilon u_1(T_0, T_1))^3 = 0 . \end{aligned}$$

Durch das Ausmultiplizieren der Gleichung erhalten wir Terme verschiedener Ordnung in ϵ . Diese Terme werden dann nach den Ordnungen in ϵ in Gleichungen sortiert. Wir wollen die Nullte Ordnung der Lösungsfunktion betrachten und benötigen daher nur die Gleichungen der Ordnung ϵ^0 und ϵ^1 , denn die Lösungsfunktion hängt von der Zeitskala in Nullter und Erster Ordnung in ϵ ab. Für die Nullte Ordnung in ϵ ergibt sich

$$\frac{d^2 u_0(T_0, T_1)}{dT_0^2} + \omega_0^2 u_0(T_0, T_1) = 0 . \quad (3.6)$$

und für die erste Ordnung lautet die Gleichung

$$\frac{d^2 u_1(T_0, T_1)}{dT_0^2} + \omega_0^2 u_1(T_0, T_1) = -2 \frac{d^2 u_0(T_0, T_1)}{dT_0 dT_1} - u_0^3(T_0, T_1) . \quad (3.7)$$

Diese Gleichungen müssen nun nacheinander gelöst werden. Die Gleichung in Nullter Ordnung (3.6) hat die Lösung

$$u_0(T_0, T_1) = A(T_1) e^{i\omega_0 T_0} + A^*(T_1) e^{-i\omega_0 T_0}$$

Die Lösung trennt also die Zeitskalen. Sie besitzt eine Trägerfunktion in der Zeitskala T_0 mit der Frequenz ω_0 und eine Amplitudenfunktion, welche die Trägerfunktion auf der Zeitskala T_1 variiert. Da die Amplitudenfunktion $A(T_1)$ nur von der langsameren Zeitvariablen abhängt, nennt man sie langsam variierende Einhüllende. Über sie wird in nullter Ordnung von ϵ noch nichts ausgesagt. Um diese nun zu bestimmen, benötigen wir die Gleichung der nächst höheren Ordnung in ϵ . Daher setzen wir die Lösung $u_0(T_0, T_1)$ in

die Gleichung der ersten Ordnung von ϵ (3.7) ein

$$\begin{aligned} \frac{d^2 u_1(T_0, T_1)}{dT_0^2} + \omega_0^2 u_1(T_0, T_1) = \\ - \left[2i\omega_0 \frac{dA(T_1)}{dT_1} + 3A^2(T_1)A^*(T_1) \right] e^{i\omega_0 T_0} - A^3(T_1)e^{3i\omega_0 T_0} \\ - \left[-2i\omega_0 \frac{dA^*(T_1)}{dT_1} + 3A(T_1)(A^*(T_1))^2 \right] - (A^*(T_1))^3 e^{-3i\omega_0 T_0} . \end{aligned}$$

In der so erhaltenen Gleichung stehen die unbekannte Einhüllendenfunktion $A(T_1)$ und die erste Ordnung der Lösungsfunktion $u_1(T_0, T_1)$. Wir wollen hier, wie oben erwähnt, allerdings nur $A(T_1)$ festlegen. Dazu betrachten wir obige Gleichung genauer. Der Ausdruck der rechten Seite kann als antreibende Kraft für u_1 mit den Frequenzen ω_0 und $3\omega_0$ interpretiert werden. Auf der linken Seite steht die Gleichung eines harmonischen Oszillators mit der Resonanzfrequenz ω_0 . Die antreibende Kraft der Frequenz ω_0 würde also zu einer Resonanzkatastrophe führen. Da wir jedoch davon ausgehen, dass $u_1(T_0, T_1)$ endlich bleibt, muss der Anteil der Kraft entfallen, der für diesen Resonanzfall verantwortlich ist. Es wird daher folgende Bedingung gestellt

$$2i\omega_0 \frac{dA(T_1)}{dT_1} + 3A^2(T_1)A^*(T_1) = 0 .$$

Zur Lösung dieser Bedingung setzt man an

$$A(T_1) = \frac{1}{2}a(T_1)e^{i\phi(T_1)} ,$$

wobei $a(T_1)$ und $\phi(T_1)$ reell sind. Einsetzen dieses Ansatzes ergibt eine Gleichung für den Realteil

$$-\omega_0 a(T_1) \frac{d\phi(T_1)}{dT_1} + \frac{3}{8}a^3(T_1) = 0 \quad (3.8)$$

und eine Gleichung für den Imaginärteil

$$i\omega_0 \frac{da(T_1)}{dT_1} = 0 . \quad (3.9)$$

Aus Gleichung (3.9) liest man sofort ab, dass gilt

$$a(T_1) = a_0 = \text{const.}$$

Dies setzen wir in Gleichung (3.8) ein

$$\frac{d\phi(T_1)}{dT_1} = \frac{3a_0^2}{8\omega_0} .$$

Durch Aufintegrieren folgt die Lösung für $\phi(T_1)$

$$\phi(T_1) = \frac{3a_0}{8\omega_0}T_1 + \phi_0 ,$$

wobei ϕ_0 eine Integrationskonstante ist. Somit ist nun die Einhüllendenfunktion $A(T_1)$ bis auf die Konstanten a_0 und ϕ_0 festgelegt

$$\begin{aligned} A(T_1) &= \frac{1}{2}a(T_1)e^{i\phi(T_1)} \\ &= \frac{1}{2}a_0e^{i(\frac{3a_0^2}{8\omega_0}T_0+\phi_0)} . \end{aligned}$$

Die Lösungsfunktion in Nullter Ordnung lautet also

$$\begin{aligned} u_0(T_0, T_1) &= A(T_1)e^{i\omega_0 T_0} + A^*(T_1)e^{-i\omega_0 T_0} \\ &= \frac{1}{2}a_0e^{i(\frac{3a_0^2}{8\omega_0}T_0+\phi_0)}e^{i\omega_0 T_0} + \frac{1}{2}a_0e^{-i(\frac{3a_0^2}{8\omega_0}T_0+\phi_0)}e^{-i\omega_0 T_0} \\ &= a_0 \cos(\omega_0 T_0 + \frac{3a_0^2}{8\omega_0}T_1 + \phi_0) . \end{aligned}$$

Ein Vergleich der Lösung mit der aus der Krylov-Bogoliubov-Mitropolski-Methode ergibt, da $T_0 = t$ und $T_1 = \epsilon t$ gilt, dass beide Methoden zum selben Ergebnis führen.

Wir haben festgestellt, dass man für die Lösung in nullter Ordnung zwei Zeitskalen zu berücksichtigen hat. Die schnellere Zeitskala bestimmt die Grundschwingung, die langsamere Zeitskala die Einhüllende. Um die Lösung in n -ter Ordnung zu erhalten wird man folglich $n + 1$ Zeitskalen einführen müssen und den Ansatz

$$u(t) = \sum_{m=0}^{n+1} \epsilon^m u_m(T_0, \dots, T_{n+1})$$

benutzen. Dabei wird die jeweils schnellste Zeitskala die Trägerfunktion der jeweiligen Ordnung festlegen. Die jeweils langsameren Zeitskalen werden dann die Einhüllende bestimmen. Der offensichtliche Vorteil dieses Ansatzes ist, dass hier die Zeitskalen getrennt sind. Somit lässt sich festlegen, welche Ordnung man noch in der Lösung berücksichtigt. Weiterhin wurde die Lösungsfunktion nicht direkt durch das lineare Problem vorgegeben. Dadurch lässt sich die Multi-Skalen-Methode leicht auf andere Probleme übertragen.

Zusammenfassung:

Wir haben in diesem Abschnitt zwei Methoden zur Behandlung von nichtlinearen Problemen vorgestellt. In beiden Fällen traten folgende Auswirkung der Nichtlinearität auf:

- die Nichtlinearität erzeugt verschiedene Zeitskalen,
- man erhält eine auf der schnellsten Zeitskala variierende Trägerfunktion,
- auf den langsameren Zeitskalen findet man dann die langsam variierende Einhüllende der Trägerfunktion.

Der wichtige Unterschied zwischen diesen Methoden besteht darin, dass

- man für die Multi-Skalen-Methode keinen Ansatz, der direkt auf der Lösung des zugehörigen linearen Problems basiert, benötigt,
- der Ansatz der Multi-Skalen-Methode alleine auf den verschiedenen Zeitskalen basiert.

Dies ermöglicht die Anwendung der Multi-Skalen-Methode auf Probleme, deren lineare Lösung nicht direkt oder nur numerisch bekannt ist. Wir werden sie daher später verwenden, um die Einhüllende in einem Photonischen Kristall zu berechnen, dessen zugehöriges lineares Problem wir bereits im Rahmen der Bandstrukturrechnung in Kapitel 2 numerisch gelöst haben.

Kapitel 4

Pulspropagation

In Unterkapitel 4.1 wird dargelegt, was unter einem Puls zu verstehen ist und welche Eigenschaften er besitzt. Es wird eine mathematische Beschreibung eingeführt, die sich in den darauffolgenden Betrachtungen als sehr sinnvoll erweisen wird.

In Abschnitt 4.2 wird die im vorherigen Kapitel 3 vorgestellte Multi-Skalen-Methode auf die nichtlineare Wellengleichung in einem Photonischen Kristall angewendet. Wir werden darin die Zerlegung in Einhüllende und Trägerwelle, die wir in Unterkapitel 4.1 vorgestellt haben, wiederfinden. Aus diesem Grund wird genannte Vorgehensweise auch als Einhüllenden-Methode bezeichnet.

4.1 Grundlagen

In Kapitel 2 wurde die Wellengleichung aus den Maxwell-Gleichungen hergeleitet. Wir wollen diese nocheinmal eingehender betrachten. Dabei beschränken wir uns auf die E-Polarisation. Die Wellengleichung der angenommenen Polarisation lautet

$$\Delta_{\vec{r}} \vec{E}(\vec{r}, t) - \frac{\epsilon_p(\vec{r})}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{E}(\vec{r}, t)}{\partial t^2} = 0 .$$

Gehen wir zunächst vom einfachen Fall eines homogenen Mediums aus, so gilt $\epsilon_p(\vec{r}) = \epsilon = \text{const.}$. Mit dem Separationsansatz

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

trennt man das elektrische Feld in einen harmonischen Zeitanteil mit der Frequenz ω und einer Ortsfunktion $\varphi(\vec{r})$. Eingesetzt erhält man

$$\Delta_{\vec{r}} \varphi(\vec{r}) + \frac{\omega^2}{c^2} \epsilon \varphi(\vec{r}) = 0 .$$

Um diese Gleichung zu lösen, setzt man für die Ortsraumfunktion eine ebene Welle der Form

$$\varphi(\vec{r}) = \vec{E}_0 e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$$

an. Die Ausbreitungsrichtung der Welle wird dabei durch den Wellenvektor \vec{k} , die Polarisaton durch \vec{E}_0 festgelegt. Eingesetzt in obige Gleichung folgt eine Dispersionsrelation zwischen dem Wellenvektor \vec{k} und der Frequenz ω

$$\omega(|\vec{k}|) = \frac{c}{\sqrt{\epsilon}} |\vec{k}| = v_p |\vec{k}| ,$$

wobei die Phasengeschwindigkeit $v_p = c/\sqrt{\epsilon}$ eingeführt wurde. Wie wir im folgenden Unterkapitel sehen werden, ist in einem nichthomogenen Medium die Geschwindigkeit vom Wellenvektor bzw. der Frequenz abhängig.

Eine Lösung der Wellengleichung für das elektrische Feld lautet folglich

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \vec{E}_0 e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} e^{-i\omega(k)t} ,$$

dabei gilt $k = |\vec{k}|$. Die allgemeine Lösung der Wellengleichung setzt sich bekanntlich aus einer Superposition der einzelnen Teillösungen zusammen. Bei einer kontinuierlichen Wellenvektorverteilung besitzt die allgemeine Lösung die Form

$$\vec{\psi}(\vec{r}, t) = \int_{-\infty}^{\infty} d\vec{k} \vec{E}_0(\vec{k}) e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega(k)t)} .$$

Für eine linear polarisierte Welle mit Ausbreitungsrichtung entlang der z-Achse vereinfacht sich dies zu

$$\psi(z, t) = \int_{-\infty}^{\infty} dk A(k) e^{i(kz - \omega(k)t)} . \quad (4.1)$$

Für $t = 0$ ist die Ortsraumfunktion $\psi(z, 0)$ also die Fouriertransformierte der Amplitudenfunktion $A(k)$ des k -Raumes. Diese Feststellung wird uns nun zur Darstellung eines Pulses führen.

Puls:

Einen Puls erhält man, wenn die Verteilung $A(k)$ der Amplituden der Ebenen Wellen mit Wellenvektor k ein Maximum bei k_0 hat und dann für grosse $|k - k_0|$ auf Null abfällt. Da der Puls für $t = 0$ die Fouriertransformierte der Amplitudenfunktion darstellt, wird er eine ähnliche Form aufweisen. Dies ist in Abbildung (4.1) dargestellt. Es ist ferner ersichtlich, dass man um den Puls im Ortsraum eine Einhüllende legen kann (gestrichelte Linie). Dies wollen wir nun genauer untersuchen.

Die Amplitudenfunktion $A(k)$ gibt an, welchen Beitrag die ebene Welle des Wellenvektors k zu $\psi(z, t)$ hat. Da sich die Amplitudenfunktion eines

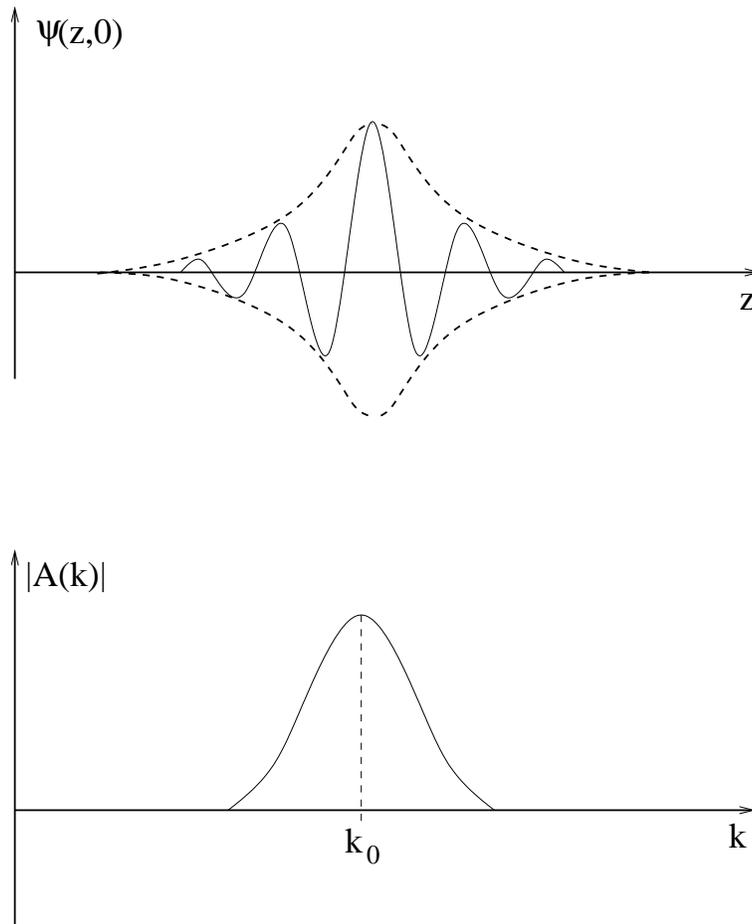


Abbildung 4.1: Bild des Pulses im Ortsraum (oben) und der Amplitudenfunktion im k -Raum (unten)

Pulses aber auf einen Bereich $|k - k_0| = \Delta k$ um k_0 beschränkt (siehe Abbildung (4.1)), werden nur die Wellen in diesem Bereich zu $\psi(z, t)$ beitragen. Auch die Frequenzen sind folglich auf einen Bereich $\Delta\omega$ um die zu k_0 korrespondierende Frequenz ω_0 konzentriert. Wir gehen nun davon aus, dass $\Delta k \ll k_0$ gilt. Darum kann man die Frequenzen $\omega(k)$ um den Punkt k_0 entwickeln und erhält eine Näherung für die Frequenzfunktion im Bereich $\Delta\omega$ um ω_0

$$\omega(k) = \omega_0 + \left. \frac{\partial\omega(k)}{\partial k} \right|_{k_0} (k - k_0) + O((k - k_0)^2) .$$

Wir gehen im Weiteren davon aus, dass die Terme ab der zweiten Ordnung vernachlässigt werden können, da die Phasengeschwindigkeit v_p im homogenen Medium nicht vom Wellenvektor abhängt und daher die Ableitungen von $\omega(k)$ nach k ab der zweiten Ordnung entfallen. Der Effekt der zweiten Ordnung wird später kurz aufgezeigt werden. Setzen wir dann die Näherung von $\omega(k)$ in Gleichung (4.1) ein, so folgt

$$\psi(z, t) \approx \int_{-\infty}^{\infty} dk A(k) \exp\left(i(kz - \omega_0 t - \left. \frac{\partial\omega(k)}{\partial k} \right|_{k_0} (k - k_0)t)\right) .$$

Um den Ausdruck zu vereinfachen fügen wir in der Exponentialfunktion die Terme $ik_0 z$ und $-ik_0 z$ ein. Dies ist möglich, da k_0 eine Konstante ist. Nun kann man die konstanten Terme in der Exponentialfunktion vor das Integral ziehen und erhält

$$\psi(z, t) \approx e^{i(k_0 z - \omega_0 t)} \int_{-\infty}^{\infty} dk A(k) \exp\left(i\left(z - \left. \frac{\partial\omega(k)}{\partial k} \right|_{k_0} t\right)(k - k_0)\right) .$$

Das Integral ist eine Funktion der Variablen $y = z - (\partial\omega/\partial k)t$. Man kann also die sogenannte Einhüllende schreiben als

$$E(y) = \int_{-\infty}^{\infty} dk A(k) \exp\left(iy(k - k_0)\right) . \quad (4.2)$$

Offensichtlich ist dabei der Term $(\partial\omega/\partial k)$ eine Geschwindigkeit. Wir setzen daher

$$v_g = \left. \frac{\partial\omega(k)}{\partial k} \right|_{k_0} , \quad (4.3)$$

wobei v_g als Gruppengeschwindigkeit bezeichnet wird. Für die Pulsfunktion ergibt sich somit

$$\psi(z, t) \approx e^{i(k_0 z - \omega_0 t)} E(z - v_g t) .$$

In dieser Schreibweise erkennt man, dass die Funktion $E(z - v_g t)$ als Amplitudenfunktion oder besser Einhüllende angesehen werden kann. Die Exponentialfunktion stellt dann die Trägerwelle dar. Die Einhüllende bewegt

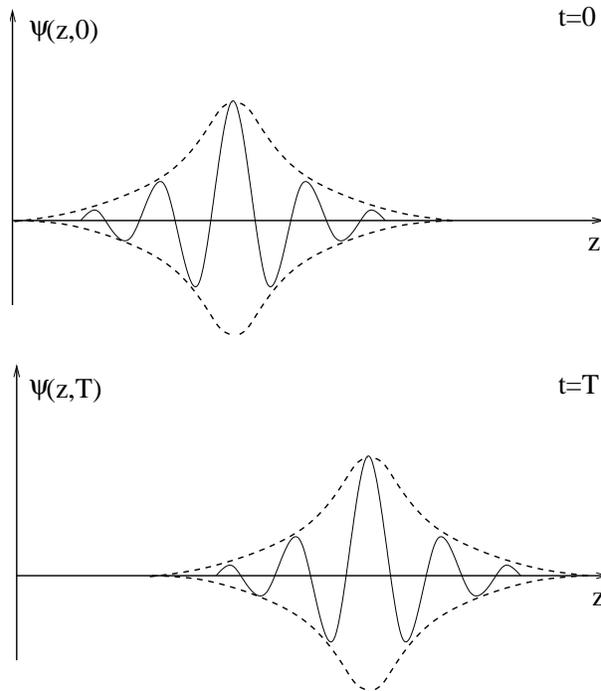


Abbildung 4.2: Bild des Pulses im Ortsraum für zwei verschiedene Zeiten

sich mit der Gruppengeschwindigkeit v_g entlang der z -Achse, während die Trägerwelle sich mit der Phasengeschwindigkeit v_p ausbreitet.

Wir wollen nun noch die Frage klären, wie die beiden Geschwindigkeiten zusammenhängen. Offensichtlich gilt, da $\omega(k) = v_p k$ und im allgemeinen $v_p = v_p(k)$ zu setzen ist, für die Gruppengeschwindigkeit aus Gleichung (4.3)

$$v_g(k) = \left. \frac{\partial v_p(k)}{\partial k} k \right|_{k_0} = v_p(k) + \left. \frac{\partial v_p(k)}{\partial k} \right|_{k_0} k .$$

Gruppen- und Phasengeschwindigkeit sind also nur gleich, wenn $v_p(k) = v_p = \text{const.}$. In obiger Herleitung zur Pulsfunktion $\psi(z, t)$ sind wir davon ausgegangen, dass v_p nicht vom Wellenvektor abhängt. Wir haben also den nicht dispersiven Fall betrachtet. Daher konnten wir bei der Näherung von $\omega(k)$ die Terme ab der zweiten Ordnung vernachlässigen und haben eine Einhüllendenfunktion $E(z - v_g t)$ erhalten, die sich mit einer konstanten Geschwindigkeit ausbreitet. Dies ist in Abbildung (4.2) dargestellt.

Die Dispersion $v_p(k) \neq v_p = \text{const.}$ hat zur Folge, dass wir die höheren Ordnungen in der Entwicklung von $\omega(k)$ mitberücksichtigen müssen. Dies führt dann zu weiteren zeitabhängigen Termen in der Variablen y aus Gleichung (4.2). Die Einhüllende wird sich also zeitlich verändern. Bei genauerer

Betrachtung stellt man fest, dass die Einhüllende mit der Zeit breiter wird und die Amplitude abnimmt. Physikalisch lässt sich dieser Effekt dadurch erklären, dass sich die beteiligten Wellen mit unterschiedlicher Geschwindigkeit ausbreiten und sie sich daher mit unterschiedlichen Geschwindigkeiten vom Resonanzpunkt wegbewegen. Die Trägerwelle bleibt indes unbeeinflusst. Alle Informationen über die Pulsausbreitung in dispersiven Medien sind also durch die Einhüllendenfunktion gegeben.

Zusammenfassung:

Wir haben in diesem Abschnitt folgendes hergeleitet:

- Ein Puls entsteht aus einer Überlagerung von Wellen in einem Frequenzbereich um ω_0 .
- Der Puls besitzt eine Trägerwelle mit dem Wellenvektor k_0 und der Frequenz ω_0 .
- Die Form der Trägerwelle wird durch eine Einhüllende beschrieben.
- Die Dispersion wirkt sich nur auf die Einhüllende aus.
- Die Einhüllende bewegt sich mit der Gruppengeschwindigkeit.
- Die Trägerwelle bewegt sich mit der Phasengeschwindigkeit.

4.2 Einhüllende im Photonischen Kristall

In Abschnitt 4.1 haben wir gesehen, dass sich ein Puls aus einer Trägerwelle und einer Einhüllenden zusammensetzt. Eine vergleichbare Darstellung hatten wir auch bei der Behandlung von nichtlinearen Gleichungen in Abschnitt 3.3. Es wird daher erwartet, dass sich die Dispersion (siehe vorherigen Abschnitt) und Nichtlinearität (siehe Kapitel 3) nur auf die Einhüllende, nicht aber auf die Trägerwelle auswirkt. Dies werden wir in der Lösung der nichtlinearen Wellengleichung im Photonischen Kristall wiederfinden, ebenso wie die Gruppengeschwindigkeit und Gruppengeschwindigkeitsdispersion aus Kapitel 2. Weiterhin haben wir in Kapitel 3 eine Methode zur Behandlung nichtlinearer Gleichungen kennengelernt. Diese Multi-Skalen-Methode soll nun zur Lösung der nichtlinearen Wellengleichung eines Photonischen Kristalls verwendet werden.

Die Wellengleichung in einem nichtlinearen Medium lautet für zwei Dimensionen in E-Polarisation

$$\left[\partial_x^2 + \partial_y^2 - \frac{\epsilon(x, y)}{c^2} \partial_t^2 \right] E(x, y, t) = \frac{4\pi}{c^2} P_{NL}(x, y, t) ,$$

wobei $P_{NL}(x, y, t)$ die nichtlinearen Polarisationssterme enthält. Unser Medium ist ein zweidimensionaler Photonischer Kristall. Dieser besteht, wie

aus Kapitel 2 bekannt, aus einer periodischen Anordnung von Zylindern eines dielektrischen Materials in z.B. Luft. Die Anordnung des dielektrischen Materials ist daher zentrosymmetrisch. Ferner sei das dielektrische Material selbst zentrosymmetrisch. Der Photonische Kristall ist in diesem Fall ein zentrosymmetrisches Medium. Wir wollen uns nun auf die führende Ordnung der nichtlinearen Terme beschränken. In Kapitel 3 haben wir bereits gezeigt, dass in einem zentrosymmetrischen Medium der $\chi^{(2)}$ -Term entfällt und der $\chi^{(3)}$ -Term führend ist, daher lautet unsere nichtlineare Polarisation, wobei THG vernachlässigt wird

$$P_{NL}(x, y, t) = \chi^{(3)}(x, y) |E(x, y, t)|^2 E(x, y, t) .$$

Der betrachtete Photonische Kristall hat weiterhin einer periodische, lineare Dielektrizitätsfunktion

$$\epsilon(x, y) = \epsilon_p(x, y) .$$

Die Wellengleichung für einen Photonischen Kristall lautet somit

$$\begin{aligned} \left[[\partial_x^2 + \partial_y^2] - \frac{\epsilon_p(x, y)}{c^2} \partial_t^2 \right] E(x, y, t) \\ = \frac{4\pi}{c^2} \chi^{(3)}(x, y) |E(x, y, t)|^2 E(x, y, t) . \end{aligned} \quad (4.4)$$

Die effektive Suszeptibilität $\chi^{(3)} \vec{E}^3$ sei dabei klein. Daher führen wir einen Entwicklungsparameter $\mu \ll 1$ ein, wobei das elektrische Feld von Ordnung μ oder kleiner ist.

Wir wollen nun die Multi-Skalen-Methode benutzen und definieren die neuen unabhängigen Variablen folgendermassen

$$\begin{aligned} x_i &= \mu^i x \\ y_i &= \mu^i y \\ t_i &= \mu^i t , \end{aligned}$$

dabei ist $\mu \ll 1$ der Entwicklungsparameter und $i = 0, 1, 2 \dots$ numeriert die unabhängigen Variablen. Durch die Einführung des Entwicklungsparameters kann man also mathematisch mehrere Skalen erzeugen und diese separat behandeln. Nach dieser separaten mathematischen Behandlung des Problems gelingt der Übergang zu dem eigentlichen physikalischen Problem dadurch, dass der Entwicklungsparameter $\mu \rightarrow 1$ gesetzt wird. Dadurch fallen die verschiedenen Skalen wieder zusammen und die separat berechneten Beiträge können aufsummiert werden. Dies werden wir in Kapitel 5 demonstrieren.

Die Ableitungen nach den ursprünglichen Variablen x, y, t kann nun in

die Ableitung nach den neuen Variablen x_i, y_i, t_i umgeschrieben werden

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial x} &= \frac{\partial}{\partial x_0} + \mu \frac{\partial}{\partial x_1} + \mu^2 \frac{\partial}{\partial x_2} + \dots \\ \frac{\partial}{\partial y} &= \frac{\partial}{\partial y_0} + \mu \frac{\partial}{\partial y_1} + \mu^2 \frac{\partial}{\partial y_2} + \dots \\ \frac{\partial}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial t_0} + \mu \frac{\partial}{\partial t_1} + \mu^2 \frac{\partial}{\partial t_2} + \dots\end{aligned}$$

Daraus kann nun die zweite Ableitung nach den ursprünglichen Variablen x, y, t berechnet werden, indem man obige Ausdrücke quadriert und nach den Ordnungen in μ sortiert. Es folgt

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2}{\partial x^2} &= \frac{\partial^2}{\partial x_0^2} + 2\mu \frac{\partial}{\partial x_0} \frac{\partial}{\partial x_1} + \mu^2 \left(2 \frac{\partial}{\partial x_0} \frac{\partial}{\partial x_2} + \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} \right) + \dots \\ \frac{\partial^2}{\partial y^2} &= \frac{\partial^2}{\partial y_0^2} + 2\mu \frac{\partial}{\partial y_0} \frac{\partial}{\partial y_1} + \mu^2 \left(2 \frac{\partial}{\partial y_0} \frac{\partial}{\partial y_2} + \frac{\partial^2}{\partial y_1^2} \right) + \dots \\ \frac{\partial^2}{\partial t^2} &= \frac{\partial^2}{\partial t_0^2} + 2\mu \frac{\partial}{\partial t_0} \frac{\partial}{\partial t_1} + \mu^2 \left(2 \frac{\partial}{\partial t_0} \frac{\partial}{\partial t_2} + \frac{\partial^2}{\partial t_1^2} \right) + \dots\end{aligned}$$

Für das elektrische Feld wird ebenfalls eine Entwicklung angesetzt mit

$$E(x, y, t) = \mu \left(e_1(x, y, t) + \mu e_2(x, y, t) + \dots \right).$$

Dabei wird davon ausgegangen, dass der Störterm $\chi^{(3)} \vec{E}^3$ klein ist, also das elektrische Feld von Ordnung μ oder kleiner ist. Die Entwicklungen e_i mit $i = 1, 2, \dots$ sind Funktionen der neuen Variablen. Einsetzen dieser Ansätze in die zweiten Ableitungen ergibt drei Gleichungen der Form

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2 E}{\partial \alpha^2} &= \mu \frac{\partial^2}{\partial \alpha_0^2} e_1 + \mu^2 \left(2 \frac{\partial}{\partial \alpha_0} \frac{\partial}{\partial \alpha_1} e_1 + \frac{\partial^2}{\partial \alpha_0^2} e_2 \right) \\ &+ \mu^3 \left(\frac{\partial^2}{\partial \alpha_0^2} e_3 + 2 \frac{\partial}{\partial \alpha_0} \frac{\partial}{\partial \alpha_1} e_2 + \left(2 \frac{\partial}{\partial \alpha_0} \frac{\partial}{\partial \alpha_2} + \frac{\partial^2}{\partial \alpha_1^2} \right) e_1 \right) + \dots, \quad (4.5)\end{aligned}$$

wobei die Abhängigkeiten nicht mehr explizit angegeben sind und $\alpha = x, y, t$.

Nun ist noch die Abhängigkeit der Funktionen ϵ_p und $\chi^{(3)}$ zu klären. Wir setzen an, dass beide Funktionen nur auf der Skala von x_0 und y_0 variieren und in anderen konstant sind. Es gilt also

$$\epsilon_p(x, y) = \epsilon_p(x_0, y_0) \text{ und } \chi^{(3)}(x, y) = \chi^{(3)}(x_0, y_0).$$

Dieser Ansatz ist dadurch zu erklären, dass die Variationen der Wellenlänge des Lichtes auf der Skala x_0, y_0 festgelegt werden. Dadurch müssen auch ϵ_p und $\chi^{(3)}$ auf dieser Skala variieren.

Setzen wir nun die Gleichungen (4.5) und den Ansatz für ϵ sowie $\chi^{(3)}$ in Gleichung (4.4) ein und sortieren nach Ordnungen des Entwicklungsparameters μ .

4.2.1 Ordnung μ^1 :

In erster Ordnung von μ erhält man eine lineare Gleichung, welche dem linearen Problem aus Kapitel 2 entspricht

$$\left[\left[\frac{\partial^2}{\partial x_0^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_0^2} \right] - \frac{\epsilon_p(x_0, y_0)}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t_0^2} \right] e_1 = 0 . \quad (4.6)$$

Aus Kapitel 2 wissen wir, dass die Lösung dieser Gleichung aus den Blochwellen $E_{m\vec{k}}(\vec{r})$ besteht. Wir wollen nun davon ausgehen, dass das einfallende Wellenfeld nur eine Blochwelle im Photonischen Kristall mit der Frequenz $\omega_{m\vec{k}}$ anregt. Daher können wir für die Lösung des Bandes m und des Wellenvektors \vec{k} einen Separationsansatz der Form

$$e_1(x, y, t) = a_{m\vec{k}}(x_1, x_2, \dots; y_1, y_2, \dots; t_1, t_2, \dots) E_{m\vec{k}}(x_0, y_0) e^{-i\omega_{m\vec{k}} t_0} \\ + a_{m\vec{k}}^*(x_1, x_2, \dots; y_1, y_2, \dots; t_1, t_2, \dots) E_{m\vec{k}}^*(x_0, y_0) e^{i\omega_{m\vec{k}} t_0} , \quad (4.7)$$

verwenden. Wie oben vorausgesetzt, haben wir nur eine angeregte Blochwelle und somit den nichtentarteten Fall. Dieser Ansatz trennt offensichtlich die verschiedenen Skalen. Dabei bildet $E_{m\vec{k}}(x_0, y_0) \exp(-i\omega_{m\vec{k}} t_0)$ die Trägerwelle auf der schnellsten Skala x_0, y_0, t_0 . Die Einhüllende $a_{m\vec{k}}$ hingegen ist auf der schnellsten Skala nicht vertreten, hängt also nur von den langsameren Skalen ab. Über die Einhüllende wird somit erst in höheren Ordnungen von μ eine Aussage getroffen werden können.

Unser Ansatz repräsentiert einen Puls, wie er im vorherigen Abschnitt beschrieben wurde. Es ist weiterhin ersichtlich, dass die Nichtlinearität erst auf den langsameren Skalen auftreten wird, also in der Einhüllenden. Die Trägerwelle wird davon unbeeinflusst bleiben.

4.2.2 Ordnung μ^2 :

In der zweiten Ordnung von μ ergibt sich die Gleichung

$$\left[\left[\frac{\partial^2}{\partial x_0^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_0^2} \right] - \frac{\epsilon_p(x_0, y_0)}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t_0^2} \right] e_2(x, y, t) = \\ - 2i \left[\left[\frac{\partial}{\partial x_0} \frac{\partial}{\partial x_1} + \frac{\partial}{\partial y_0} \frac{\partial}{\partial y_1} \right] - \frac{\epsilon_p(x_0, y_0)}{c^2} \frac{\partial}{\partial t_0} \frac{\partial}{\partial t_1} \right] e_1(x, y, t)$$

Wir führen nun folgende Schreibweisen ein

$$\vec{r}_i = \begin{pmatrix} x_i \\ y_i \end{pmatrix} , \quad \vec{\nabla}_i = \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x_i} \\ \frac{\partial}{\partial y_i} \end{pmatrix} \quad \text{mit } i = 0, 1, 2 .$$

In Analogie zum Operator $\hat{\Omega}(\vec{k})$ aus Kapitel 2 definieren wir den Operator $\hat{\Omega}_0 = -i\vec{\nabla}_0$. Einsetzen dieser neuen Variablen und der Lösung für $e_1(x, y, t)$

ergibt

$$\begin{aligned} & \left[\frac{\partial^2}{\partial x_0^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_0^2} \right] - \frac{\epsilon_p(\vec{r}_0)}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t_0^2} \Big] e_2(x, y, t) \\ & = -2i \left[(\hat{\Omega}_0 E_{m\vec{k}}(\vec{r}_0)) \cdot (\vec{\nabla}_1 a_{m\vec{k}}) + \right. \\ & \quad \left. \omega_{m\vec{k}} \frac{\epsilon_p(\vec{r}_0)}{c^2} E_{m\vec{k}}(\vec{r}_0) \left(\frac{\partial a_{m\vec{k}}}{\partial t_1} \right) \right] e^{-i\omega_{m\vec{k}} t_0} + c.c. , \quad (4.8) \end{aligned}$$

mit $c.c$ als das konjugiert Komplexe der rechten Seite. Wir haben in der Berechnung der Gruppengeschwindigkeit in Kapitel 2 festgestellt, dass in der zweiten Ordnung der Störungsrechnung die nicht betrachteten Bänder in die Blochwelle eingehen. Der Ansatz für e_2 lautet folglich

$$\begin{aligned} e_2(x, y, t) &= \sum_{l \neq m} b_l(x_1, x_2, \dots; y_1, y_2, \dots; t_1, t_2, \dots) E_{l\vec{k}}(\vec{r}_0) e^{-i\omega_{m\vec{k}} t_0} \\ &+ \sum_{l \neq m} b_l^*(x_1, x_2, \dots; y_1, y_2, \dots; t_1, t_2, \dots) E_{l\vec{k}}^*(\vec{r}_0) e^{i\omega_{m\vec{k}} t_0} . \end{aligned}$$

Zu bemerken ist, dass die angeregte Frequenz $\omega_{m\vec{k}}$ der Exponentialfunktion dabei gleich bleibt. Auch dies ist schon in Kapitel 2 gezeigt worden. Desweiteren wird eine neue zusätzliche Einhüllendenfunktion b_l eingeführt, welche ebenfalls unabhängig von der schnellsten Skala ist. Die Blochwellen $E_{l\vec{k}}$ variieren hingegen nur auf der schnellsten Skala \vec{r}_0 . Einsetzen dieses Ansatzes in Gleichung (4.8) ergibt eine Gleichung, welche man in zwei konjugiert komplexe Teilgleichungen aufspalten kann. Wir beschränken uns daher auf die Betrachtung einer der Teilgleichungen. Sie lautet

$$\begin{aligned} & \sum_{l \neq m} b_l \left[\left[\frac{\partial^2}{\partial x_0^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_0^2} \right] E_{l\vec{k}}(\vec{r}_0) - \frac{\epsilon_p(\vec{r}_0) \omega_{m\vec{k}}}{c^2} E_{l\vec{k}}(\vec{r}_0) \right] e^{-i\omega_{m\vec{k}} t_0} \\ & = -2i \left[(-i \vec{\nabla}_0 E_{m\vec{k}}(\vec{r}_0)) \cdot (\vec{\nabla}_1 a_{m\vec{k}}) + \right. \\ & \quad \left. \omega_{m\vec{k}} \frac{\epsilon_p(\vec{r}_0)}{c^2} E_{m\vec{k}}(\vec{r}_0) \left(\frac{\partial a_{m\vec{k}}}{\partial t_1} \right) \right] e^{-i\omega_{m\vec{k}} t_0} . \quad (4.9) \end{aligned}$$

Offensichtlich kann die Exponentialfunktion auf beiden Seiten gekürzt werden. Ferner ist bekannt, dass die Blochfunktion $E_{l\vec{k}}$ die lineare Gleichung

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial x_0^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_0^2} \right] - \frac{\epsilon_p(\vec{r}_0)}{c^2} \omega_{l\vec{k}}^2 \Big] E_{l\vec{k}}(\vec{r}_0) = 0 \quad (4.10)$$

erfüllt. Mit Hilfe von Gleichung (4.10) kann die Summe der zweiten Ableitungen nach dem Ort $\left[\frac{\partial^2}{\partial x_0^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_0^2} \right]$ von $E_{l\vec{k}}(\vec{r}_0)$ in Gleichung (4.9) ersetzt

werden. Gleichung (4.9) lautet damit

$$\begin{aligned} \sum_{l \neq m} b_l \left[\frac{\epsilon_p(\vec{r}_0)}{c^2} \omega_{l\vec{k}}^2 - \frac{\epsilon_p(\vec{r}_0)}{c^2} \omega_{m\vec{k}}^2 \right] E_{l\vec{k}}(\vec{r}_0) \\ = -2i \left[(-i\vec{\nabla}_0 E_{m\vec{k}}(\vec{r}_0)) \cdot (\vec{\nabla}_1 a_{m\vec{k}}) \right. \\ \left. + \omega_{m\vec{k}} \frac{\epsilon_p(\vec{r}_0)}{c^2} E_{m\vec{k}}(\vec{r}_0) \left(\frac{\partial a_{m\vec{k}}}{\partial t_1} \right) \right], \quad (4.11) \end{aligned}$$

wobei die Abhängigkeiten der Einhüllenden $a_{m\vec{k}}$ und b_l nicht mehr explizit angegeben sind. Diese Gleichung wird nun in zwei Schritten bearbeitet. Durch das Projizieren auf $E_{m\vec{k}}$ erhält man eine Bestimmungsgleichung für $a_{m\vec{k}}$ auf der Skala x_1, y_1, t_1 . Projiziert man auf ein $E_{n\vec{k}}$ mit $n \neq m$ so folgt eine Beziehung zwischen den Einhüllenden $a_{m\vec{k}}$ und b_l . Dabei werden wir uns der in Kapitel 2 eingeführten Schreibweise bedienen. Es wurde dort eingeführt

$$u_{m\vec{k}}(\vec{r}) = |m\vec{k}\rangle \quad \text{und} \quad \langle m\vec{k} | \epsilon_p(\vec{r}) | n\vec{k} \rangle = \delta_{mn}.$$

Dies muss hier nur leicht modifiziert werden. Für unseren Fall gilt

$$E_{m\vec{k}}(\vec{r}_0) = u_{m\vec{k}}(\vec{r}_0) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_0} = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_0} |m\vec{k}\rangle.$$

Projizieren auf $E_{m\vec{k}}$:

Wir multiplizieren Gleichung (4.11) von links mit $E_{m\vec{k}}^*$ und integrieren über die Brillouinzone. Somit erhalten wir in der neuen Notation

$$\begin{aligned} \sum_{l \neq m} \left[\frac{\omega_{m\vec{k}}^2}{c^2} - \frac{\omega_{l\vec{k}}^2}{c^2} \right] b_l \langle m\vec{k} | \epsilon_p(\vec{r}_0) | l\vec{k} \rangle \\ = -2i \left[\langle m\vec{k} | e^{-\vec{k} \cdot \vec{r}_0} \hat{\Omega}_0 e^{\vec{k} \cdot \vec{r}_0} | m\vec{k} \rangle \cdot (\vec{\nabla}_1 a_{m\vec{k}}) \right. \\ \left. + \frac{\omega_{m\vec{k}}}{c^2} \langle m\vec{k} | \epsilon_p(\vec{r}_0) | m\vec{k} \rangle \left(\frac{\partial a_{m\vec{k}}}{\partial t_1} \right) \right]. \end{aligned}$$

Aufgrund des Kroneckersymbols ist die linke Seite der Gleichung identisch Null. Ferner können wir den Ausdruck mit $\hat{\Omega}_0$ umschreiben, da man die Ableitung der Exponentialfunktion nach \vec{r}_0 ausführen kann und sich die beiden konjugiert komplexen Exponentialfunktionen dann aufheben

$$\langle m\vec{k} | e^{-\vec{k} \cdot \vec{r}_0} \hat{\Omega}_0 e^{\vec{k} \cdot \vec{r}_0} | m\vec{k} \rangle = \langle m\vec{k} | \hat{\Omega}_0(\vec{k}) | m\vec{k} \rangle,$$

wobei der Operator $\hat{\Omega}_0(\vec{k}) = -i (\vec{\nabla}_0 + i\vec{k})$ aus Kapitel 2 verwendet wurde. Mit diesen neuen Erkenntnissen vereinfacht sich die Gleichung zu

$$0 = \left[\langle m\vec{k} | \hat{\Omega}_0(\vec{k}) | m\vec{k} \rangle \cdot (\vec{\nabla}_1 a_{m\vec{k}}) + \frac{\omega_{m\vec{k}}}{c^2} \left(\frac{\partial a_{m\vec{k}}}{\partial t_1} \right) \right].$$

Mit Hilfe der in Kapitel 2 berechneten nichtentarteten Gruppengeschwindigkeit

$$\vec{v}_{m\vec{k}} = \frac{c^2}{\omega_{m\vec{k}}} \left\langle m\vec{k} \left| \hat{\Omega}_0(\vec{k}) \right| m\vec{k} \right\rangle$$

folgt eine Gleichung, welche die Einhüllende $a_{m\vec{k}}$ in der Skala x_1, y_1, t_1 beschreibt

$$\vec{v}_{m\vec{k}} \vec{\nabla}_1 a_{m\vec{k}} + \frac{\partial a_{m\vec{k}}}{\partial t_1} = 0 .$$

Diese Gleichung ist erfüllt, wenn die Variablen t_1 und x_1, y_1 als Linearkombination auftreten. Man kann statt dieser Variablen eine neue Variable \vec{z}_1 einführen mit

$$\vec{z}_1 = \vec{r}_1 - \vec{v}_{m\vec{k}} t_1 . \quad (4.12)$$

Dadurch wird impliziert, dass sich die Einhüllende $a_{m\vec{k}}$ auf der Skala x_1, y_1, t_1 mit der Gruppengeschwindigkeit $\vec{v}_{m\vec{k}}$ bewegt.

Wir haben also bis jetzt eine Trägerwelle und eine, sich mit der Gruppengeschwindigkeit bewegende, Einhüllende. Dies entspricht den im vorherigen Abschnitt untersuchten Fall eines Pulses im homogenen Medium ohne Dispersion. Wir können daraus also schliessen, dass in dieser Ordnung der Näherung weder Dispersion noch Nichtlinearitäten berücksichtigt sind.

Das neue Koordinatensystem \vec{z}_1 entspricht also einem mitbewegten Koordinatensystem, in welchem der Puls ruht. Um die zeitliche Veränderung der Einhüllenden im neuen System \vec{z}_1 zu erhalten, müssen wir die nächsthöhere Zeitskala t_2 miteinbeziehen. Dies wird uns dann zeigen, wie sich die laufende Einhüllende verändert, wenn Dispersion und Nichtlinearität auftreten. Das Verhalten der Einhüllenden $a_{m\vec{k}}$ auf den anderen Skalen wird offensichtlich durch die höheren Ordnungen von μ beschrieben.

Projizieren auf $E_{n\vec{k}}$ mit $n \neq m$:

Multiplizieren wir nun Gleichung (4.11) von links mit $E_{n\vec{k}}^*$, wobei $n \neq m$, so erhalten wir in der neuen Notation

$$\begin{aligned} & \sum_{l \neq m} \left[\frac{\omega_{m\vec{k}}^2}{c^2} - \frac{\omega_{l\vec{k}}^2}{c^2} \right] b_l \left\langle n\vec{k} \left| \epsilon_p(\vec{r}_0) \right| l\vec{k} \right\rangle \\ & = -2i \left[\left\langle n\vec{k} \left| \hat{\Omega}_0(\vec{k}) \right| m\vec{k} \right\rangle \cdot (\vec{\nabla}_1 a_{m\vec{k}}) + \frac{\omega_{m\vec{k}}}{c^2} \left\langle n\vec{k} \left| \epsilon_p(\vec{r}_0) \right| m\vec{k} \right\rangle \left(\frac{\partial a_{m\vec{k}}}{\partial t_1} \right) \right] . \end{aligned}$$

Die Summe über l wird beschränkt durch δ_{nl} . Ebenso entfällt der letzte Term auf der rechten Seite aufgrund des Kroneckersymbols. Die vereinfachte Gleichung lautet daher

$$\left[\frac{\omega_{m\vec{k}}^2}{c^2} - \frac{\omega_{n\vec{k}}^2}{c^2} \right] b_n = -2i \left\langle n\vec{k} \left| \hat{\Omega}_0(\vec{k}) \right| m\vec{k} \right\rangle \cdot (\vec{\nabla}_1 a_{m\vec{k}}) .$$

Diese Gleichung liefert also eine Beziehung zwischen den Einhüllendenfunktionen b_n und $a_{m\vec{k}}$. Die Beziehung wird in der nächsten Ordnung von μ verwendet werden um eine Bestimmungsgleichung für $a_{m\vec{k}}$ auf der Skala x_2, y_2, t_2 zu erhalten. Wir wollen sie daher noch nach b_n auflösen. Dabei ersetzen wir gleichzeitig die Ableitung $\vec{\nabla}_1$ durch die Ableitung nach der neuen Variablen z_1 , es gilt dabei $\vec{\nabla}_1 a_{m\vec{k}} = \vec{\nabla}_z a_{m\vec{k}}$. Dadurch können wir die im vorherigen Abschnitt gefundene Abhängigkeit der Variablen x_1, y_1, t_1 berücksichtigen. Die Beziehung lautet demnach mit expliziten Abhängigkeiten

$$\begin{aligned} & b_n(x_1, x_2, \dots; y_1, y_2, \dots; t_1, t_2, \dots) \\ &= \frac{2ic^2}{\omega_{n\vec{k}}^2 - \omega_{m\vec{k}}^2} \langle n\vec{k} | \hat{\Omega}_0(\vec{k}) | m\vec{k} \rangle \cdot (\vec{\nabla}_z a_{m\vec{k}}(z_1; x_2, \dots; y_2, \dots; t_2, \dots)) . \end{aligned} \quad (4.13)$$

4.2.3 Ordnung μ^3 :

In der dritten Ordnung von μ erhält man folgende Gleichung, wobei die Abhängigkeiten der Entwicklungskomponenten nicht mehr explizit angegeben sind

$$\begin{aligned} & \left[\left[\frac{\partial^2}{\partial x_0^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_0^2} \right] - \frac{\epsilon_p(\vec{r}_0)}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t_0^2} \right] e_3 \\ &= \frac{4\pi}{c^2} \chi^{(3)}(\vec{r}_0) \frac{\partial^2 e_1^3}{\partial t_0^2} - \left[\left[\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_1^2} \right] \right. \\ &+ 2 \left[\frac{\partial}{\partial x_0} \frac{\partial}{\partial x_2} + \frac{\partial}{\partial y_0} \frac{\partial}{\partial y_2} \right] - \frac{\epsilon_p(\vec{r}_0)}{c^2} \left[\frac{\partial^2}{\partial t_1^2} + 2 \frac{\partial}{\partial t_0} \frac{\partial}{\partial t_2} \right] \left. \right] e_1 \\ &- 2 \left[\left[\frac{\partial}{\partial x_0} \frac{\partial}{\partial x_1} + \frac{\partial}{\partial y_0} \frac{\partial}{\partial y_1} \right] - \frac{\epsilon_p(\vec{r}_0)}{c^2} \frac{\partial}{\partial t_0} \frac{\partial}{\partial t_1} \right] e_2 . \end{aligned} \quad (4.14)$$

In dieser Gleichung kommt, aufgrund der $\chi^{(3)}$ Nichtlinearität, eine höhere Potenz einer Entwicklungskomponente des Wellenfeldes, e_1^3 , vor. Bisher hatten wir nur Entwicklungskomponenten in erster Potenz. Die dritte Potenz liefert, wie in Kapitel 3 gezeigt, ein neues Wellenfeld mit der dreifachen Frequenz des anregenden Feldes $3\omega_{m\vec{k}}$. Diese Erzeugung der dritten Harmonischen wollen wir hier allerdings vernachlässigen. Wir beschränken uns also auf den durch den $\chi^{(3)}$ Term erzeugte intensitätsabhängigen Effekt

$$e_1(x, y, t) \approx 3 |a_{m\vec{k}}|^2 |E_{m\vec{k}}|^2 \left(a_{m\vec{k}} E_{m\vec{k}} e^{-i\omega_{m\vec{k}} t_0} + a_{m\vec{k}}^* E_{m\vec{k}}^* e^{i\omega_{m\vec{k}} t_0} \right) .$$

Wie oben erwähnt wollen wir aus Gleichung (4.14) eine neue Bestimmungsgleichung für die Einhüllende $a_{m\vec{k}}$ gewinnen. Diese werden wir analog zur zweiten Ordnung von μ durch die Projektion auf $E_{m\vec{k}}$ erhalten. Da wir

dabei für e_3 den Ansatz

$$e_3(x, y, t) = \sum_{h \neq m} c_h(x_1, x_2, \dots; y_1, y_2, \dots; t_1, t_2, \dots) E_{h\vec{k}} e^{-i\omega_{m\vec{k}} t_0} \\ + \sum_{h \neq m} c_h^*(x_1, x_2, \dots; y_1, y_2, \dots; t_1, t_2, \dots) E_{h\vec{k}}^* e^{i\omega_{m\vec{k}} t_0}$$

benutzen, wird die linke Seite von Gleichung (4.14) entfallen. Ferner wollen wir nur den intensitätsabhängigen Teil des $\chi^{(3)}$ Terms mitberücksichtigen, dies bedeutet, dass man die Gleichung wieder in zwei konjugiert komplexe Teilgleichungen aufspalten kann und wir daher nur eine der beiden zu betrachten brauchen. Bevor wir nun projizieren schreiben wir zunächst die rechte Seite, mit den Ansätzen für e_1 und e_2 , sowie der Näherung für e_1^3 aus

$$\frac{4\pi}{c^2} \chi^{(3)}(\vec{r}_0) 3 |a_{m\vec{k}}|^2 |E_{m\vec{k}}(\vec{r}_0)|^2 \left(-\omega_{m\vec{k}}^2 a_{m\vec{k}} E_{m\vec{k}}(\vec{r}_0) \right) e^{-i\omega_{m\vec{k}} t_0} \\ - \left[[\vec{\nabla}_1^2] + 2[i\hat{\Omega}_0 \cdot \vec{\nabla}_2] - \frac{\epsilon_p(\vec{r}_0)}{c^2} \left[\frac{\partial^2}{\partial t_1^2} - 2i\omega_{m\vec{k}} \frac{\partial}{\partial t_2} \right] \right] a_{m\vec{k}} E_{m\vec{k}}(\vec{r}_0) e^{-i\omega_{m\vec{k}} t_0} \\ - 2 \left[[i\hat{\Omega}_0 \cdot \vec{\nabla}_1] + i\omega_{m\vec{k}} \frac{\epsilon_p(\vec{r}_0)}{c^2} \frac{\partial}{\partial t_1} \right] \sum_{l \neq m} b_l E_{l\vec{k}}(\vec{r}_0) e^{-i\omega_{m\vec{k}} t_0} .$$

Multiplizieren wir nun die gesamte Gleichung von links mit $E_{m\vec{k}}^*$ und integrieren, so folgt

$$0 = - \omega_{m\vec{k}}^2 \frac{12\pi}{c^2} |a_{m\vec{k}}|^2 a_{m\vec{k}} \left\langle m\vec{k} \left| |E_{m\vec{k}}(\vec{r}_0)|^2 \chi^{(3)}(\vec{r}_0) \right| m\vec{k} \right\rangle \\ - \left\langle m\vec{k} | m\vec{k} \right\rangle \vec{\nabla}_1^2 a_{m\vec{k}} - 2 \left\langle m\vec{k} \left| i\hat{\Omega}_0(\vec{k}) \right| m\vec{k} \right\rangle \cdot \vec{\nabla}_2 a_{m\vec{k}} \\ + \frac{1}{c^2} \left\langle m\vec{k} \left| \epsilon_p(\vec{r}_0) \right| m\vec{k} \right\rangle \left[\frac{\partial^2}{\partial t_1^2} - 2i\omega_{m\vec{k}} \frac{\partial}{\partial t_2} \right] a_{m\vec{k}} \\ - 2 \sum_{l \neq m} \left\langle m\vec{k} \left| i\hat{\Omega}_0(\vec{k}) \right| l\vec{k} \right\rangle \cdot \vec{\nabla}_1 b_l .$$

Dabei entfällt, wie schon erwähnt, die linke Seite. Der letzte Term des $E_{l\vec{k}}$ Terms entfällt offensichtlich ebenfalls, da $l \neq m$. Ferner kann die Exponentialfunktion gekürzt werden.

Nun ersetzen wir b_l mit Hilfe von Gleichung (4.13). Damit wird nur $a_{m\vec{k}}$ als Einhüllendenfunktion vorkommen und wir können die Ableitungen nach \vec{r}_1 und t_1 durch die Ableitung nach der in Gleichung (4.12) definierten Variablen z_1 ersetzen. Es gilt dabei $d\vec{z}_1 = d\vec{r}_1$ und $d\vec{z}_1 = \vec{v}_{m\vec{k}} dt_1$. Man erhält

dann die Gleichung

$$\begin{aligned}
0 &= \alpha_{m\vec{k}} |a_{m\vec{k}}|^2 a_{m\vec{k}} - \left[\langle m\vec{k} | m\vec{k} \rangle \vec{\nabla}_z \cdot \vec{\nabla}_z - \frac{1}{c^2} (\vec{v}_{m\vec{k}} \cdot \vec{\nabla}_z) (\vec{v}_{m\vec{k}} \cdot \vec{\nabla}_z) \right] a_{m\vec{k}} \\
&- 2 \langle m\vec{k} | i\hat{\Omega}_0(\vec{k}) | m\vec{k} \rangle \cdot \vec{\nabla}_z a_{m\vec{k}} - 2i \frac{\omega_{m\vec{k}}}{c^2} \frac{\partial a_{m\vec{k}}}{\partial t_2} \\
&- 2 \sum_{l \neq m} \frac{2ic^2}{\omega_{l\vec{k}}^2 - \omega_{m\vec{k}}^2} \langle m\vec{k} | i\hat{\Omega}_0(\vec{k}) | l\vec{k} \rangle \cdot \vec{\nabla}_z \langle l\vec{k} | \hat{\Omega}_0(\vec{k}) | m\vec{k} \rangle \cdot (\vec{\nabla}_z a_{m\vec{k}}) ,
\end{aligned}$$

wobei im nichtlinearen Term

$$\alpha_{m\vec{k}} = -12\pi \frac{\omega_{m\vec{k}}^2}{c^2} \langle m\vec{k} | |E_{m\vec{k}}(\vec{r}_0)|^2 \chi^{(3)}(\vec{r}_0) | m\vec{k} \rangle$$

gesetzt wurde.

Nun ist es an der Zeit sich der Rechnungen aus Kapitel 2 zu erinnern. Dort haben wir einen Ausdruck für die Gruppengeschwindigkeit und die Gruppengeschwindigkeitsdispersion hergeleitet. Für die Gruppengeschwindigkeit hatten wir im nicht entarteten Fall folgende Gleichung erhalten

$$\vec{v}_{m\vec{k}} = \frac{c^2}{\omega_{m\vec{k}}} \langle m\vec{k} | \hat{\Omega}_0(\vec{k}) | m\vec{k} \rangle .$$

Setzen wir nun zunächst die Gruppengeschwindigkeit ein und sortieren wir nach Ableitungen. Dadurch erhalten wir

$$\begin{aligned}
0 &= \alpha_{m\vec{k}} |a_{m\vec{k}}|^2 a_{m\vec{k}} - 2i \frac{\omega_{m\vec{k}}}{c^2} \left(\vec{v}_{m\vec{k}} \cdot \vec{\nabla}_z + \frac{\partial}{\partial t_2} \right) a_{m\vec{k}} \\
&- \frac{2\omega_{m\vec{k}}}{c^2} \left[\frac{c^2}{2\omega_{m\vec{k}}} \langle m\vec{k} | m\vec{k} \rangle \vec{\nabla}_z^2 - \frac{1}{2\omega_{m\vec{k}}} \left(\vec{\nabla}_z \cdot \vec{v}_{m\vec{k}} \right)^2 \right. \\
&+ \left. \frac{2c^4}{\omega_{m\vec{k}}} \sum_{l \neq m} \frac{1}{\omega_{m\vec{k}}^2 - \omega_{l\vec{k}}^2} \langle m\vec{k} | \vec{\nabla}_z \cdot \hat{\Omega}_0(\vec{k}) | l\vec{k} \rangle \langle l\vec{k} | \vec{\nabla}_z \cdot \hat{\Omega}_0(\vec{k}) | m\vec{k} \rangle \right] \\
&* a_{m\vec{k}} .
\end{aligned}$$

Vergleicht man nun den Ausdruck in den eckigen Klammern mit dem Ausdruck für die Gruppengeschwindigkeitsdispersion aus Kapitel 2 so erkennt man, dass die Gleichung auch wie folgt geschrieben werden kann

$$\begin{aligned}
i \left[\vec{v}_{m\vec{k}} \cdot \vec{\nabla}_z + \frac{\partial}{\partial t_2} \right] a_{m\vec{k}} + \left[\vec{\nabla}_z \overleftrightarrow{M}_{m\vec{k}} \vec{\nabla}_z \right] a_{m\vec{k}} + \beta_{m\vec{k}} |a_{m\vec{k}}|^2 a_{m\vec{k}} \\
= 0 , \quad (4.15)
\end{aligned}$$

wobei die effektive Nichtlinearität $\beta_{m\vec{k}} = -2c^2 \alpha_{m\vec{k}} / \omega_{m\vec{k}}$ eingeführt wurde. Dies ist nun also die Gleichung für die Einhüllende $a_{m\vec{k}}$ in einem Photonischen Kristall in der Skala x_2, y_2, t_2 . Man erkennt, dass in dieser Skala die

Nichtlinearität und die Dispersion zum ersten mal vorkommen. Ferner ist in der Gleichung implizit die Abhängigkeit von $a_{m\vec{k}}$ in der Skala x_1, y_1, t_1 durch die Ableitung nach \vec{z}_1 angegeben.

Betrachten wir die einzelnen Terme nun genauer. Die Nichtlinearität wird offensichtlich durch den $\beta_{m\vec{k}}$ -Term dargestellt. Das Vorzeichen dieses Terms wird durch den Wert von $\beta_{m\vec{k}}$ und damit durch die Suszeptibilität $\chi^{(3)}$ bestimmt. Die Dispersion wird durch den Term mit der Gruppengeschwindigkeitsdispersion $\overleftrightarrow{M}_{m\vec{k}}$ dargestellt. Zu bemerken ist dabei, dass die Dispersion nur auf der Skala \vec{z}_1 wirkt, da sich die Ableitung nur auf diese Variable bezieht. Der mittlere Term ist auf die Skala von x_2, y_2, t_2 beschränkt.

Wir wollen nun davon ausgehen, dass sich die Einhüllende $a_{m\vec{k}}$ nicht auf der Skala \vec{r}_2 und t_3 verändert. Dies ist z.B. in der Nähe der Bandkante der Fall, da dort $|\vec{v}_{m\vec{k}}| \ll c$ gilt, wodurch der Term $\vec{v}_{m\vec{k}} \vec{\nabla}_2$ gegenüber ∂_{t_2} vernachlässigt werden kann. Wir setzen also die Abhängigkeiten der Einhüllenden fest zu $a_{m\vec{k}} = a_{m\vec{k}}(\vec{z}_1, t_2)$. Wir befinden uns damit in einem neuen System, welches sich aus einem mit der Gruppengeschwindigkeit $\vec{v}_{m\vec{k}}$ bewegten Koordinatensystem \vec{z}_1 und der Zeitskala t_2 zusammensetzt. Dieses neue System ist in Abbildung (4.3) schematisch dargestellt. Mit der Abhängigkeit von t_2 haben wir, da wir eine höhere Ordnung von μ betrachten mussten, die Nichtlinearität und Dispersion in dem jetzt betrachteten System \vec{z}_1, t_2 miteinbezogen. Unsere Gleichung (4.15) vereinfacht sich dann zu

$$\begin{aligned} i \left[\frac{\partial}{\partial t_2} \right] a_{m\vec{k}}(\vec{z}_1, t_2) + \left[\vec{\nabla}_z \overleftrightarrow{M}_{m\vec{k}} \vec{\nabla}_z \right] a_{m\vec{k}}(\vec{z}_1, t_2) \\ + \beta_{m\vec{k}} \left| a_{m\vec{k}}(\vec{z}_1, t_2) \right|^2 a_{m\vec{k}}(\vec{z}_1, t_2) = 0. \end{aligned} \quad (4.16)$$

Diese Gleichung hat die Form einer nichtlinearen Schrödingergleichung. Die Besonderheiten dieser Gleichung werden wir allerdings im Folgenden nicht behandeln, da wir uns zunächst auf den endlichen Kristall im linearen Fall beschränken. Es sei erwähnt, dass diese Gleichung solitäre Lösungen besitzt. Dies bedeutet, dass sich der Puls trotz Dispersion und Nichtlinearität nicht verformt. Die Behandlung dieses Falls wird Thema von Folgearbeiten sein.

Zusammenfassung

Wir haben die Multi-Skalen-Methode auf die nichtlinearen Wellengleichung eines Photonischen Kristalls angewendet. Dabei haben wir festgestellt:

- In Ordnung μ^1 : Die Trägerwelle in einem Photonischen Kristall ist die Blochwelle.
- Über die Einhüllende wird in dieser Ordnung noch nichts ausgesagt, daher benötigten wir die nächsten Ordnungen in μ .
- In Ordnung μ^2 : Die Einhüllende bewegt sich mit der Gruppengeschwindigkeit $\vec{v}_{m\vec{k}}$ aus Kapitel 2.

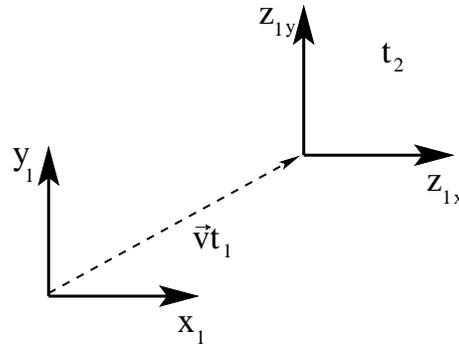


Abbildung 4.3: Neues Koordinatensystem

- Diese Feststellung ermöglichte es uns in ein mitbewegtes Koordinatensystem \vec{z}_1 zu transferieren.
- Um die zeitliche Veränderung in der Nähe der Bandkante in diesem neuen System zu erhalten, mussten wir die nächst höhere Zeitskala t_2 miteinbeziehen. Dies führte zur Ordnung μ^3 .
- In Ordnung μ^3 : Die Einhüllende erfüllt eine nichtlineare Schrödingergleichung, in welche Dispersion und Nichtlinearität eingehen.

Wir haben damit die Grundlagen geschaffen um einen Puls in einem Photonischen Kristall zu beschreiben. Im Folgenden Kapitel werden wir am Beispiel eines endlichen Photonischen Kristalls berechnen, wie der Puls innerhalb des Kristalls und das reflektierte sowie transmittierte Wellenfeld aussehen.

Kapitel 5

Endliche Photonische Kristalle

Nachdem wir in den vorangegangenen Kapiteln die Grundlagen zur Behandlung des endlichen Photonischen Kristalls gelegt haben, wird hier die Transmission durch einen endlichen Photonischen Kristall behandelt.

Im Unterkapitel 5.1 wird die Einhüllende im Photonischen Kristall im Allgemeinen aufgestellt. In den darauf folgenden Kapiteln wird die Einhüllende für die drei Fälle eines einfallenden Wellenfeldes mit der Frequenz in der Bandlücke, an der Bandkante und im Band aufgestellt. Damit sind die Voraussetzungen für die Behandlung des Transmissionsproblems geschaffen. Wir kennen dann das Wellenfeld im Photonischen Kristall und können dieses an die äusseren Wellenfelder ankoppeln. Dies wird in Abschnitt 5.5 durchgeführt. Das daraus entstehende Gleichungssystem wird im Unterkapitel 5.6 gelöst.

5.1 Allgemeine Betrachtungen

In diesem Abschnitt wollen wir genauer auf die im Photonischen Kristall laufende Wellen eingehen. Wir werden sehen, dass wir drei Fälle zu unterscheiden haben, welche dann in den folgenden Abschnitten behandelt werden.

Im vorherigen Kapitel hatten wir eine Entwicklung für das elektrische Wellenfeld in einem Photonischen Kristall aufgestellt

$$E(x, y, t) = \mu \left(e_1(x, y, t) + \mu e_2(x, y, t) + \dots \right) .$$

Ferner haben wir eine Gleichung für die Einhüllende $a_{m\vec{k}}$ in einem Photonischen Kristall hergeleitet. Ebenso ist uns aus diesem Kapitel bekannt, dass die Trägerwelle in einem Photonischen Kristall die Blochwelle ist.

Nach der mathematischen Behandlung in Abschnitt 4.2 wollen wir nun das physikalische Problem betrachten und setzen daher $\mu \rightarrow 1$. Wir beschränken uns im Folgenden auf die ersten beiden Terme in $E(x, y, t)$. Dabei bezeichnen wir die erste Ordnung e_1 als Primärteil, während die zweite Ordnung e_2 als Begleitteil bezeichnet wird. Durch den Übergang $\mu \rightarrow 1$ kehren wir wieder zu den Koordinaten x, y und der Zeit t zurück, die Indizes aus Kapitel 4 fallen also weg. Für unsere in Kapitel 4 neu definierte Variable gilt somit $\vec{z} = \vec{r} - \vec{v}_{m\vec{k}} t$, wodurch die Einhüllende mit Abhängigkeiten $a_{m\vec{k}}(\vec{z}, t)$ lautet. Der Ansatz für das elektrische Wellenfeld im Photonischen Kristall wird damit und mit der Beziehung (4.13) zu

$$E(\vec{r}, t) = a_{m\vec{k}}(\vec{z}, t) E_{m\vec{k}}(\vec{r}) e^{-i\omega_{m\vec{k}} t} + \sum_{l \neq m} \vec{\Gamma}_{\vec{k}}^{lm} E_{l\vec{k}}(\vec{r}) \vec{\nabla}_z a_{m\vec{k}}(\vec{z}, t) e^{-i\omega_{m\vec{k}} t}. \quad (5.1)$$

Die Ableitung nach \vec{z} kommt dabei aus der Beziehung (4.13), in welcher b_l durch $a_{m\vec{k}}$ ausgedrückt wird. Es wurde weiterhin

$$\vec{\Gamma}_{\vec{k}}^{lm} = \frac{2ic^2}{\omega_{l\vec{k}}^2 - \omega_{m\vec{k}}^2} \langle l\vec{k} | \hat{\Omega}(\vec{k}) | m\vec{k} \rangle$$

gesetzt. In zweiter Ordnung tritt folglich die Ableitung der Einhüllenden nach \vec{z} auf, sie verschwindet, wenn die Einhüllende eine Konstante bezüglich \vec{z} ist. Andererseits ist die zweite Ordnung nicht mehr zu vernachlässigen, wenn die Einhüllende stark ab- oder ansteigt.

Um die Welle im Photonischen Kristall festzulegen, muss die Einhüllende $a_{m\vec{k}}$ (bis auf Konstanten) bekannt sein. Die Einhüllende erfüllt, laut Kapitel 4, die nichtlineare Schroedingergleichung

$$i \left[\frac{\partial}{\partial t} \right] a_{m\vec{k}}(\vec{z}, t) + \left[\vec{\nabla}_z \overleftrightarrow{M}_{m\vec{k}} \vec{\nabla}_z \right] a_{m\vec{k}}(\vec{z}, t) + \beta_{m\vec{k}} |a_{m\vec{k}}(\vec{z}, t)|^2 a_{m\vec{k}}(\vec{z}, t) = 0.$$

Wir wählen einen Separationsansatz, welcher die explizite Zeitabhängigkeit von der Ortsvariablen \vec{z} trennt

$$a_{m\vec{k}}(\vec{z}, t) = \psi_{m\vec{k}}(\vec{z}) e^{-i\gamma t}.$$

Dabei müssen wir allerdings beachten, dass $\vec{z} = \vec{r} - \vec{v}_{m\vec{k}} t$ ebenso zeitabhängig ist, es also durch diese Ortsvariable noch eine implizite Zeitabhängigkeit gibt. Die Konstante γ in der Exponentialfunktion bezeichnen wir als *Differenzfrequenz*. Um die Rolle von γ genauer zu verstehen, setzen wir den Separationsansatz zunächst in Gleichung (5.1) ein. Es folgt

$$E(\vec{r}, t) = \left[\psi_{m\vec{k}}(\vec{z}) E_{m\vec{k}}(\vec{r}) + \sum_{l \neq m} \vec{\Gamma}_{\vec{k}}^{lm} \cdot \vec{\nabla}_z \psi_{m\vec{k}}(\vec{z}) E_{l\vec{k}}(\vec{r}) \right] e^{-i(\omega_{m\vec{k}} + \gamma)t}. \quad (5.2)$$

Offensichtlich setzt sich die Frequenz, der im Photonischen Kristall laufenden Welle, aus der Frequenz der angeregten Blochwelle $\omega_{m\vec{k}}$ und der Differenzfrequenz γ zusammen. Die Gesamtfrequenz $\omega = \omega_{m\vec{k}} + \gamma$ entspricht dabei der des einfallenden Wellenfeldes. Es findet also eine Frequenzaufspaltung statt in der γ die Differenz der Frequenz des einfallenden Wellenfeldes ω und der Frequenz der angeregten Blochwelle $\omega_{m\vec{k}}$ bildet. Daher bezeichnet man γ auch als Differenzfrequenz. Sie ist offenbar Null, wenn das einfallende Wellenfeld eine Frequenz im Band bzw. an der Bandkante besitzt.

Nach dieser Betrachtung der Differenzfrequenz, setzen wir den Separationsansatz in die nichtlineare Schrödingergleichung ein. Wir erhalten eine Gleichung für $\psi_{m\vec{k}}$, da sich die Exponentialfunktion kürzen lässt

$$\begin{aligned} \gamma \psi_{m\vec{k}}(\vec{z}) + \left[\vec{\nabla}_z \overleftrightarrow{M}_{m\vec{k}} \vec{\nabla}_z \right] \psi_{m\vec{k}}(\vec{z}) \\ + \beta_{m\vec{k}} \left| \psi_{m\vec{k}}(\vec{z}) \right|^2 \psi_{m\vec{k}}(\vec{z}) = 0 . \end{aligned}$$

Diese Gleichung wird nun weiter auf das betrachtete Problem zugeschnitten. Man kann drei Fälle unterscheiden, je nachdem welche Frequenz das einfallende Wellenfeld hat:

1. Frequenz liegt in der Bandlücke,
2. Frequenz liegt auf der Bandkante,
3. Frequenz liegt im Band.

Diese drei Fälle werden in den folgenden Unterkapiteln separat behandelt.

5.2 In der Bandlücke nahe einer Bandkante

Betrachten wir zunächst ein einfallendes Wellenfeld mit einer Frequenz ω in der Nähe der Bandlücke. In Abbildung (5.1) sind die Fälle einer Frequenz in der Nähe der oberen und unteren Bandkante dargestellt. Diese Frequenz ω muss, wie aus der vorherigen Betrachtung bekannt, folgendermassen zerlegt werden

$$\omega = \omega_{m\vec{k}} + \gamma .$$

Im Kristall wird also eine Blochwelle der Frequenz $\omega_{m\vec{k}}$ angeregt, während die Einhüllende die Differenzfrequenz γ aufnimmt. Das einfallende Wellenfeld wird dabei die nächst mögliche Blochwelle anregen. Diese Blochwelle hat daher eine Frequenz $\omega_{m\vec{k}}$, die sich an der zur anregenden Frequenz ω nächsten Bandkante befindet. Durch diese Bedingung lässt sich der Wellenvektor \vec{k} finden. Damit sind \vec{k} , $\omega_{m\vec{k}}$ sowie γ festgelegt.



Abbildung 5.1: Frequenzen in der Bandlücke nahe der unteren Bandkante ω_1 und oberen Bandkante ω_2

Nachdem wir wissen, wie \vec{k} , $\omega_{m\vec{k}}$ und γ aus der Frequenz des einfallenden Wellenfeldes zu bestimmen sind, wenden wir uns der Einhüllenden $\psi_{m\vec{k}}(\vec{z})$ zu. Dazu wird die lineare Gleichung

$$\gamma \psi_{m\vec{k}}(\vec{z}) + \vec{\nabla}_z \cdot \vec{M}_{m\vec{k}} \vec{\nabla}_z \psi_{m\vec{k}}(\vec{z}) + \beta_{m\vec{k}} |\psi_{m\vec{k}}(\vec{z})|^2 \psi_{m\vec{k}}(\vec{z}) = 0 \quad (5.3)$$

betrachtet. In einem zweidimensionalen Photonischen Kristall ist $\psi_{m\vec{k}}$ von zwei Komponenten abhängig. Bisher wurde die Lage der Koordinatensysteme z_1, z_2 bzw. x, y in Bezug auf die Ausbreitungsrichtung der Welle nicht festgelegt. Wir wählen daher die x -Achse parallel zur Ausbreitungsrichtung der Welle im Photonischen Kristall, also zu $\vec{v}_{m\vec{k}}$ bzw. \vec{k} . In Abbildung (5.2) sind dazu zwei Fälle dargestellt. Die beiden Ausbreitungsrichtungen sind dort auch in die Brillouinzone eingezeichnet. Sie liegen auf den Hauptsymmetrieachsen ΓX und ΓM . Da nun die x -Achse parallel zur Ausbreitungsrichtung liegt folgt, dass $z_2 = y$ und $z_1 = x - |\vec{v}_{m\vec{k}}|t$ gilt. Offensichtlich haben wir durch diese Wahl die Zeitabhängigkeit des bewegten Koordinatensystems auf eine Achse beschränkt. Da ein Photonischer Kristall, wie aus Kapitel 2 bekannt, aus einer periodischen Anordnung von Dielektrika besteht, werden wir dabei in y bzw. z_2 Richtung, also orthogonal zur Ausbreitungsrichtung, immer dieselbe Periodizität besitzen. Diese Periodizität muss folglich auch in der im Photonischen Kristall laufende Welle zum Ausdruck kommen. Wir wählen daher folgende Beschreibung

$$\psi_{m\vec{k}}(\vec{z}) = \sum_n f_{m\vec{k}}^{(n)}(z_1) e^{iG_n z_2},$$

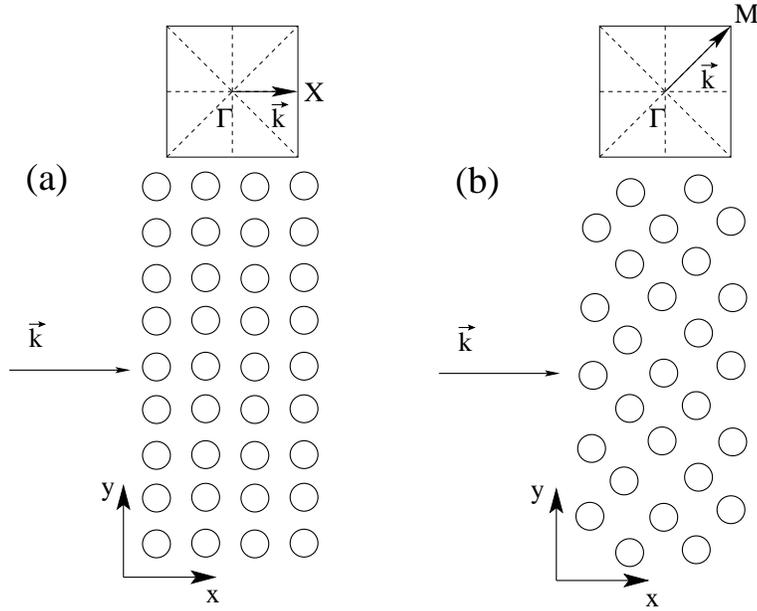


Abbildung 5.2: Ausbreitungsrichtung der Welle im Photonischen Kristall

mit $G_n = 2\pi n/a_y$ als jeweilige Wellenzahl in z_2 -Richtung. Da sich die Welle mit obiger Wahl der Koordinatensysteme nur in x -Richtung bewegt (was durch z_1 festgelegt ist), haben wir in y -Richtung stationäre Wellen unterschiedlicher Periodizitäten. Die Interpretation dieses Ansatzes ist einfach. Man hat die im Photonischen Kristall in x -Richtung laufende Welle, da sie eine Symmetrie orthogonal zur Ausbreitungsrichtung haben soll, einfach durch eine Überlagerung von in y -Richtung stationärer Wellen unterschiedlicher Periodizitäten dargestellt. Dabei steht a_y für die Periodizitätslänge in z_2 -Richtung. Aufgrund der Periodizität in diese Richtung sind nur ganzzahlige Vielfache von $2\pi/a_y$ als Wellenvektor in z_2 -Richtung möglich. Diese ganzzahligen Vielfache werden mit $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ numeriert. Wir bezeichnen n auch als Kanalzahl, daher ist die Summe über n die Summe über die N beteiligten Kanäle. Dies wird bei der Betrachtung der Anschlussbedingungen noch deutlicher werden. Einsetzen dieses Ansatzes in Gleichung (5.17) liefert

$$\sum_n \left[\gamma f_{m\vec{k}}^{(n)}(z_1) + M_{m\vec{k}}^{(11)} \frac{\partial^2}{\partial z_1^2} f_{m\vec{k}}^{(n)}(z_1) + 2iM_{m\vec{k}}^{(00)} G_n \frac{\partial}{\partial z_1} f_{m\vec{k}}^{(n)}(z_1) - M_{m\vec{k}}^{(22)} G_n^2 f_{m\vec{k}}^{(n)}(z_1) + \beta_{m\vec{k}} \left(\sum_l \sum_j f_{m\vec{k}}^{(l)}(z_1) (f_{m\vec{k}}^{(l-j)}(z_1))^* f_{m\vec{k}}^{(n-j)}(z_1) \right) \right] e^{iG_n z_2} = 0,$$

wobei $M_{\vec{m}\vec{k}}^{(11)}, M_{\vec{m}\vec{k}}^{(22)}$ und $M_{\vec{m}\vec{k}}^{(00)}$ die Komponenten der symmetrischen 2×2 -Matrix $M_{\vec{m}\vec{k}}$ und l sowie j Kanalzahlen sind. Die Gleichung ist nur dadurch zu erfüllen, dass der Ausdruck in den eckigen Klammern für alle n Null ist. Der nichtlineare Term bewirkt offensichtlich eine Kopplung der Kanäle bzw. $f_{\vec{m}\vec{k}}^{(n)}$. Dieser Effekt konnte in der Betrachtung des eindimensionalen Falls von Sipe [6] nicht beobachtet werden. Da die Nichtlinearität die Kanäle koppelt, wird das Problem sehr komplex, wir wollen uns daher in dieser Arbeit auf den linearen Fall beschränken und setzen $\beta_{\vec{m}\vec{k}} = 0$. Die zu lösende Gleichung lautet dann:

$$0 = \gamma f_{\vec{m}\vec{k}}^{(n)}(z_1) + M_{\vec{m}\vec{k}}^{(11)} \frac{\partial^2}{\partial z_1^2} f_{\vec{m}\vec{k}}^{(n)}(z_1) + 2i M_{\vec{m}\vec{k}}^{(00)} G_n \frac{\partial}{\partial z_1} f_{\vec{m}\vec{k}}^{(n)}(z_1) - M_{\vec{m}\vec{k}}^{(22)} G_n^2 f_{\vec{m}\vec{k}}^{(n)}(z_1). \quad (5.4)$$

Dies ist eine lineare Differentialgleichung 2. Ordnung. Wir setzen daher an

$$f_{\vec{m}\vec{k}}^{(n)}(z_1) = A e^{i\xi^{(n)} z_1}.$$

Da sich die durch das einfallende Wellenfeld angeregte Blochwelle in dem hier betrachteten Fall an der Bandkante befindet, können wir $M_{\vec{m}\vec{k}}^{(11)} \neq 0$ voraussetzen und erhalten, wenn wir den Ansatz einsetzen

$$\left(\xi^{(n)}\right)^2 + \left(\frac{2M_{\vec{m}\vec{k}}^{(00)} G_n}{M_{\vec{m}\vec{k}}^{(11)}}\right) \xi^{(n)} - \left(\frac{\gamma - M_{\vec{m}\vec{k}}^{(22)} G_n^2}{M_{\vec{m}\vec{k}}^{(11)}}\right) = 0.$$

Betrachten wir zunächst den Spezialfall von $n = 0$. In diesem Fall hat die Gleichung, da $G_0 = 0$ ist, die Lösung

$$\xi_{1/2}^{(0)} = \pm \sqrt{\frac{\gamma}{M_{\vec{m}\vec{k}}^{(11)}}}.$$

Offensichtlich entscheidet das Vorzeichen von $\gamma/M_{\vec{m}\vec{k}}^{(11)}$, ob es eine propagierende Lösung oder eine exponentiell ab- oder ansteigende Lösung gibt. Betrachten wir daher die Vorzeichen von γ und $M_{\vec{m}\vec{k}}^{(11)}$. Da die Frequenz des einfallenden Wellenfeldes in der Nähe einer Bandkante sein soll, gibt es nur zwei Fälle zu betrachten. Diese sind in Abbildung (5.1) graphisch dargestellt.

1. Die einfallende Frequenz ω liegt in der Nähe der unteren Bandkante. Dann muss die Differenzfrequenz γ positiv sein, da die Frequenz $\omega_{\vec{m}\vec{k}}$ der angeregten Blochwelle kleiner ist als die des einfallenden Wellenfeldes. Das Band hat an der unteren Bandkante eine negative Krümmung. Da wir die Achsen so gewählt haben, dass die x -Achse in Propagationsrichtung zeigt, gibt $M_{\vec{m}\vec{k}}^{(11)}$ die Krümmung an und hat daher eine

negativen Vorzeichen. Die Lösungen $\xi_{1/2}^{(0)}$ sind imaginär. Wir haben also eine exponentiell gedämpfte und eine exponentiell anwachsende Lösung.

2. Die einfallende Frequenz ω liegt in der Nähe der oberen Bandkante. Dann hat die Differenzfrequenz einen negativen Wert. Die Krümmung des Bandes der oberen Bandkante ist positiv und daher hat auch $M_{m\vec{k}}^{(11)}$ einen positiven Vorzeichen. Die Lösungen $\xi_{1/2}^{(0)}$ sind auch in diesem Fall imaginär.

Wir haben somit für den Fall $n = 0$ in der Bandlücke, wie man erwarten konnte, keine propagierende Lösungen.

Kehren wir nun zur allgemeinen quadratische Gleichung für $\xi^{(n)}$ zurück. Diese hat die zwei Lösungen

$$\xi_{1/2}^{(n)} = -\frac{M_{m\vec{k}}^{(00)}}{M_{m\vec{k}}^{(11)}} G_n \pm \sqrt{\frac{(M_{m\vec{k}}^{(00)} M_{m\vec{k}}^{(00)} - M_{m\vec{k}}^{(22)} M_{m\vec{k}}^{(11)}) G_n^2 + \gamma M_{m\vec{k}}^{(11)}}{M_{m\vec{k}}^{(11)} M_{m\vec{k}}^{(11)}}}. \quad (5.5)$$

Es gibt für den Fall $n \neq 0$ einen reellen Term. Die Wurzel kann aber immer noch imaginär sein. Das Vorzeichen der Wurzel hängt zum einen von der Determinante der Gruppengeschwindigkeitsdispersion und zum anderen von der Differenzfrequenz ab. Die Determinante hat an der Bandkante einen positiven Wert. Da unter der Wurzel die negative Determinante steht und wir aus der vorherigen Betrachtung wissen, dass $\gamma M_{m\vec{k}}^{(11)}$ ein negatives Vorzeichen hat, ist der Wurzel Ausdruck imaginär und der Wert um so grösser, je grösser G_n ist. Wir erhalten also auch im allgemeinen Fall nur nicht-propagierende Lösungen. Der Beitrag dieser nichtpropagierenden Lösungen zur Transmission wird daher von der Länge des betrachteten Photonischen Kristalls abhängen. Die allgemeine Lösung für die Einhüllende in Ausbreitungsrichtung lautet

$$f_{m\vec{k}}^{(n)}(z_1) = A_n e^{i\xi_1^{(n)} z_1} + B_n e^{i\xi_2^{(n)} z_1}. \quad (5.6)$$

Wir haben hiermit die Welle im Photonischen Kristall bis auf die Konstanten A_n und B_n festgelegt. Die Konstanten werden durch die Anschlussbedingungen bestimmt.

Um die Anschlussbedingungen benutzen zu können müssen wir in das Koordinatensystem x, y übergehen. Wir befinden uns zur Zeit im bewegten Koordinatensystem mit $z_1 = x - |\vec{v}_{m\vec{k}}| t$ und $z_2 = y$. Den Übergang erreichen wir durch das Ersetzen der Komponenten von \vec{z} . Wir betrachten in diesem Abschnitt ein einfallendes Wellenfeld dessen Frequenz ω sich in der Bandlücke nahe der Bandkante befindet. Dabei wurde festgestellt, dass die Blochwelle an der nächstgelegenen Bandkante angeregt wird. An einer

Bandkante ist die Gruppengeschwindigkeit, wie aus Kapitel 2 bekannt, Null. Wir können daher schreiben

$$|\vec{v}_{m\vec{k}}| = 0 \rightarrow \vec{z} = \vec{r}.$$

Damit lautet die komplette Ortsraumfunktion der Einhüllenden $\psi_{m\vec{k}}$ mit $r_1 = x$ und $r_2 = y$ folgendermassen

$$\psi_{m\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_n \left(A_n e^{i\xi_1^{(n)}x} + B_n e^{i\xi_2^{(n)}x} \right) e^{iG_n y}.$$

Der Charakter der Ortsraumfunktion wird durch $\xi^{(n)}$ bestimmt. Es sind reine exponentiell an- bzw. absteigende Lösungen oder eine Mischung aus periodischen und exponentiellen Lösungen denkbar. Dabei bleibt die Ortsraumfunktion jedoch fest, sie bewegt sich also örtlich gesehen nicht.

Somit setzt sich die im Photonischen Kristall laufende Welle bei einem einfallenden Wellenfeld der Frequenz ω in der Bandlücke in erster Ordnung e_1 aus einer Blochwelle der Frequenz $\omega_{m\vec{k}}$ an der Bandkante als Trägerwelle und einer im Ortsraum stehenden Funktion, welche die Differenzfrequenz γ aufnimmt, als Einhüllende zusammen. Die Formel für die Einhüllende lautet in dem hier betrachteten Fall also

$$\begin{aligned} E(\vec{r}, t) = & \left[\sum_n \left(A_n e^{i\xi_1^{(n)}x} + B_n e^{i\xi_2^{(n)}x} \right) e^{iG_n y} E_{m\vec{k}}(\vec{r}) \right. \\ & \left. + \sum_{l \neq n} E_{l\vec{k}}(\vec{r}) \vec{\Gamma}_{\vec{k}}^{lm} \cdot \vec{\nabla}_r \sum_n \left(A_n e^{i\xi_1^{(n)}x} + B_n e^{i\xi_2^{(n)}x} \right) e^{iG_n y} \right] \\ & * e^{-i(\omega_{m\vec{k}} + \gamma)t}. \end{aligned}$$

Zusammenfassung

Fassen wir unser bisheriges Vorgehen nocheinmal kurz zusammen:

- Ein einfallendes Wellenfeld mit einer Frequenz in der Bandlücke nahe einer Bandkante regt eine Blochwelle an dieser Bandkante an.
- Die Blochwelle dient als Trägerwelle des sich im Photonischen Kristall ausbreitenden Wellenfeldes.
- Die Differenzfrequenz zwischen der Frequenz der Blochwelle und der des einfallenden Wellenfeldes wird dabei von der Einhüllenden aufgenommen.
- Nach diesen Vorbetrachtungen wurde eine allgemeine Gleichung für die Welle im Photonischen Kristall aufgestellt.
- Dabei erfüllt die Einhüllende eine nichtlineare Schrödingergleichung.

- Ein Separationsansatz für die Einhüllende lieferte eine Gleichung für den Ortsanteil $\psi_{m\vec{k}}$ im bewegten Koordinatensystem.
- Die Ortsraumfunktion $\psi_{m\vec{k}}$ konnten wir aufgrund der Symmetrie des Photonischen Kristalls in einen periodischen Anteil in Richtung der y -Achse und einen Anteil $f_{m\vec{k}}^{(n)}$ entlang der Ausbreitungsrichtung, welche als x -Achse festgelegt wurde, zerlegen. Aus der Gleichung der Ortsraumfunktion wurde somit eine nichtlineare Gleichung für $f_{m\vec{k}}^{(n)}$.
- Die nichtlineare Gleichung für $f_{m\vec{k}}^{(n)}$ zeigte, dass die Nichtlinearität verschiedene Kanäle bzw. $f_{m\vec{k}}^{(n)}$ koppelt. Die Lösung der nichtlinearen Gleichung ist daher sehr aufwendig. Wir haben uns für die weiteren Betrachtungen auf das lineare Problem beschränkt, in welchem diese Kopplung nicht auftritt.
- Die lineare Gleichung für $f_{m\vec{k}}^{(n)}$ konnten wir lösen und erhielten so die Lösungsfunktion (5.6), in welcher nur A_n und B_n unbekannt sind. Diese Unbekannten werden erst durch die Anschlussbedingungen festgelegt.
- Um eine Anschlussbedingungen der Welle im Photonischen Kristall mit äusseren Wellenfeldern verwenden zu können, musste die Einhüllende in das unbewegte Laborsystem x, y zurücktransformiert werden. Dabei stellte sich heraus, dass für den in diesem Abschnitt behandelten Fall $\vec{z} = \vec{r}$ gilt, da $|\vec{v}_{m\vec{k}}| = 0$ ist.

Das weitere Vorgehen wird darin bestehen, die noch unbekanntenen Konstanten A_n und B_n mit Hilfe der Anschlussbedingungen zu bestimmen.

5.3 An der Bandkante

Betrachten wir nun den Fall einer Frequenz ω , welche genau an der Bandkante liegt. Die angeregte Blochwellen wird also dieselbe Frequenz haben, wie das einfallende Wellenfeld, daher gilt

$$\omega = \omega_{m\vec{k}} \Rightarrow \gamma = 0 .$$

Dies ist der einzige Unterschied zu der vorherigen Betrachtung. Die Rechnungen aus dem vorherigen Kapitel können daher übernommen werden, wenn man $\gamma = 0$ setzt. Aus Gleichung (5.5) folgt dann

$$\xi_{1/2}^{(n)} = -\frac{M_{m\vec{k}}^{(00)}}{M_{m\vec{k}}^{(11)}} G_n \pm G_n \sqrt{\frac{(M_{m\vec{k}}^{(00)} M_{m\vec{k}}^{(00)} - M_{m\vec{k}}^{(22)} M_{m\vec{k}}^{(11)})}{M_{m\vec{k}}^{(11)} M_{m\vec{k}}^{(11)}}} .$$

Betrachten wir zunächst den Spezialfall $n = 0$. Es gilt dann

$$\xi_{1/2}^{(0)} = 0 .$$

Die Einhüllende in x -Richtung $f_{m\vec{k}}$ besteht in diesem Fall aus zwei Konstanten A_0 und B_0 . Wir haben daher eine propagierende Lösung für den Kanal $n = 0$. Für den Fall $n \neq 0$ ist die Wurzel imaginär. Der Wurzelausdruck bewirkt daher das exponentielle An- bzw. Abfallen der Lösungsfunktion. Wir haben also keine propagierende Lösung für $n \neq 0$. Ob die Kanäle zur Transmission beitragen liegt folglich an der Länge des Photonischen Kristalls. Die allgemeine Lösung für die Ortsraumfunktion der Einhüllenden im Photonischen Kristall für eine Frequenz an der Bandkante hat die Form

$$\psi_{m\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_n \left(A_n e^{i\xi_1^{(n)}x} + B_n e^{i\xi_2^{(n)}x} \right) e^{iG_n y} .$$

Da die Gruppengeschwindigkeit an der Bandkante verschwindet und wir keine Differenzfrequenz haben, ist die Einhüllende $a_{m\vec{k}}(\vec{z}, t) = \psi_{m\vec{k}}(\vec{r})$ eine statische Funktion in Raum und Zeit. Die Blochwellen laufen dabei allerdings mit der Phasengeschwindigkeit, da sie die Trägerwellen bilden. Der Unterschied in den beiden Geschwindigkeiten ist durch die Dispersion zu beruhen, welche hier durch den Tensor der Gruppengeschwindigkeitsdispersion dargestellt wird. Die Auswirkungen der Dispersion wurden in Kapitel 4 besprochen.

Der Ausdruck für die im Photonischen Kristall laufende Welle entspricht dem aus dem vorherigen Abschnitt für $\gamma = 0$:

$$\begin{aligned} E(\vec{r}, t) = & \left[\sum_n \left(A_n e^{i\xi_1^{(n)}x} + B_n e^{i\xi_2^{(n)}x} \right) e^{iG_n y} E_{m\vec{k}}(\vec{r}) \right. \\ & + \sum_{l \neq m} E_{l\vec{k}}(\vec{r}) \vec{\Gamma}_{\vec{k}}^{lm} \cdot \vec{\nabla}_r \sum_n \left(A_n e^{i\xi_1^{(n)}x} + B_n e^{i\xi_2^{(n)}x} \right) e^{iG_n y} \left. \right] \\ & * e^{-i\omega_{m\vec{k}}t} . \end{aligned}$$

5.4 Im Band

Betrachten wir nun den letzten Fall. Das einfallende Wellenfeld hat eine Frequenz ω , welche im Band liegt. Wiederum werden wir keine Differenzfrequenz erhalten, es gilt

$$\omega = \omega_{m\vec{k}} \Rightarrow \gamma = 0 .$$

Wir können somit die Rechnung aus dem vorherigen Abschnitt übernehmen. Die Gleichung für die Einhüllende im bewegten Koordinatensystem ist für $\beta_{m\vec{k}} = 0$

$$\vec{\nabla}_z \overleftrightarrow{M}_{m\vec{k}} \vec{\nabla}_z \psi_{m\vec{k}}(\vec{z}) = 0 .$$

Da im Band die Gruppengeschwindigkeit nicht immer Null ist, kann die Transformation in den Ortsraum x, y nicht aus den vorherigen Abschnitten übernommen werden. Wir legen die x -Achse und die z_1 -Achse der beiden Koordinatensysteme parallel zur Ausbreitungsrichtung der Welle im Photonischen Kristall. Dies hat dann zur Folge, dass $z_1 = x - |\vec{v}_{m\vec{k}}|t$ und $z_2 = y$ gilt. Es gibt allerdings eine Periodizität in y -Richtung, die sich auch in der Welle zeigen wird. Der Ansatz für die Funktion $\psi_{m\vec{k}}$ im bewegten Koordinatensystem z_1, z_2 lautet folgendermassen

$$\psi_{m\vec{k}}(\vec{z}) = \sum_n f_{m\vec{k}}^{(n)}(z_1) e^{iG_n z_2} .$$

Es wird dabei über alle beteiligten Kanäle n summiert. Jeder Kanal besitzt eine Wellenzahl $G_n = 2\pi n/a_y$. Setzen wir dies in die Gleichung der Einhüllende ein, erhalten wir nach dem Kürzen der Exponentialfunktion eine Differentialgleichung der Form

$$0 = M_{m\vec{k}}^{(11)} \frac{\partial^2}{\partial z_1^2} f_{m\vec{k}}^{(n)}(z_1) + 2iM_{m\vec{k}}^{(00)} G_n \frac{\partial}{\partial z_1} f_{m\vec{k}}^{(n)}(z_1) - M_{m\vec{k}}^{(22)} G_n^2 f_{m\vec{k}}^{(n)}(z_1) .$$

Diese Differentialgleichung wird mit dem Ansatz

$$f_{m\vec{k}}^{(n)}(z_1) = A e^{i\xi^{(n)} z_1}$$

auf eine quadratische Gleichung gebracht, welche die zwei Lösungen

$$\xi_{1/2}^{(n)} = -\frac{M_{m\vec{k}}^{(00)}}{M_{m\vec{k}}^{(11)}} G_n \pm G_n \sqrt{\frac{(M_{m\vec{k}}^{(00)} M_{m\vec{k}}^{(00)} - M_{m\vec{k}}^{(22)} M_{m\vec{k}}^{(11)})}{M_{m\vec{k}}^{(11)} M_{m\vec{k}}^{(11)}}}$$

besitzt. Der Fall $n = 0$ liefert auch hier eine propagierende Lösung. Für $n \neq 0$ gibt es nun ebenfalls propagierende Lösungen, da die Determinante jetzt nicht immer einen positiven Wert hat und somit die Wurzel nicht immer imaginär ist. Die allgemeine Lösung für die Funktion im bewegten Koordinatensystem lautet hier

$$\psi_{m\vec{k}}(\vec{z}) = \sum_n \left(A_n e^{i\xi_1^{(n)} z_1} + B_n e^{i\xi_2^{(n)} z_1} \right) e^{iG_n z_2} .$$

Die Konstanten A_n und B_n müssen durch die Anschlussbedingungen festgelegt werden. Transformieren wir in das unbewegte Koordinatensystem x, y , indem wir \vec{z} durch seine Definition ersetzen, so folgt

$$\psi_{m\vec{k}}(\vec{r} - \vec{v}_{m\vec{k}} t) = \sum_n \left(A_n e^{i\xi_1^{(n)}(x - |\vec{v}_{m\vec{k}}| t)} + B_n e^{i\xi_2^{(n)}(x - |\vec{v}_{m\vec{k}}| t)} \right) e^{iG_n y} .$$

Offensichtlich lässt sich nun der zeitabhängige Anteil nicht mehr vom ortsabhängigen trennen. In der im Photonischen Kristall laufenden Welle besitzt sowohl die Blochwelle als auch die Einhüllende $\psi_{m\vec{k}}$ einen Zeitanteil. Die beiden Zeitanteile können nun nicht mehr zu einem zusammengefasst werden, was sich auf die Anschlussbedingungen auswirken wird. Eine genauere Behandlung dieses Falles wird Thema von Folgearbeiten sein.

5.5 Anschlussbedingungen

In diesem Abschnitt wollen wir uns nun um die Anschlussbedingungen für den Fall eines einfallenden Wellenfeldes mit einer Frequenz in der Bandlücke kümmern. Dazu betrachten wir zunächst einmal den Versuchsaufbau. Wir haben einen endlichen Photonischen Kristall, auf den ein senkrecht einlaufendes Wellenfeld trifft, siehe Abbildung (5.3). Ein endlicher Photonischer Kristall ist nichts anderes, als eine Beugungsgitter. Aus der Wellenoptik ist bekannt, dass sich beim reflektierten und transmittierten Wellenfeld konstruktive und destruktive Interferenzen ausbilden. Diese Interferenzen liegen aufgrund der Periodizität des Beugungsgitters in bestimmten, diskretisierten Ausbreitungsrichtungen. Wir bezeichnen die Ausbreitungsrichtungen der konstruktiven Interferenzen als Kanäle.

In einem Photonischen Kristall treten Bragg-Streuungen auf, die sich dann überlagern und ein Wellenfeld bilden. Durch diese Überlagerungen erhält man im unendlichen Photonischen Kristall (ohne Nichtlinearität und Dispersion) die Bandstruktur. Die Blochwellen sind daher die durch die Bragg-Streuungen entstehenden Wellenfelder für eine bestimmte Ausbreitungsrichtung \vec{k} und Frequenz $\omega_{m\vec{k}}$. Wenn die Dispersionseffekte und Nichtlinearitäten berücksichtigt werden, muss man die Blochwelle der betrachteten Ausbreitungsrichtung und Frequenz als Trägerwelle betrachten. Die Amplitude der Trägerwelle wird durch die Einhüllende variiert. In dieser Einhüllenden werden Nichtlinearität und Dispersion mitberücksichtigt. Ferner besitzt die Einhüllende eine Diskretisierung orthogonal zur Ausbreitungsrichtung der Blochwellen. Diese stimmt mit der des transmittierten und reflektierten Wellenfeldes überein. Die diskretisierten Komponenten der Einhüllenden haben wir daher als Kanäle bezeichnet.

In einem endlichen Photonischen Kristall werden aber durch die Ankopplung mit dem Aussenraum weitere Effekte hinzukommen. Man kann sich dies folgendermassen vorstellen. Ein Teil des auf den Photonischen Kristall auftreffenden Wellenfeldes wird reflektiert, der andere Teil dringt in den Photonischen Kristall ein. Der Teil, welcher in den Photonischen Kristall eingedrungen ist, wird auf der anderen Seite teilweise reflektiert und transmittiert werden. Wir werden auf diese Art und Weise eine transmittierte Welle erhalten. Im Photonischen Kristall ergibt sich nun eine Überlagerung der eindringenden und am anderen Ende teilweise reflektierten Wellenfelder. Dieser Effekt wird durch unseren Ansatz der Einhüllenden berücksichtigt. Da die Einhüllende aus einer vorwärts bzw. rückwärts laufenden Welle besteht, welche mit den Konstanten A_n und B_n gewichtet werden. Mit diesen Konstanten ist Ankopplung an die äusseren Wellenfelder möglich. Die Einhüllende ist also das Bindeglied zwischen den einfallenden, reflektierten und transmittierten Wellenfeldern. Wir werden die Analogie zur Beugung an einem Gitter später noch einmal aufgreifen.

Wir legen unser Koordinatensystem x, y , das Laborsystem, ausserhalb

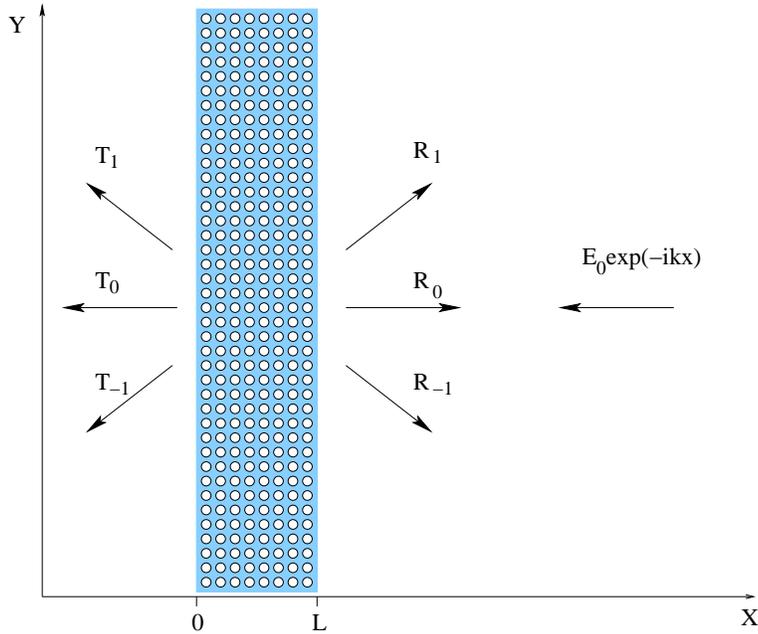


Abbildung 5.3: Bild des Versuchsaufbaus

des Photonischen Kristalls so, dass die x -Achse parallel zu der Einfallsrichtung des auf den Photonischen Kristall treffenden Wellenfeldes liegt. Weiterhin betrachten wir den senkrechten Einfall, wodurch die y -Achse parallel zur Kristallkante ist. Die Periodizität des Photonischen Kristalls entlang der y -Achse wird für uns im Folgenden von besonderem Interesse sein. Ferner soll das einfallende Wellenfeld nach links laufen und an der Stelle $x = L$ auf den Photonischen Kristall treffen. Das einfallende Wellenfeld mit der Wellenzahl $k = \omega/c$ hat also die Form

$$E_{\text{in}} = E_0 e^{-ik(x-L)} e^{i\omega t} . \quad (5.7)$$

Das einfallende Wellenfeld wird weiter die Periodizität des Photonischen Kristalls in y -Richtung sehen, welche sich nach der Wechselwirkung mit diesem in reflektieren und transmittieren Wellenfeld zeigen wird (Bragg-Streuung). Diese Betrachtung der Periodizität orthogonal zur Ausbreitungsrichtung hatten wir in den vorherigen Abschnitten für die Welle im Photonischen Kristall ebenfalls durchgeführt. Dort wurde einen Wellenvektor in y -Richtung definiert mit

$$G_n = \frac{2\pi}{a_y} n \quad \text{mit} \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots .$$

Dabei ist n die sogenannte Kanalzahl. Die Interpretation war folgende. Man hat die y -Periodizität der in x -Richtung laufenden Welle dadurch erreicht,

dass man sie in y -Richtung aus einer Überlagerung von stationären Wellen dargestellt hat.

Wir müssen dies für die Wellenfelder ausserhalb des Photonischen Kristalls nun auch einführen. Die Ausbreitungsrichtung wird durch den Wellenvektor angegeben. Wir kennen die y -Komponente des Wellenvektors für jeden Kanal n und definieren daraus einen Wellenvektor für die transmittierte und reflektierte Welle

$$\vec{K}_n^{(t)} = \begin{pmatrix} k_n^{(t)} \\ G_n \end{pmatrix}, \quad \vec{K}_n^{(r)} = \begin{pmatrix} k_n^{(r)} \\ G_n \end{pmatrix}.$$

Dabei gilt es zu berücksichtigen, dass wir durch den Betrag des Wellenvektors des einfallenden Wellenfeldes, also der Wellenzahl k , auch die Beträge der Wellenvektoren des transmittierten und reflektierten Wellenfeldes festgelegt haben. Es gilt also

$$k = \left| \vec{K}_n^{(t)} \right| = \left| \vec{K}_n^{(r)} \right|.$$

Der Betrag des Wellenvektors darf sich also ausserhalb des Photonischen Kristalls nicht ändern. Wir können darüber die jeweilige x -Komponente finden, indem wir das Betragsquadrat bilden und nach dieser auflösen. Es folgt somit

$$(k_n^{(t)})^2 = k^2 - G_n^2, \quad (k_n^{(r)})^2 = k^2 - G_n^2.$$

Offensichtlich muss hier zur Vorzeichenwahl physikalisch argumentiert werden. Die Ausbreitungsrichtung der transmittierten Welle in x -Richtung ist dieselbe wie die der einfallenden Welle, daher gilt

$$k_n^{(t)} = -\sqrt{k^2 - G_n^2} \quad \text{für } k \leq G_n; \quad k_n^{(t)} = -i\sqrt{-k^2 + G_n^2} \quad \text{für } k > G_n. \quad (5.8)$$

Die Ausbreitungsrichtung der reflektierten Welle ist der der einfallenden entgegengerichtet, daher wechselt das Vorzeichen und es gilt

$$k_n^{(r)} = \sqrt{k^2 - G_n^2} \quad \text{für } k \leq G_n; \quad k_n^{(r)} = i\sqrt{-k^2 + G_n^2} \quad \text{für } k > G_n. \quad (5.9)$$

Es ist also durchaus möglich, dass man einen imaginären Wert für den Wellenvektor in x -Richtung erhält. Dies würde bedeuten, dass man eine in x -Richtung exponentiell gedämpfte Welle hätte, die sich aber in y -Richtung ausdehnt. Bei senkrechtem Einfall liegt die y -Achse parallel zur Kristallkante und das Phänomen wird als Oberflächenwelle bezeichnet. Es ist ferner ersichtlich, dass für $n = 0$ die reflektierte und transmittierte Wellenfeld parallel zu der Achse des einfallenden Wellenfeldes liegen.

Wir können nun die transmittierte Welle durch alle Kanal n folgendermassen beschreiben

$$E_T(\vec{r}) = \sum_n T_n e^{i\vec{K}_n^{(t)} \cdot \vec{r}} e^{i\omega t}. \quad (5.10)$$

Für die reflektierte Welle muss beachtet werden, dass diese an der Stelle $x = L$ beginnt. Daher lautet der Ansatz

$$E_R(\vec{r}) = \sum_n R_n e^{i\vec{K}_n^{(r)} \cdot (\vec{r} - L \binom{1}{0})} e^{i\omega t} . \quad (5.11)$$

Wir erkennen an diesen Ausdrücken, dass eine Überlagerung von n Wellen unterschiedlicher Ausbreitungsrichtungen vorliegt. Diese Ausbreitungsrichtungen sind durch G_n diskretisiert. Es gibt also kein kontinuierliches Spektrum der Wellenvektoren. Wir bezeichnen die möglichen Ausbreitungsrichtungen daher als Kanäle und n damit als Kanalzahl. Da der senkrechte Einfall betrachtet wird sind die Richtungsvektoren $\vec{K}_n^{(t)}$ und $\vec{K}_n^{(r)}$ spiegel-symmetrisch zur Richtung für $n = 0$ angeordnet. Die Koeffizienten T_n und R_n geben dabei die Stärke bzw. Amplitude der einzelnen Kanäle an. Sie gilt es durch die Anschlussbedingungen zu bestimmen, um das transmittierte und reflektierte Wellenfeld festzulegen. Das Ergebnis der so aufgestellten Gleichungen erinnert an die Intensitätsverteilung eines Beugungsbildes, in dem die Intensitätsmaxima kein kontinuierliches Spektrum bilden, sondern durch die Interferenzbedingung diskretisiert sind. Dieser Vergleich ist nicht verwunderlich, da das Experiment nichts anderes als ein Beugungsexperiment ist.

Wir wollen uns an dieser Stelle in Erinnerung rufen, dass wir in der Einhüllenden im Photonischen Kristall die Koeffizienten A_n und B_n ebenfalls durch die Anschlussbedingungen bestimmen wollten. Die Koeffizienten A_n und B_n geben die Amplituden der Wellenfelder an, aus denen sich die Einhüllende zusammensetzt. Sie spielen also dieselbe Rolle, wie die Koeffizienten T_n und R_n .

Die Anschlussbedingungen und die beteiligten Wellenfelder sollen nun aufgestellt werden. Wir teilen die Wellenfelder in drei Bereiche auf. Auf der rechten Seite des Photonischen Kristalls befindet sich das einfallende und reflektierte Wellenfeld. Die Wellengleichung lautet in diesem Bereich

$$E_r(\vec{r}, t) = E_{in}(\vec{r}, t) + E_R(\vec{r}, t) .$$

Das transmittierte Wellenfeld befindet sich auf der linken Seite des Photonischen Kristalls und man kann die Wellengleichung auf dieser Seite darstellen mit

$$E_l(\vec{r}, t) = E_T(\vec{r}, t) .$$

Das Wellenfeld im Photonischen Kristall hatten wir in den vorherigen Unterkapiteln für drei Fälle hergeleitet. Wir beschränken uns hier auf den Fall der Bandlücke. Die Gleichung für das Wellenfeld in einem Photonischen Kristall hat die Form

$$E_{PC}(\vec{r}, t) = \left[\psi_{m\vec{k}}(\vec{r}) E_{m\vec{k}}(\vec{r}) + \sum_{l \neq m} \bar{\Gamma}_{\vec{k}}^{lm} \cdot \left[\vec{\nabla}_r \psi_{m\vec{k}}(\vec{r}) \right] E_{l\vec{k}}(\vec{r}) \right] e^{-i(\omega_{m\vec{k}} + \gamma)t} .$$

Nun ist noch den Übergang an der Übergangsstelle $x = 0$ für die beiden Wellenfunktionen E_1 und E_{PC} sowie den Übergang an der Stelle $x = L$ für E_{T} und E_{PC} festzulegen. Aus der Elektrodynamik ist bekannt, dass beim Übergang des elektrischen Feldes von einem Medium in ein anderes Material die Tangentialkomponenten der E- und H-Felder erhalten bleiben. Die Wellenfunktionen innerhalb und ausserhalb des Photonischen Kristalls müssen an den Übergangsstellen dieselben Werte haben, es gilt also

$$E_1(x = 0, y; t) = E_{\text{PC}}(x = 0, y; t) \quad (5.12)$$

$$E_{\text{T}}(x = L, y; t) = E_{\text{PC}}(x = L, y; t) . \quad (5.13)$$

Mathematisch betrachtet bedeutet dies, dass die Funktion an den Stellen $x = 0$ und $x = L$ stetig ist. Wir wollen das magnetische Feld nun mit Hilfe der Maxwellgleichungen durch das elektrische Feld ausdrücken, da wir uns in unserer Betrachtung auf dieses beschränkt haben. Für beide Felder können wir Zeit- und Ortsanteil durch einen Produktansatz trennen. Dabei schwingen beide Felder mit derselben Frequenz, haben also beide denselben zeitlichen Term $\exp(i\omega t)$. Für die Ortsfunktionen der Felder in zusätzlich nichtmagnetischen Medien mit $\mu = 1$ gilt daher

$$i\omega\mu_0\vec{H}(\vec{r}) = \vec{\nabla} \times \vec{E}(\vec{r}) .$$

Die Tangentialkomponente des magnetischen Feldes ist proportional zur Ableitung des elektrischen Feldes nach x . Die weiteren Anschlussbedingungen lauten somit

$$\partial_x E_1(x = 0, y; t) = \partial_x E_{\text{PC}}(x = 0, y; t) \quad (5.14)$$

$$\partial_x E_{\text{T}}(x = L, y; t) = \partial_x E_{\text{PC}}(x = L, y; t) . \quad (5.15)$$

Mathematisch folgt daraus, dass wir eine in x -Richtung stetig differenzierbare Funktion haben. Wir sind bei dieser Herleitung davon ausgegangen, dass sich Zeit- und Ortsanteil der betrachteten Felder H und E separieren lassen und die Zeitabhängigkeit daher nur in der Exponentialfunktion $\exp(i\omega t)$ auftritt. Dies ist für eine Welle in einem Photonischen Kristall bei einer Frequenz im Band für das E -Feld nicht mehr der Fall, wie wir aus den vorherigen Betrachtungen wissen. Dieser Fall muss daher noch eingehender untersucht werden. Wir beschränken uns auf den Fall in der Bandlücke.

Bevor wir nun an das Lösen der Anschlussbedingungen gehen, wollen wir noch eine Vereinfachung durchführen. Die Zeitabhängigkeit der Wellenfunktionen entfällt, da sich die Exponentialfunktionen und mit ihnen die Zeitabhängigkeit aus den Anschlussbedingungen kürzen.

Wir setzen für das Wellenfeld wie folgt an

$$E_{\text{PC}}(x=0, y) = \psi_{m\vec{k}}(x=0, y)E_{m\vec{k}}(x=c, y) + \sum_{l \neq m} \left[\vec{\Gamma}_{\vec{k}}^{lm} \cdot \vec{\nabla}_r \psi_{m\vec{k}}(x=0, y) \right] E_{l\vec{k}}(x=c, y) .$$

Dabei ist c die Konstante, welche die Kristallgrenze in Bezug auf die Einheitszelle beschreibt. Die Summe geht dabei über alle nicht betrachteten Bänder, nicht über die Kanäle. Setzen wir die Gleichungen für die Wellenfelder in die Anschlussbedingung (5.12) ein, so erhalten wir

$$\sum_n T_n e^{iG_n y} = \psi_{m\vec{k}}(0, y)E_{m\vec{k}}(c, y) + \sum_{l \neq m} \left[\vec{\Gamma}_{\vec{k}}^{lm} \cdot \vec{\nabla}_r \psi_{m\vec{k}}(0, y) \right] E_{l\vec{k}}(c, y) .$$

Es ist von Vorteil, wenn die Summe über die Kanalzahlen n auf der linken Seite der Gleichung wegfällt. Dazu bedient man sich der Beziehung

$$\frac{1}{a_y} \int_0^{a_y} dy e^{i(G_n - G_p)y} = \delta_{np} \quad \text{mit } G_\nu = \frac{2\pi}{a_y} \nu ; \quad \nu = n, p , \quad (5.16)$$

indem man auf beiden Seiten mit $\exp(-iG_p y)$ multipliziert und anschließend integriert. Dadurch erhält man, für $n = p$ folgende Gleichung

$$T_n = \frac{1}{a_y} \int_0^{a_y} dy e^{-iG_n y} \left(\psi_{m\vec{k}}(0, y)E_{m\vec{k}}(c, y) + \sum_{l \neq m} \left[\vec{\Gamma}_{\vec{k}}^{lm} \cdot \vec{\nabla}_r \psi_{m\vec{k}}(0, y) \right] E_{l\vec{k}}(c, y) \right) .$$

Die allgemeine Form für die Einhüllende $\psi_{m\vec{k}}$ lautet für die hier betrachteten Fälle, in denen $\vec{r} = \vec{z}$ gilt, nach Kapitel 5.2

$$\psi_{m\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_j f_{m\vec{k}}^{(j)}(x) e^{iG_j y} . \quad (5.17)$$

Dabei wird über die Kanäle summiert, wir haben also auch die Kanalzahl j zu berücksichtigen. Setzen wir diese Form in die zu lösende Gleichung ein, so kann man diese zu

$$T_n = \sum_j \left[f_{m\vec{k}}^{(j)}(0) \frac{1}{a_y} \int_0^{a_y} dy e^{i(G_j - G_n)y} E_{m\vec{k}}(c, y) + \sum_{l \neq m} \left[\vec{\Gamma}_{\vec{k}}^{lm} \cdot \left(\frac{\partial_x f_{m\vec{k}}^{(j)}(0)}{iG_j} f_{m\vec{k}}^{(j)}(0) \right) \right] \frac{1}{a_y} \int_0^{a_y} dy e^{i(G_j - G_n)y} E_{l\vec{k}}(c, y) \right]$$

vereinfachen. Diesen Ausdruck verkürzen wir noch durch die Definition

$$D_{m\vec{k}}^{(j-n)} = \frac{1}{a_y} \int_0^{a_y} dy e^{i(G_j - G_n)y} E_{m\vec{k}}(c, y). \quad (5.18)$$

Damit lautet die aus Anschlussbedingung (5.12) gewonnene Gleichung

$$T_n = \sum_j \left[D_{m\vec{k}}^{(j-n)} f_{m\vec{k}}^{(j)}(0) + \left(\sum_{l \neq m} D_{l\vec{k}}^{(j-n)} \vec{\Gamma}_{\vec{k}}^{lm} \right) \cdot \left(\begin{array}{c} \partial_x f_{m\vec{k}}^{(j)}(0) \\ iG_j f_{m\vec{k}}^{(j)}(0) \end{array} \right) \right]. \quad (5.19)$$

Offensichtlich benötigen wir N solcher Gleichungen, wenn N die Anzahl Kanäle ist. Die Summe über alle j auf der rechten Seite läuft dabei ebenfalls über die betrachteten Kanäle. Dies bedeutet, dass der Transmissionskoeffizient eines bestimmten Kanales n durch alle Kanäle j bestimmt wird. Die Funktion $f_{m\vec{k}}^{(j)}$ ist uns aus den vorherigen Abschnitten bekannt. Wir haben sie für drei verschiedene Fälle aufgestellt.

Betrachten wir nun die Anschlussbedingung (5.14). Für die Ableitung der Wellenfunktion nach x auf der linken Seite des Photonischen Kristalls an der Stelle $x = 0$ folgt

$$\partial_x E_1(x = 0, y) = \sum_n i k_n^{(t)} T_n e^{iG_n y}.$$

Die Summe läuft über alle N Kanäle. Die Ableitung der Wellenfunktion im Photonischen Kristall nach x an der Stelle $x = 0$ ist nicht ganz so einfach. Wir müssen auch hier beachten, dass die Ableitung der Blochwelle an der Kristallkante $x = 0$ durch die Ableitung an der Stelle $x = c$ ersetzt werden muss. Somit lautet die Ableitung

$$\begin{aligned} \partial_x E_{PC}(x = 0, y) &= \left(\partial_x \psi_{m\vec{k}}(x = 0, y) \right) E_{m\vec{k}}(x = c, y) \\ &+ \psi_{m\vec{k}}(x = 0, y) \left(\partial_x E_{m\vec{k}}(x = c, y) \right) \\ &+ \sum_{l \neq m} \left(\partial_x \left[\vec{\Gamma}_{\vec{k}}^{lm} \cdot \vec{\nabla}_r \psi_{m\vec{k}}(x = 0, y) \right] \right) E_{m\vec{k}}(x = c, y) \\ &+ \sum_{l \neq m} \left[\vec{\Gamma}_{\vec{k}}^{lm} \cdot \vec{\nabla}_r \psi_{m\vec{k}}(x = 0, y) \right] \left(\partial_x E_{m\vec{k}}(x = c, y) \right). \end{aligned}$$

Dabei wird über alle nicht betrachteten Bänder l summiert. Wir setzen diese beiden Ausdrücke nun in Gleichung (5.14) ein und erhalten

$$\begin{aligned} \sum_n i k_n^{(t)} T_n e^{iG_n y} &= \left(\partial_x \psi_{m\vec{k}}(0, y) \right) E_{m\vec{k}}(c, y) + \psi_{m\vec{k}}(0, y) \left(\partial_x E_{m\vec{k}}(c, y) \right) \\ &+ \sum_{l \neq m} \left(\partial_x \left[\vec{\Gamma}_{\vec{k}}^{lm} \cdot \vec{\nabla}_r \psi_{m\vec{k}}(0, y) \right] \right) E_{m\vec{k}}(c, y) \\ &+ \sum_{l \neq m} \left[\vec{\Gamma}_{\vec{k}}^{lm} \cdot \vec{\nabla}_r \psi_{m\vec{k}}(0, y) \right] \left(\partial_x E_{m\vec{k}}(c, y) \right). \end{aligned}$$

Wir wollen nun die Summe auf der linken Seite der Gleichung eliminieren. Darum multiplizieren wir mit $\exp(-iG_p y)$ und integrieren. Mit Hilfe der oben angeführten Beziehung (5.16) folgt dann für $p = n$

$$\begin{aligned} ik_n^{(t)} T_n &= \frac{1}{a_y} \int_0^{a_y} dy e^{-iG_n y} \left(\partial_x \psi_{m\vec{k}}(0, y) \right) E_{m\vec{k}}(c, y) \\ &+ \frac{1}{a_y} \int_0^{a_y} dy e^{-iG_n y} \psi_{m\vec{k}}(0, y) \left(\partial_x E_{m\vec{k}}(c, y) \right) \\ &+ \frac{1}{a_y} \int_0^{a_y} dy e^{-iG_n y} \sum_{l \neq m} \left(\partial_x \left[\vec{\Gamma}_{\vec{k}}^{lm} \cdot \vec{\nabla}_r \psi_{m\vec{k}}(0, y) \right] \right) E_{m\vec{k}}(c, y) \\ &+ \frac{1}{a_y} \int_0^{a_y} dy e^{-iG_n y} \sum_{l \neq m} \left[\vec{\Gamma}_{\vec{k}}^{lm} \cdot \vec{\nabla}_r \psi_{m\vec{k}}(0, y) \right] \left(\partial_x E_{m\vec{k}}(c, y) \right). \end{aligned}$$

Um diese Gleichung zu vereinfachen, ersetzen wir $\psi_{m\vec{k}}$ durch den allgemeinen Ausdruck aus (5.17). Dann werden Integrale der in Gleichung (5.18) dargestellten Form auftauchen und Integrale, die wir durch

$$T_{m\vec{k}}^{(j-n)} = \frac{1}{a_y} \int_0^{a_y} dy e^{i(G_j - G_n)y} \partial_x E_{m\vec{k}}(c, y)$$

abkürzen. Die vereinfachte Gleichung lautet

$$\begin{aligned} ik_n^{(t)} T_n &= \sum_j \left[\begin{aligned} &D_{m\vec{k}}^{(j-n)} \partial_x f_{m\vec{k}}^{(j)}(0) \\ &+ T_{m\vec{k}}^{(j-n)} f_{m\vec{k}}^{(j)}(0) \\ &+ \left(\sum_{l \neq m} D_{l\vec{k}}^{(j-n)} \vec{\Gamma}_{\vec{k}}^{lm} \right) \cdot \left(\partial_x^2 f_{m\vec{k}}^{(j)}(0) \right) \\ &+ \left(\sum_{l \neq m} T_{l\vec{k}}^{(j-n)} \vec{\Gamma}_{\vec{k}}^{lm} \right) \cdot \left(\partial_x f_{m\vec{k}}^{(j)}(0) \right) \end{aligned} \right] \cdot \quad (5.20) \end{aligned}$$

Übergangsbedingungen an der Stelle $x = L$:

Die Betrachtung der Anschlussbedingungen an der Stelle $x = L$ verläuft analog zu der an der Stelle $x = 0$.

Betrachten wir also zunächst die Anschlussbedingung 5.13. Für das Wellenfeld der linken Seite folgt an der Stelle $x = L$

$$E_1(x = L, y) = E_0 + \sum_n R_n e^{iG_n y} .$$

Es kommt im Gegensatz zur obigen Gleichung noch eine Konstante E_0 aus dem einlaufenden Wellenfeld hinzu. Die Summe läuft über die alle N

betrachteten Kanäle. Für das Wellenfeld im Photonischen Kristall ist zu berücksichtigen, dass die Blochwellen an der Stelle $x = L$ durch die Lage der Kristallgrenze in Bezug auf die Einheitszelle bestimmt wird. Wir setzen daher an

$$\begin{aligned} E_{\text{PC}}(x = L, y) &= \psi_{m\vec{k}}(x = L, y)E_{m\vec{k}}(x = d, y) \\ &+ \sum_{l \neq m} \left[\vec{\Gamma}_{\vec{k}}^{lm} \cdot \vec{\nabla}_r \psi_{m\vec{k}}(x = L, y) \right] E_{l\vec{k}}(x = d, y) \end{aligned}$$

Dabei ist nun d die Konstante, welche die Kristallgrenze in Bezug auf die Einheitszelle beschreibt. Der Schnitt muss an der linken und rechten Seite des Kristalls nicht denselben Abstand zum Einheitszellenmittelpunkt haben, deshalb führen wir verschiedene Konstanen c und d ein. Die Summe läuft über alle nicht betrachteten Bänder l . Setzen wir die Gleichungen für die Wellenfelder in die Anschlussbedingung (5.13) ein, so erhalten wir

$$\begin{aligned} E_0 + \sum_n R_n e^{iG_n y} &= \psi_{m\vec{k}}(L, y)E_{m\vec{k}}(d, y) \\ &+ \sum_{l \neq m} \left[\vec{\Gamma}_{\vec{k}}^{lm} \cdot \vec{\nabla}_r \psi_{m\vec{k}}(L, y) \right] E_{l\vec{k}}(d, y) . \end{aligned}$$

Wir multiplizieren auf beiden Seiten mit $\exp(-iG_p y)$ und integrieren. Unter Berücksichtigung der zuvor angegebenen Beziehung entfällt dabei die Summe über n auf der linken Seite und es folgt für $n = p$ die Gleichung

$$\begin{aligned} \delta_{n0} E_0 + R_n &= \frac{1}{a_y} \int_L^{a_y} dy e^{-iG_n y} \left(\psi_{m\vec{k}}(L, y)E_{m\vec{k}}(d, y) \right. \\ &\quad \left. + \sum_{l \neq m} \left[\vec{\Gamma}_{\vec{k}}^{lm} \cdot \vec{\nabla}_r \psi_{m\vec{k}}(L, y) \right] E_{l\vec{k}}(d, y) \right) . \end{aligned}$$

Auf der linken Seite kommt der Ausdruck δ_{n0} hinzu, da $1 = \exp(iG_0 y)$ gilt. Wir ersetzen $\psi_{m\vec{k}}$ durch den allgemeinen Ausdruck. Dadurch erhalten wir eine Gleichung in der auf der rechten Seite über alle Kanäle j summiert wird

$$\begin{aligned} \delta_{n0} E_0 + R_n &= \sum_j \left[D_{m\vec{k}}^{(j-n)} f_{m\vec{k}}^{(j)}(L) \right. \\ &\quad \left. + \left(\sum_{l \neq m} F_{l\vec{k}}^{(j-n)} \vec{\Gamma}_{\vec{k}}^{lm} \right) \cdot \left(\frac{\partial_x f_{m\vec{k}}^{(j)}(L)}{iG_j f_{m\vec{k}}^{(j)}(L)} \right) \right] . \quad (5.21) \end{aligned}$$

Auch der Reflektionskoeffizient eines bestimmten Kanals n wird durch alle betrachteten Kanäle j bestimmt. Dabei haben wir den Ausdruck mit der Definition von

$$F_{m\vec{k}}^{(j-n)} = \frac{1}{a_y} \int_0^{a_y} dy e^{i(G_j - G_n)y} E_{m\vec{k}}(d, y) \quad (5.22)$$

etwas übersichtlicher gestaltet.

Betrachten wir nun die Anschlussbedingung (5.15). Für die Ableitung der Wellenfunktion nach x auf der rechten Seite des Photonischen Kristall an der Stelle $x = 0$ folgt

$$\partial_x E_r(x = L, y) = -ikE_0 + \sum_n ik_n^{(r)} R_n e^{iG_n y} .$$

Dabei erhalten wir einen zusätzlichen Term $-ikE_0$ durch das einlaufende Wellenfeld. Das reflektierte Wellenfeld setzt sich wieder aus der Summe über alle Kanäle zusammen. Bei Ableitung der Wellenfunktion im Photonischen Kristall nach x an der Stelle $x = L$ müssen wir beachten, dass die Ableitung der Blochwelle an der Kristallkante $x = L$ jetzt durch die Ableitung an der Stelle $x = d$ ersetzt werden muss. Wir erhalten

$$\begin{aligned} \partial_x E_{PC}(x = L, y) &= \left(\partial_x \psi_{m\vec{k}}(x = L, y) \right) E_{m\vec{k}}(x = d, y) \\ &+ \psi_{m\vec{k}}(x = L, y) \left(\partial_x E_{m\vec{k}}(x = d, y) \right) \\ &+ \sum_{l \neq m} \left(\partial_x \left[\vec{\Gamma}_{\vec{k}}^{lm} \cdot \vec{\nabla}_r \psi_{m\vec{k}}(x = L, y) \right] \right) E_{m\vec{k}}(x = d, y) \\ &+ \sum_{l \neq m} \left[\vec{\Gamma}_{\vec{k}}^{lm} \cdot \vec{\nabla}_r \psi_{m\vec{k}}(x = L, y) \right] \left(\partial_x E_{m\vec{k}}(x = d, y) \right) . \end{aligned}$$

Die hier auftretende Summe läuft über alle nicht betrachteten Bänder l . Einsetzen dieser beiden Ausdrücke in Gleichung (5.14) ergibt

$$\begin{aligned} -ikE_0 + \sum_n ik_n^{(r)} R_n e^{iG_n y} &= \left(\partial_x \psi_{m\vec{k}}(L, y) \right) E_{m\vec{k}}(d, y) \\ &+ \psi_{m\vec{k}}(L, y) \left(\partial_x E_{m\vec{k}}(d, y) \right) \\ &+ \sum_{l \neq m} \left(\partial_x \left[\vec{\Gamma}_{\vec{k}}^{lm} \cdot \vec{\nabla}_r \psi_{m\vec{k}}(L, y) \right] \right) E_{m\vec{k}}(d, y) \\ &+ \sum_{l \neq m} \left[\vec{\Gamma}_{\vec{k}}^{lm} \cdot \vec{\nabla}_r \psi_{m\vec{k}}(L, y) \right] \left(\partial_x E_{m\vec{k}}(d, y) \right) . \end{aligned}$$

Um die Summe auf der linken Seite der Gleichung zu eliminieren multiplizieren wir mit $\exp(-iG_p y)$ und integrieren. Mit Hilfe der oben angeführten Beziehung (5.16) folgt dann für $p = n$

$$\begin{aligned} -ik\delta_{n0}E_0 + ik_n^{(r)} R_n &= \frac{1}{a_y} \int_0^{a_y} dy e^{-iG_n y} \left[\left(\partial_x \psi_{m\vec{k}}(L, y) \right) E_{m\vec{k}}(d, y) \right. \\ &+ \psi_{m\vec{k}}(L, y) \left(\partial_x E_{m\vec{k}}(d, y) \right) \\ &+ \sum_{l \neq m} \left(\partial_x \left[\vec{\Gamma}_{\vec{k}}^{lm} \cdot \vec{\nabla}_r \psi_{m\vec{k}}(L, y) \right] \right) E_{m\vec{k}}(d, y) \\ &\left. + \sum_{l \neq m} \left[\vec{\Gamma}_{\vec{k}}^{lm} \cdot \vec{\nabla}_r \psi_{m\vec{k}}(L, y) \right] \left(\partial_x E_{m\vec{k}}(d, y) \right) \right] . \end{aligned}$$

Das Ersetzen von $\psi_{m\vec{k}}$ durch den allgemeinen Ausdruck aus (5.17) wird Integrale der in Gleichung (5.22) dargestellten Form und Integrale, die wir durch

$$S_{m\vec{k}}^{(j-n)} = \frac{1}{a_y} \int_0^{a_y} dy e^{i(G_j - G_n)y} \partial_x E_{m\vec{k}}(d, y)$$

abkürzen wollen, ergeben. Die vereinfachte Gleichung lautet

$$\begin{aligned} -ik\delta_{n0}E_0 + ik_n^{(r)}R_n &= \sum_j \left[F_{m\vec{k}}^{(j-n)} \partial_x f_{m\vec{k}}^{(j)}(L) \right. \\ &+ S_{m\vec{k}}^{(j-n)} f_{m\vec{k}}^{(j)}(L) \\ &+ \left(\sum_{l \neq m} F_{l\vec{k}}^{(j-n)} \bar{\Gamma}_{\vec{k}}^{lm} \right) \cdot \left(\begin{array}{c} \partial_x^2 f_{m\vec{k}}^{(j)}(L) \\ iG_j \partial_x f_{m\vec{k}}^{(j)}(L) \end{array} \right) \\ &+ \left. \left(\sum_{l \neq m} S_{l\vec{k}}^{(j-n)} \bar{\Gamma}_{\vec{k}}^{lm} \right) \cdot \left(\begin{array}{c} \partial_x f_{m\vec{k}}^{(j)}(L) \\ iG_j f_{m\vec{k}}^{(j)}(L) \end{array} \right) \right] \quad (5.23) \end{aligned}$$

Zusammenfassung

Hier werden bisherigen Schritte nocheinmal zusammengestellt. Wir haben die bisherigen Erkenntnisse angewendet, um die Transmission und Reflektion durch einen endlichen Photonischen Kristall zu betrachten. Dabei haben wir uns auf den linearen Fall in Bandlücke nahe einer Bandkante beschränkt.

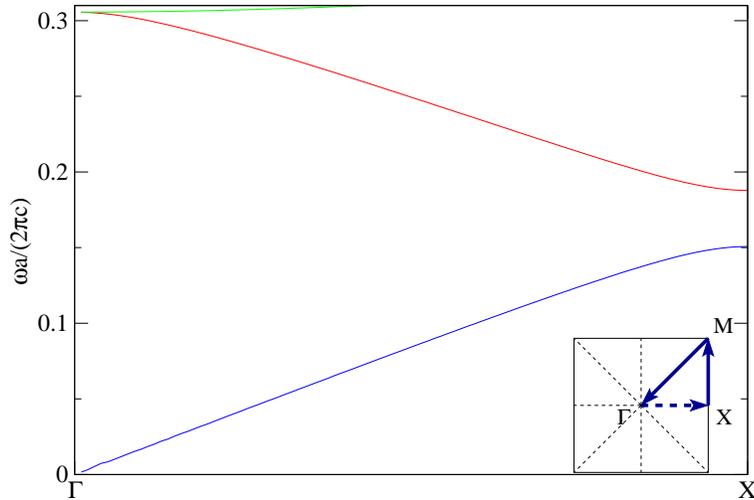
- Zuerst haben wir die Wellenfelder innerhalb und ausserhalb des endlichen Photonischen Kristalls aufgestellt.
- Dabei haben wir beachtet, dass ein Photonischer Kristall ein Beugungsgitter ist und wir daher aufgrund des Blochtheorems in transversaler y -Richtung diskrete Ausbreitungskanäle in x -Richtung erhalten.
- Weiterhin haben wir entdeckt, dass die Kanäle symmetrisch zur Einfallrichtung verteilt sind. Bei senkrechtem Einfall bedeutet dies, dass man den senkrechten Kanal mit $n = 0$ bezeichnet und die benachbarten mit $n = \pm 1, \pm 2 \dots$ durchzählt.
- Wir haben durch die Darstellung der äusseren Wellenfelder mit Hilfe der Kanäle weitere Unbekannte erhalten. Diese Unbekannten T_n und R_n geben die Stärke, d.h. die Amplitude der Welle in dieser Richtung, des jeweiligen Kanals an.
- Um die aufgestellten Wellenfelder an den Übergangsstellen $x = 0$ und $x = L$ miteinander zu verknüpfen haben wir vier Anschlussbedingungen hergeleitet.

- Durch die genauere Betrachtung der Anschlussbedingungen erhielten wir jeweils zwei Gleichungen für T_n und R_n .
- Diese Gleichungen zeigten, dass sich die Kanäle gegenseitig beeinflussen. Da die Unbekannten T_n bzw. R_n für einen bestimmten Kanal n durch diese Gleichungen, mit der Summe über alle betrachteten Kanäle in Beziehung gesetzt werden.
- Wir haben ferner festgestellt, dass der Schnitt durch die Einheitszelle an der Grenze des Photonischen Kristalls die Ankopplung der äusseren Wellenfelder mit dem Wellenfeld im Photonischen Kristall beeinflusst.
- Bei der Herleiten der Gleichungen haben wir nur die allgemeine Gleichung von $\psi_{m\vec{k}}$ verwendet. Die Frequenz des einfallenden Wellenfeldes ist also nicht festgelegt. Die Unbekannten A_n und B_n sind daher nicht in den Gleichungen vertreten.
- Wir haben bisher ebensowenig die möglichen Orientierungen der Einheitszellen im Photonischen Kristall angesprochen. Bei senkrechtem Einfall wird die Orientierung der Einheitszellen im Photonischen Kristall bestimmen, für welche Richtung in der Brillouinzone die Bandstruktur berechnet werden muss.

Das weitere Vorgehen besteht darin, die Frequenz des einfallenden Wellenfeldes festzulegen. Dadurch können wir den für die jeweilige Betrachtung richtigen Ausdruck für $f_{m\vec{k}}^{(n)}$ einsetzen. Wir müssen also z.B. für eine Frequenz in der Bandlücke den in Kapitel 5.2 hergeleiteten Ausdruck für $f_{m\vec{k}}^{(n)}$ benutzen. In den Gleichungen der Anschlussbedingungen erhalten wir dann die weiteren unbekanntes A_n und B_n . Wir haben damit $4N$ Unbekannte, wobei N die Anzahl der betrachteten Kanäle ist. Dabei gilt $N = 2n + 1$, da die Kanäle symmetrisch um $n = 0$ verteilt sind. Wir haben auch $4N$ Gleichungen. Damit sind die Unbekannten also durch das Gleichungssystem der $4N$ Gleichungen bestimmbar und wir erhalten durch A_n und B_n das Wellenfeld im Photonischen Kristall. Ebenso erhalten wir über den Transmissionskoeffizient T_n das transmittierte Wellenfeld und durch den Reflektionskoeffizient R_n das reflektierte Wellenfeld. Es muss allerdings noch geklärt werden, wieviele Kanäle man zur Berechnung von z.B. T_0, R_0, A_0 und B_0 benötigt.

5.6 Gleichungssystem und Lösung

In diesem Abschnitt werden wir die hergeleiteten Gleichungen auf ein konkretes Problem anwenden. Wir werden das dazugehörige Gleichungssystem aufstellen und dessen Lösungen präsentieren. Darauf werden wir unsere Methode mit anderen bekannten Methoden vergleichen und die Vor- und Nachteile aufzeigen.

Abbildung 5.5: Bild der ersten zwei Bänder in ΓX -Richtung

5.6.1 Frequenz ω in der Bandlücke nahe der Bandkante

Wir betrachten den in Bild (5.3) dargestellten Versuchsaufbau. Der verwendete Photonische Kristall sei aus Luft und aus periodisch angeordneten Zylindern mit dielektrischem Material der Dielektrizitätskonstante $\epsilon = 13$ und einem Radius von $r = 0,45a$ aufgebaut. Die Einheitszellen des Photonischen Kristalls seien dabei auf die Weise angeordnet, die in Abbildung (5.4) schematisch dargestellt ist. Da wir eine senkrecht zur Kristallkante einfallende ebene Welle haben, liegt ihr Wellenvektor in der ΓX -Richtung der Brillouinzone. Wir müssen also die Bandstruktur in dieser Richtung betrachten. Ein Ausschnitt für die ersten zwei Bänder der in Kapitel 2 berechneten Bandstruktur ist in Abbildung (5.5) für die ΓX -Richtung dargestellt. Wir wollen nun mit einer Frequenz ω in der Nähe der Bandkante des ersten Bandes, welches in Abbildung (5.5) blau dargestellt ist, einstrahlen. Die Frequenz wird im Photonischen Kristall dann zerlegt gemäss

$$\omega = \omega_{m\vec{k}} + \gamma .$$

Wir betrachten das erste Band, darum gilt $m = 1$. Die Bandkante des ersten Bandes befindet sich am X -Punkt in der Brillouinzone. Damit ist auch der Wert für \vec{k} festgelegt. Es gelte ferner $\gamma > 0$ und $\gamma \ll \omega$. Dies entspricht dem betrachteten Fall einer einfallenden Frequenz in der Nähe der Bandkante des ersten Bandes am X -Punkt der Brillouinzone.

Nun wollen wir uns den Gleichungen (5.19) - (5.23) aus dem vorherigen Abschnitt zuwenden. In diesen Gleichungen ist noch nicht festgelegt, ob der Fall einer einfallenden Frequenz in der Bandlücke oder an der Bandkante betrachtet wird. Für den hier betrachteten Fall einer Frequenz in der

Bandlücke gilt

$$f_{m\vec{k}}^{(n)}(x) = A_n e^{i\xi_1^{(n)}x} + B_n e^{i\xi_2^{(n)}x}$$

mit $\xi_{1/2}^{(n)} = -\frac{M_{m\vec{k}}^{(00)}}{M_{m\vec{k}}^{(11)}} G_n \pm \sqrt{\frac{(M_{m\vec{k}}^{(00)} M_{m\vec{k}}^{(00)} - M_{m\vec{k}}^{(22)} M_{m\vec{k}}^{(11)}) G_n^2 + \gamma M_{m\vec{k}}^{(11)}}{M_{m\vec{k}}^{(11)} M_{m\vec{k}}^{(11)}}}$.

Durch das Einsetzen dieses Ausdruckes in die Gleichungen (5.19) - (5.23), erhält man ein Gleichungssystem mit den Unbekannten A_n, B_n, T_n und R_n . Betrachten wir zunächst Gleichung (5.19). Wenn wir $f_{m\vec{k}}^{(n)}$ ersetzen folgt für diese

$$T_n = \sum_j \left[D_{m\vec{k}}^{(j-n)} (A_j + B_j) + \left(\sum_{l \neq m} D_{l\vec{k}}^{(j-n)} \vec{\Gamma}_{\vec{k}}^{lm} \right) \cdot \begin{pmatrix} i\xi_1^{(n)} A_j + i\xi_2^{(n)} B_j \\ iG_j A_j + iG_j B_j \end{pmatrix} \right].$$

Für Gleichung (5.20) ergibt sich mit $f_{m\vec{k}}^{(n)}$

$$\begin{aligned} ik_n^{(t)} T_n &= \sum_j \left[iD_{m\vec{k}}^{(j-n)} (\xi_1^{(n)} A_j + \xi_2^{(n)} B_j) \right. \\ &+ T_{m\vec{k}}^{(j-n)} (A_j + B_j) \\ &+ \left(\sum_{l \neq m} D_{l\vec{k}}^{(j-n)} \vec{\Gamma}_{\vec{k}}^{lm} \right) \cdot \begin{pmatrix} -(\xi_1^{(n)})^2 A_j - (\xi_2^{(n)})^2 B_j \\ -G_j \xi_1^{(n)} A_j - G_j \xi_2^{(n)} B_j \end{pmatrix} \\ &\left. + \left(\sum_{l \neq m} T_{l\vec{k}}^{(j-n)} \vec{\Gamma}_{\vec{k}}^{lm} \right) \cdot \begin{pmatrix} i\xi_1^{(n)} A_j + i\xi_2^{(n)} B_j \\ iG_j A_j + iG_j B_j \end{pmatrix} \right]. \end{aligned}$$

Nun wenden wir uns Gleichung (5.21) zu und ersetzen $f_{m\vec{k}}^{(n)}$. Es ergibt sich dann die Gleichung

$$\begin{aligned} \delta_{n0} E_0 + R_n &= \\ &\sum_j \left[D_{m\vec{k}}^{(j-n)} (A_j \exp(i\xi_1^{(n)} L) + B_j \exp(i\xi_2^{(n)} L)) \right. \\ &+ \left. \left(\sum_{l \neq m} F_{l\vec{k}}^{(j-n)} \vec{\Gamma}_{\vec{k}}^{lm} \right) \cdot \begin{pmatrix} i\xi_1^{(n)} A_j \exp(i\xi_1^{(n)} L) + i\xi_2^{(n)} B_j \exp(i\xi_2^{(n)} L) \\ iG_j A_j \exp(i\xi_1^{(n)} L) + iG_j B_j \exp(i\xi_2^{(n)} L) \end{pmatrix} \right]. \end{aligned}$$

Für Gleichung (5.23) erhält man nach Ersetzen von $f_{m\vec{k}}^{(n)}$ folgende Form

$$\begin{aligned}
& - ik\delta_{n0}E_0 + ik_n^{(r)}R_n = \\
& \sum_j \left[F_{m\vec{k}}^{(j-n)}(i\xi_1^{(n)}A_j \exp(i\xi_1^{(n)}L) + i\xi_2^{(n)}B_j \exp(i\xi_2^{(n)}L)) \right. \\
& + S_{m\vec{k}}^{(j-n)}(A_j \exp(i\xi_1^{(n)}L) + B_j \exp(i\xi_2^{(n)}L)) \\
& + \left(\sum_{l \neq m} F_{l\vec{k}}^{(j-n)} \vec{\Gamma}_{\vec{k}}^{lm} \right) \cdot \begin{pmatrix} -(\xi_1^{(n)})^2 A_j \exp(i\xi_1^{(n)}L) - (\xi_2^{(n)})^2 B_j \exp(i\xi_2^{(n)}L) \\ -G_j \xi_1^{(n)} A_j \exp(i\xi_1^{(n)}L) - G_j \xi_2^{(n)} B_j \exp(i\xi_2^{(n)}L) \end{pmatrix} \\
& \left. + \left(\sum_{l \neq m} S_{l\vec{k}}^{(j-n)} \vec{\Gamma}_{\vec{k}}^{lm} \right) \cdot \begin{pmatrix} i\xi_1^{(n)} A_j \exp(i\xi_1^{(n)}L) + i\xi_2^{(n)} B_j \exp(i\xi_2^{(n)}L) \\ iG_j A_j \exp(i\xi_1^{(n)}L) + iG_j B_j \exp(i\xi_2^{(n)}L) \end{pmatrix} \right].
\end{aligned}$$

Nachdem man die Gleichungen ausmultipliziert hat und alle Variablen auf eine Seite gebracht hat, kann man sie in einer Matrixgleichung der Form

$$\hat{M}\mathbf{a} = \mathbf{b} \quad (5.24)$$

schreiben. Dabei ist \mathbf{a} ein Vektor mit $4N$ Komponenten. Dieser Vektor besteht aus den Unbekannten A_n, B_n, T_n und R_n . Die Matrixelemente von \hat{M} bilden die Koeffizienten, welche in den Gleichungen vor den unbekannt Variablen stehen. Sie hat daher die Dimension $4N \times 4N$. Auf der rechten Seite muss \mathbf{b} also ebenso ein Vektor mit $4N$ Komponenten sein. Aufgrund der einfallenden Welle sind die Komponenten für $n = 0$ von \mathbf{b} nicht null, daher haben wir ein inhomogenes Gleichungssystem, welches aber eindeutig lösbar ist. Weiterhin haben wir gesehen, dass sich die betrachteten Kanäle gegenseitig beeinflussen. Es ist also nicht ohne weiteres möglich nur einen Kanal zu betrachten. Wir werden allerdings zeigen, dass man sich bei der numerischen Auswertung im hier betrachteten Fall einer Frequenz in der ersten Bandlücke auf den Fall $N = 1$ beschränken kann. Im Anhang ist das Aufstellen des Gleichungssystems für den eindimensionalen Fall $N = 1$ explizit aufgeführt.

Berechnung und Ergebnisse:

Zur Lösung des Gleichungssystems wurde in dieser Arbeit ein Programm erstellt, welches zuerst die Gruppengeschwindigkeit und Gruppengeschwindigkeitsdispersion aus der Bandstruktur berechnet und damit die Matrix \hat{M} aufstellt. Das Gleichungssystem kann mit diesem Programm für Quadratgitter oder Dreiecksgitter für die in der Bandstruktur berechneten Hauptsymmetrieachsen gelöst werden. Die Struktur des Programms erlaubt es ferner die Parameter Kanalanzahl N , Kristalllänge L , Schnitt c bzw. d und der Differenzfrequenz γ für einen zuvor festgelegten Wellenvektor im Photonischen

N	1	3	5
$ T_0 $	0.511	0.513	0.513
$ R_0 $	0.859	0.859	0.860

Tabelle 5.1: Werte für die Parameter: $\gamma_1 = 0.001$, $L_1 = 10$, $c_1 = d_1 = 0$

N	1	3	5
$ T_0 $	0.041	0.044	0.045
$ R_0 $	0.999	0.999	0.999

Tabelle 5.2: Werte für die Parameter: $\gamma_2 = 0.01$, $L_1 = 10$, $c_1 = d_1 = 0$

Kristall \vec{k} und Bandindex m frei zu wählen. Der Wellenvektor und die Frequenz ω des einfallenden Wellenfeldes werden dann für die gewählten Werte γ , m und \vec{k} bestimmt. Durch das Lösen des Gleichungssystems werden die Koeffizienten A_n , B_n , T_n und R_n berechnet.

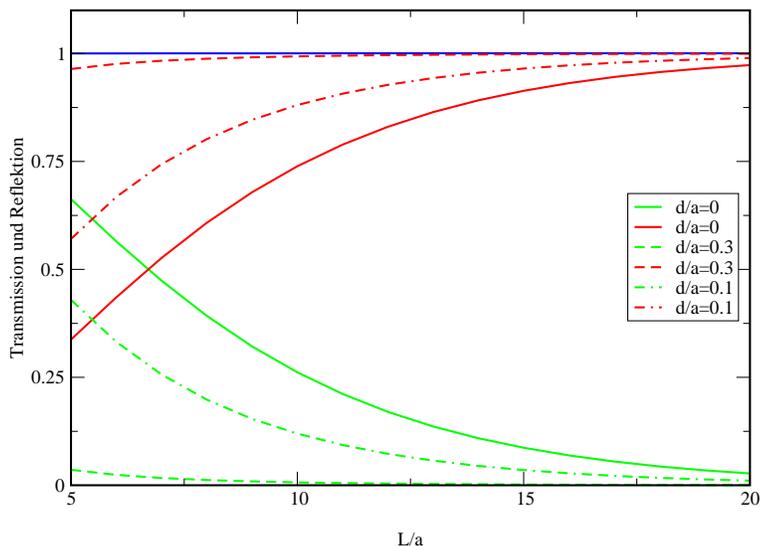
Wir wollen die Ergebnisse der Rechnungen für den oben diskutierten Fall anführen. Dazu wird gezeigt, dass man sich für Frequenzen in der ersten Bandlücke auf den eindimensionalen Fall $N = 1$ beschränken kann. Die Vernachlässigung der anderen Kanäle entspricht der Vernachlässigung der Braggstreuungen ab der ersten Ordnung im Aussenraum. In den Tabellen (5.1) bis (5.4) sind die Berechnungen für $|T_0|$ und $|R_0|$ für verschiedene N aufgelistet. Aus diesen Tabellen kann man entnehmen, dass die Änderung der Werte von $|T_0|$ und $|R_0|$ bei mehreren Kanälen vernachlässigbar. Dieser Effekt ist folgendermassen zu erklären. Der Betrag des Wellenvektors der einfallenden Welle ist bei einer Frequenz in der ersten Bandlücke zu klein, um die Braggbedingung für die erste Ordnung oder höhere Ordnungen zu erfüllen. Wir können uns also auf die Berechnung mit $N = 1$ beschränken.

In den Graphiken (5.6) bis (5.11) sind $|T_0|^2$ in grün, $|R_0|^2$ in rot und $|T_0|^2 + |R_0|^2$ in blau über die Kristalllänge L , die Differenzfrequenz γ und den Schnittparameter d aufgetragen. Dabei haben wir vorausgesetzt, dass der Schnittparameter auf der rechten und linken Seite den gleichen Wert hat. Die Energieerhaltung $|T_0|^2 + |R_0|^2 = 1$ ist in allen Fällen gegeben. Offensichtlich fällt die Transmission zu grossen Kristalllängen und grossen Differenzfrequenzen hin ab, während die Reflektion steigt. Besonders interessant sind

N	1	3	5
$ T_0 $	0.688	0.684	0.682
$ R_0 $	0.725	0.731	0.734

Tabelle 5.3: Werte für die Parameter: $\gamma_1 = 0.001$, $L_2 = 7$, $c_1 = d_1 = 0$

N	1	3	5
$ T_0 $	0.504	0.507	0.506
$ R_0 $	0.863	0.862	0.864

Tabelle 5.4: Werte für die Parameter: $\gamma_1 = 0.001$, $L_1 = 10$, $c_2 = d_2 = 0.02$ Abbildung 5.6: $|T_0|^2$ (grün), $|R_0|^2$ (rot) und $|T_0|^2 + |R_0|^2$ (blau) über Länge des Kristalls für verschiedene Schnittparameter bei konstanter Differenzfrequenz $\gamma a/(2\pi c) = 0.001$

Abbildungen (5.9) und (5.8). Sie zeigen den Einfluss des Schnittparameters auf das Transmissionsverhalten. Dieses Verhalten wurde bisher weder experimentell noch theoretisch untersucht. Die Ankopplung der äusseren Felder ist für einen Schnitt durch die Mitte der Einheitszelle gut, sie fällt aber zum Rand der Einheitszelle ab. Dies ist folgendermassen zu erklären. Die Blochwelle des ersten Bandes am X -Punkt hat in der Mitte der Einheitszelle einen Nulldurchgang, also einen Knoten. Obwohl das äussere Feld mit einer leicht anderen Frequenz als die Blochwelle schwingt wird die Ankopplung an einem Knotenpunkt dadurch nicht beeinflusst. Entfernt man sich aber von diesem Knotenpunkt, tritt der Effekt der leicht unterschiedlichen Frequenzen hervor und die Ankopplung wird schwächer.

5.6.2 Vergleich mit anderen Methoden

Wir wollen unsere Berechnungsmethode des Transmissionsproblems mit anderen Methoden vergleichen. Es gibt eine Fülle von Methoden, die man

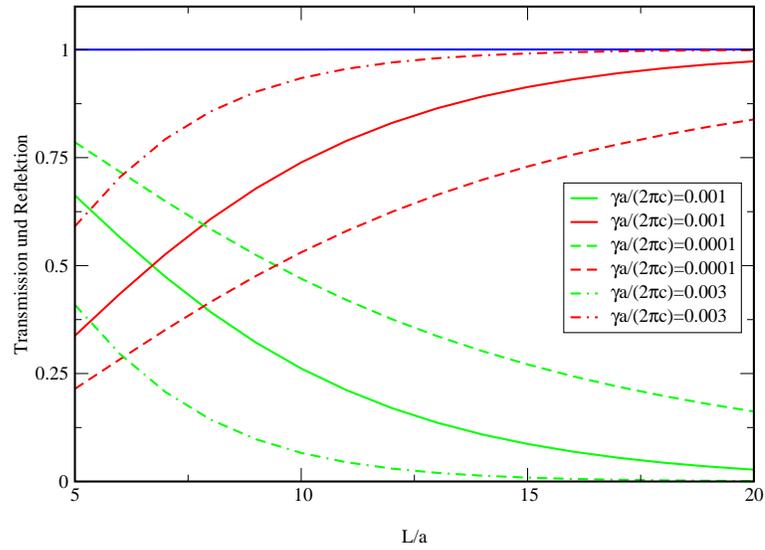


Abbildung 5.7: $|T_0|^2$ (grün), $|R_0|^2$ (rot) und $|T_0|^2 + |R_0|^2$ (blau) über Länge des Kristalls in Einheitszellen für verschiedene Differenzfrequenzen bei konstantem Schnittparameter $d/a = 0$

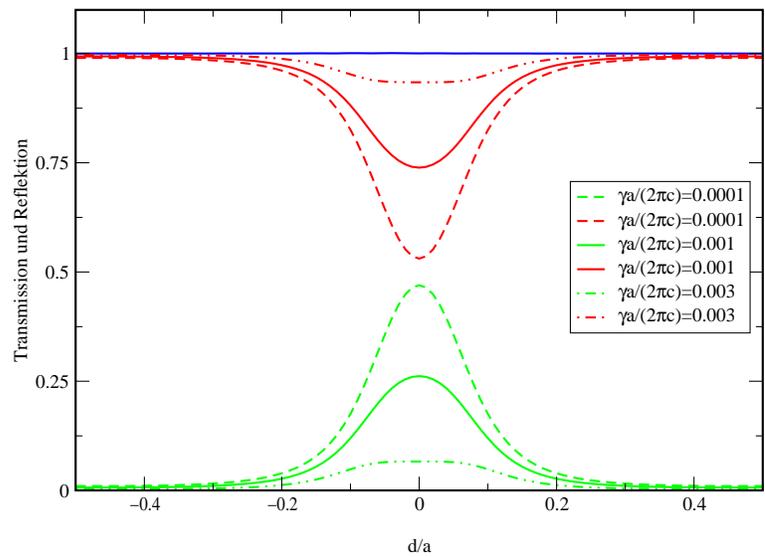


Abbildung 5.8: $|T_0|^2$ (grün), $|R_0|^2$ (rot) und $|T_0|^2 + |R_0|^2$ (blau) über den Schnittparameter für verschiedene Differenzfrequenzen bei konstanter Kristalllänge $L/a = 10$

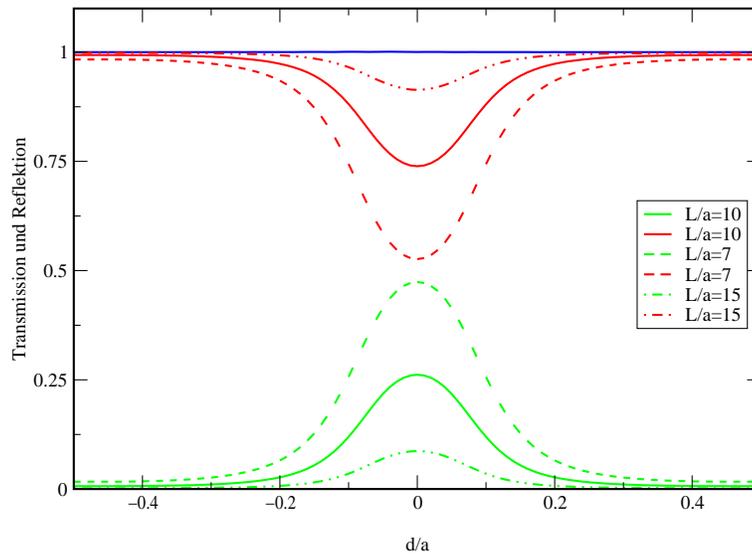


Abbildung 5.9: $|T_0|^2$ (grün), $|R_0|^2$ (rot) und $|T_0|^2 + |R_0|^2$ (blau) über den Schnittparameter für verschiedene Kristalllängen bei konstanter Differenzfrequenz $\gamma a/(2\pi c) = 0.001$

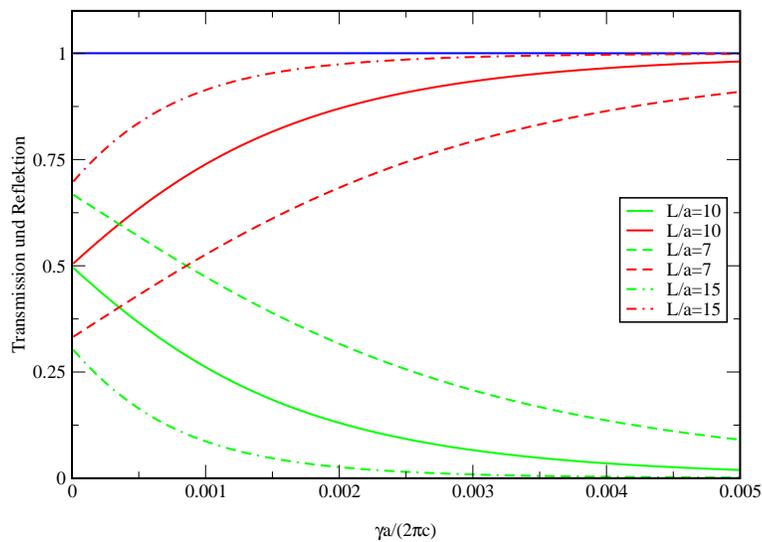


Abbildung 5.10: $|T_0|^2$ (grün), $|R_0|^2$ (rot) und $|T_0|^2 + |R_0|^2$ (blau) über die Differenzfrequenz für verschiedene Kristalllängen bei konstantem Schnittparameter $d/a = 0$

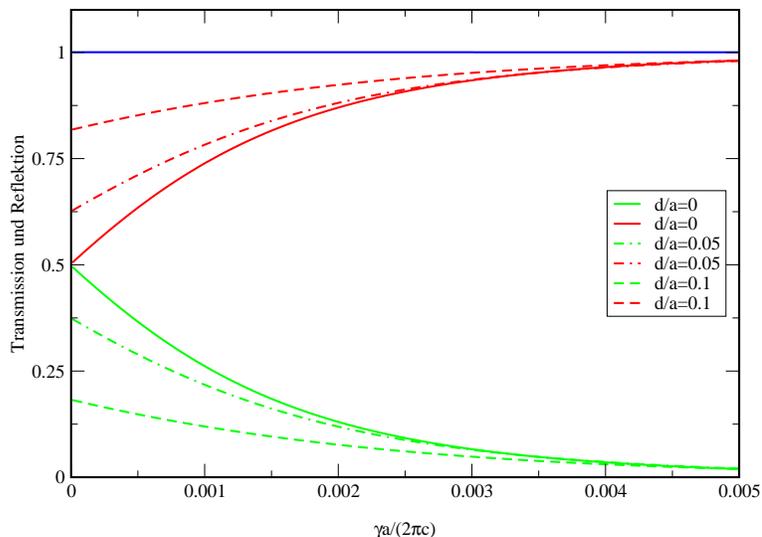


Abbildung 5.11: $|T_0|^2$ (grün), $|R_0|^2$ (rot) und $|T_0|^2 + |R_0|^2$ (blau) über die Differenzfrequenz für verschiedene Schnittparameter bei konstanter Kristalllänge $L/a = 10$

auf das Transmissionsproblem anwenden kann, so z.B. die Finite-Difference-Time-Domain (FDTD) [10] oder die Plane-Wave-Expansion-Methode (PWEM) [11]. Die FDTD-Methode beruht auf der numerischen Zeitintegration der Wellengleichung. Es ist dabei offensichtlich, dass diese Methode besonders für grössere Kristalle sehr aufwendig ist. Ihr Vorteil liegt allerdings darin, dass auch Defekte bzw. Unordnungen berücksichtigt werden können. Dies ist mit unserer Methode nicht möglich. Die PWEM basiert auf der Fourierreihenentwicklung der Dielektrizitätsfunktion und des Wellenfeldes im Photonischen Kristall unter Einbezug der Anschlussbedingungen. Dies führt dann auf ein Gleichungssystem, dessen Grösse von der Länge des betrachteten Kristalls abhängt.

Wir kommen für unsere Betrachtungen mit der Bandstrukturrechnung für den unendlichen Photonischen Kristall aus. Dadurch können wir das Wellenfeld im Photonischen Kristall aufstellen und haben nur noch ein $4N \times 4N$ Gleichungssystem zu lösen. Die Grösse ist also nur von der Anzahl der zu betrachtenden Kanäle abhängig, nicht jedoch von der Länge des Kristalls. Wie wir weiterhin gesehen haben reicht es für den Fall der ersten Bandlücke sogar aus, sich auf einen Kanal zu beschränken. Unsere Methode ist den oben genannten im linearen Fall also überlegen. Weiterhin können wir unser Verfahren leicht auf den nichtlinearen Fall ausweiten, da sich dieser nur in der Einhüllenden vom linearen Fall unterscheiden wird. Im nichtlinearen Fall werden die Kanäle schon in der Bewegungsgleichung der Einhüllenden gekoppelt, welche dann numerisch gelöst werden muss. Dies wird Thema

von Folgearbeiten sein. Die PWEM kann dagegen nicht auf nichtlineare Systeme ausgedehnt werden. Das FDTD-Verfahren kann Nichtlinearitäten behandeln, wird aber wie im linearen Fall entsprechend aufwendiger als unser Verfahren sein.

Kapitel 6

Zusammenfassung und Ausblick

Zusammenfassung

In Kapitel 2 haben wir uns mit den linearen Eigenschaften Photonischer Kristalle beschäftigt. Es wurde die Wellengleichung in einem Photonischen Kristall hergeleitet und festgestellt, dass sie mit Hilfe des Blochtheorems zu einer linearen Eigenwertgleichung wird, deren Lösungen die Bandstruktur bilden. Auf diese Eigenwertgleichung wurde die kp -Störungsrechnung angewandt und wir erhielten Ausdrücke für die Gruppengeschwindigkeit und die Gruppengeschwindigkeitsdispersion im entarteten und nicht entarteten Fall. Die Ausdrücke des nicht entarteten Falls sind uns später in Kapitel 4 wieder begegnet. Zur genaueren Analyse der Gruppengeschwindigkeit und der Gruppengeschwindigkeitsdispersion wurden diese für die ersten drei Bänder der Bandstruktur eines Quadratgitters berechnet. Dabei stellten wir fest, dass, wie erwartet, die Gruppengeschwindigkeit an den Hochsymmetriepunkten Γ , M und X verschwindet. Die einzige Ausnahme bildet das erste Band am Γ -Punkt.

In Kapitel 3 befassten wir uns dann mit optischen Nichtlinearitäten. Es wurde festgestellt, dass der führende nichtlineare Term in nicht zentrosymmetrischen Systemen $\chi^{(2)}$ ist. Dieser nichtlineare Term sorgt für die Erzeugung der zweiten Harmonischen und die Erzeugung eines Gleichspannungsfeldes. Der führende nichtlineare Term in einem zentrosymmetrischen System ist $\chi^{(3)}$. Dieser Term ist für die Erzeugung der dritten Harmonischen und die Erzeugung einer intensitätsabhängigen Polarisierung verantwortlich. Daraufhin wurde die Krylov-Bogoliubov-Mitropolski-Methode [5, 9] und die Multi-Skalen Methode [5] vorgestellt, mit denen man Differentialgleichungen mit schwachen Nichtlinearitäten näherungsweise lösen kann. Beide Methoden zeigten, dass die Nichtlinearität die Einführung von verschiedenen Zeitskalen ermöglicht und die Lösungsfunktion aus einer Trägerwelle und einer Einhüllenden besteht. Die Trägerwelle variiert auf der schnellsten Zeits-

kala, die (langsam variierende) Einhüllende hingegen auf den langsameren Zeitskalen. Der Unterschied zwischen den beiden Methoden lag darin, dass die Multi-Skalen-Methode nur auf dem Ansatz der verschiedenen Zeitskalen basierte und daher keine Lösung des zugrundeliegenden linearen Problems nötig war.

In Kapitel 4 haben wir die Ausbreitung von Pulsen betrachtet. Es wurde festgestellt, dass ein Puls aus einer Überlagerung von Wellen in einem Frequenzbereich um ω_0 besteht. Weitere Untersuchungen ergaben, dass wir einen Puls durch eine Trägerwelle der Frequenz ω_0 mit einer mit der Gruppengeschwindigkeit laufenden Einhüllenden darstellen können. Die Einhüllende bestimmt dabei die Form der Trägerwelle. Dispersion und Nichtlinearität machen sich daher nur in der Einhüllenden bemerkbar.

Mit dem bisher erarbeiteten Grundwissen leiteten wir eine Gleichung für die Einhüllende in einem Photonischen Kristall mit intensitätsabhängiger Nichtlinearität her. Wir kamen zu dem Ergebnis, dass die Einhüllende sich mit der Gruppengeschwindigkeit aus Kapitel 2 bewegt. In einem mit der Gruppengeschwindigkeit bewegten Bezugssystem erfüllt sie eine nichtlineare Schrödingergleichung. Eine nähere Betrachtung der nichtlinearen Schrödingergleichung ergab, dass die Gruppengeschwindigkeitsdispersion aus Kapitel 2 dispersive Effekte generiert. Die Trägerwelle erfüllt dabei die lineare Wellengleichung der Bandstrukturechnung aus Kapitel 2. Daher sind, in einem Photonischen Kristall, die Blochwellen die Trägerwellen des Pulses.

In Kapitel 5 wurde die nichtlineare Schrödingergleichung genauer behandelt. Wir haben herausgefunden, dass wir drei Fälle unterscheiden müssen. Der für uns wichtigste Fall war der einer einfallenden Frequenz in der Bandlücke nahe einer Bandkante. Dabei wurde erkannt, dass die einfallende Frequenz aufgespalten werden muss. Im Photonischen Kristall wird ein Teil der einfallenden Frequenz von der angeregten Blochwelle, der Trägerwelle, aufgenommen, während der andere Teil von der Einhüllenden aufgenommen wird. Aufgrund der Symmetrie des Photonischen Kristalls haben wir, analog zu den diskreten Wellenvektoren bei der Beugung an einem Gitter, Kanäle eingeführt. Diese Kanäle werden nun durch die nichtlinearen Terme gemischt. Die Mischung der Kanäle konnte in der analogen von Sipe und Sterke durchgeführten Rechnung an eindimensionalen Photonischen Kristallen [6] natürlich nicht beobachtet werden. Danach wurde die Lösung für den linearen Fall für die verschiedenen Kanäle gesucht. Dabei haben wir gesehen, dass die Einhüllenden für die verschiedenen Kanäle keine propagierenden Lösungen haben. Dies war für eine einfallende Frequenz in der Bandlücke zu erwarten.

Daraufhin wurde das Transmissionsproblem durch einen endlichen Photonischen Kristall für den linearen Fall behandelt. Die Frequenz des einfallenden Wellenfeldes lag dabei in der Bandlücke nahe einer Bandkante. Bei der Betrachtung der Anschlussbedingungen stellten wir fest, dass die Oberfläche des Photonischen Kristalls, also der Schnitt durch die Einheitszelle

des Photonischen Kristalls, die Werte der Trägerwelle an der Kristallkante bestimmt und damit Auswirkungen auf die Ankopplung der äusseren Felder hat. Die Anschlussbedingungen lieferten uns ein Gleichungssystem, durch dessen Lösung die Einhüllende im Photonischen Kristall, das reflektierte und das transmittierte Wellenfeld festgelegt wird. Das Gleichungssystem wurde für einen speziellen Fall gelöst und die Ergebnisse aufgezeigt. Ein Vergleich mit anderen Methoden ergab ferner, dass unsere Methode wesentlich effektiver ist als die Entwicklung nach Ebenen Wellen (PWE) oder der direkten Simulation mittels Finiter-Differenzen Time-Domain Verfahren (FDTD).

Ausblick

Mit den hier aufgeführten Berechnungen wurde lediglich der Grundstein für weitere Behandlungen von nichtlinearen Effekten in Photonischen Kristallen gelegt. Beispielsweise könnte der nächste Schritt sein, das Transmissionsproblem für eine Frequenz im Band zu erfassen. Ein weiteres Ziel ist die Erweiterung des Transmissionsproblems auf den nichtlinearen Fall. In diesem muss die Kopplung der Kanäle sowohl durch die Nichtlinearität als auch durch die Anschlussbedingungen berücksichtigt werden. Wir sind in unserer Berechnung davon ausgegangen, dass nur eine Blochwelle als Trägerwelle angeregt wird. Es können bei einer Frequenz tief in der Bandlücke jedoch auch beide Blochwellen an den Bandkanten angeregt werden. Ebenso ist es denkbar, dass für eine einfallenden Frequenz zwei Blochwellen im Band angeregt werden. Daher müssen die Überlegungen auf mehrere durch Nichtlinearität gekoppelte Trägerwellen ausgedehnt werden.

Danksagung

An dieser Stelle möchte ich mich bei alle jenen bedanken, die zur Entstehung dieser Diplomarbeit beigetragen haben. Mein besonderer Dank gilt

- Dr. Kurt Busch für die hervorragende Betreuung meiner Diplomarbeit, die angenehme Zusammenarbeit und die Bereitschaft, jederzeit mit viel Geduld auf meine Fragen einzugehen,
- Prof. Dr. Peter Wölfle, der es mir ermöglicht hat, am Institut für Theorie der Kondensierten Materie meine Diplomarbeit anzufertigen,
- Prof. Dr. Ralph von Balz für die Übernahme des Koreferates,
- Lasha Tkeshelashvili, Andreas Lubatsch, Daniel Hermann, Matthias Schillinger, Dieter Walter, Frank Hagmann, Dr. Antonio Garcia-Martin für die vielen fruchtbaren Diskussionen, ihre Unterstützung und Hilfe sowie die angenehme Atmosphäre.

Ganz besonders danken möchte ich meinen Eltern, die mir den Weg zum Studium der Physik an der Universität Karlsruhe erst eröffnet und ermöglicht haben. Weiterhin bin ich meinem Bruder zu Dank verpflichtet.

Hiermit versichere ich, diese Diplomarbeit selbständig und nur mit den angegebenen Quellen und Hilfsmitteln angefertigt zu haben.

Karlsruhe, 14. Dezember 2001

Anhang A

Gruppengeschwindigkeit

Zur numerischen Berechnung der Gruppengeschwindigkeit geht man von der aus der Störungsrechnung bekannten Gleichung

$$\vec{v}_{m\vec{k}}^{(a)} = \frac{c^2}{\omega_{m\vec{k}}} \left(b, m\vec{k} \left| \hat{\Omega}(\vec{k}) \right| a, m\vec{k} \right) \delta_{ab}$$

aus. Offensichtlich erhält man diese Gleichung auch aus

$$\hat{\Omega}(\vec{k}) \left| a, m\vec{k} \right\rangle = \frac{\epsilon_p(\vec{r})}{c^2} \omega_{m\vec{k}} \vec{v}_{m\vec{k}}^{(a)} \left| a, m\vec{k} \right\rangle . \quad (\text{A.1})$$

wenn man auf $\left(b, m\vec{k} \left| \right.$ projiziert. Wir wollen nun aber obige Gleichung mit dem Betrachtungsrichtung \vec{q} multiplizieren und erhalten dann

$$\vec{q} \cdot \hat{\Omega}(\vec{k}) \left| a, m\vec{k} \right\rangle = \frac{\epsilon_p(\vec{r})}{c^2} \omega_{m\vec{k}} \vec{q} \cdot \vec{v}_{m\vec{k}}^{(a)} \left| a, m\vec{k} \right\rangle . \quad (\text{A.2})$$

Zur numerischen Berechnung benötigen wir die bisher noch nicht bekannte Basisfunktion $\left| a, m\vec{k} \right\rangle$. Aus der Bandstrukturrechnung ergeben sich aber Basisfunktionen, die eine Darstellung von $\left| a, m\vec{k} \right\rangle$ der folgenden Form erlaubt

$$\left| a, m\vec{k} \right\rangle = \sum_{n=m}^{m+(g-1)} g_n^{(a)} \left| n\vec{k} \right\rangle . \quad (\text{A.3})$$

Die unbekannte Grösse ist hier der Gewichtungsfaktor $g_n^{(a)}$. Eingesetzt in die Gleichung erhält man

$$\vec{q} \cdot \hat{\Omega}(\vec{k}) \sum_n g_n^{(a)} \left| n\vec{k} \right\rangle = \frac{\epsilon_p(\vec{r})}{c^2} \omega_{m\vec{k}} \vec{q} \cdot \vec{v}_{m\vec{k}}^{(a)} \sum_n \left| n\vec{k} \right\rangle , \quad (\text{A.4})$$

wobei n über alle entarteten Bänder läuft. Eine Matrixgleichung erhält man nun indem man obige Gleichung mit $\left\langle l\vec{k} \left| \right.$ von links multipliziert und über l

summiert. Der Index l läuft dabei ebenfalls über alle entarteten Bänder, er befindet sich im entarteten Untervektorraum. Die Gleichung lautet

$$\begin{aligned} \sum_n \sum_l \langle l\vec{k} | \vec{q} \cdot \hat{\Omega}(\vec{k}) | n\vec{k} \rangle g_n^{(a)} \\ = \frac{\omega_{m\vec{k}}}{c^2} \vec{q} \cdot \vec{v}_{m\vec{k}}^{(a)} \sum_n \sum_l \langle l\vec{k} | \epsilon_p(\vec{r}) | n\vec{k} \rangle g_n^{(a)}. \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

Auf der linken Seite hat man also die Matixelemente einer Matrix $\hat{\Omega}(\vec{q}, \vec{k})$ mit

$$[\hat{\Omega}(\vec{q}, \vec{k})]_{lm} = \langle l\vec{k} | \vec{q} \cdot \hat{\Omega}(\vec{k}) | m\vec{k} \rangle. \quad (\text{A.6})$$

Die rechte Seite kann vereinfacht werden mit Hilfe der Normierungsbedingung. Es folgt somit

$$\sum_n \sum_l [\hat{\Omega}(\vec{q}, \vec{k})]_{lm} g_n^{(a)} = \frac{\omega_{m\vec{k}}}{c^2} \vec{q} \cdot \vec{v}_{m\vec{k}}^{(a)} \sum_n \sum_l \delta_{nl} g_n^{(a)}. \quad (\text{A.7})$$

Die linke Seite kann man nun als Multiplikation eines "Vektors" $g^{(a)}$, welcher aus den einzelnen Gewichtungsfaktoren besteht, mit der Matrix $\hat{\Omega}(\vec{q}, \vec{k})$ auffassen. Auf der rechten Seite steht dann die Einheitsmatrix \hat{E} multipliziert mit $g^{(a)}$. Bringt man alles auf die rechte Seite, so erhält man die Gleichung

$$\left[\hat{\Omega}(\vec{q}, \vec{k}) - \hat{E} \frac{\omega_{m\vec{k}}}{c^2} \vec{q} \cdot \vec{v}_{m\vec{k}}^{(a)} \right] g^{(a)} = 0. \quad (\text{A.8})$$

Dies ist offensichtlich ein Eigenwertproblem mit dem Eigenwert

$$\lambda_a = \frac{\omega_{m\vec{k}}}{c^2} \vec{q} \cdot \vec{v}_{m\vec{k}}^{(a)} \quad (\text{A.9})$$

und dem dazugehörigen Eigen-"Vektor" $g^{(a)}$. Der Eigenwert und somit auch $g^{(a)}$ sind von der Betrachtungsrichtung \vec{q} abhängig. Daher erhält man je nach Betrachtungsrichtung neue Basisvektoren, die ja über die Gewichtungsfaktoren im Eigenvektor festgelegt werden.

Zur weiteren Rechnung ist es jedoch von Vorteil nicht die Geschwindigkeit in Betrachtungsrichtung zu wissen, sondern die einzelnen Geschwindigkeitskomponenten, welche mit dem Einheitsvektor in Betrachtungsrichtung dann die Geschwindigkeit in jene Richtung ergeben. Um diese Komponenten zu erhalten, wählt man einmal die Betrachtungsrichtung entlang der x-Achse und einmal entlang der y-Achse. Man erhält dann zwei Determinantengleichungen mit

$$\det \left(\hat{\Omega}(\vec{q}, \vec{k})_1 - \hat{E} \frac{\omega_{m\vec{k}}}{c^2} v_{m\vec{k},1}^{(a)} \right) = 0 \quad (\text{A.10})$$

$$\det \left(\hat{\Omega}(\vec{q}, \vec{k})_2 - \hat{E} \frac{\omega_{m\vec{k}}}{c^2} v_{m\vec{k},2}^{(a)} \right) = 0. \quad (\text{A.11})$$

Diese Gleichungen können nun numerisch mit Hilfe der LAPACK-Routinen gelöst werden. Man erhält daraus dann den Eigenwert λ_a für \vec{q} auf der x bzw. y Achse. Somit können die Komponenten von $\vec{v}_{m\vec{k}}^{(a)}$ einfach berechnet werden. Die Gruppengeschwindigkeit in eine bestimmte Richtung \vec{r} erhält man dann, indem man den erhaltenen Gruppengeschwindigkeitsvektor auf diese Richtung projiziert.

Anhang B

Gruppengeschwindigkeitsdispersion

Es wurde schon erwähnt, dass die Gruppengeschwindigkeitsdispersion eine 2x2-Matrix ist. Wir wollen uns nun zunutze machen, dass man jede Matrix immer in eine Addition aus einer symmetrischen und einer antisymmetrischen Matrix darstellen kann. Für unsere Gruppengeschwindigkeitsdispersion bedeutet dies

$$\begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{00} \\ M_{00} & M_{22} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & A \\ -A & 0 \end{pmatrix} .$$

Mit diesem Ansatz gehen wir nun in die linke Seite der Gleichung für die Gruppengeschwindigkeitsdispersion ein und erhalten

$$\vec{q} \overleftrightarrow{M}_{m\vec{k}} \vec{q} = q_1^2 M_{11} + q_2^2 M_{22} + 2q_1 q_2 M_{00} + q_1 q_2 A - q_1 q_2 A .$$

Dabei sind q_1 und q_2 die beiden Komponenten von \vec{q} . Offensichtlich entfällt der antisymmetrische Anteil. Wir können in unserem Fall also die Gruppengeschwindigkeitsdispersion als symmetrische Matrix annehmen. Multiplizieren wir nun die Gleichung für die Gruppengeschwindigkeitsdispersion aus, so erhalten wir

$$\begin{aligned} q_1^2 M_{11} + q_2^2 M_{22} + 2q_1 q_2 M_{00} &= (q_1^2 + q_2^2) \frac{c^2}{2\omega_{m\vec{k}}} \langle a, m\vec{k} | a, m\vec{k} \rangle \\ &+ \frac{c^2}{\omega_{m\vec{k}}} \sum_{l \neq n} \langle a, m\vec{k} | q_1 \hat{\Omega}(\vec{k})_x + q_2 \hat{\Omega}(\vec{k})_y | l\vec{k} \rangle \\ &\quad \cdot \left(q_1 \vec{A}_{l\vec{k};x}^{(a)} + q_2 \vec{A}_{l\vec{k};y}^{(a)} \right) \\ &- \frac{1}{2\omega_{m\vec{k}}} \left(q_1 \vec{v}_{m\vec{k};x}^{(a)} + q_2 \vec{v}_{m\vec{k};y}^{(a)} \right)^2 . \end{aligned}$$

Ordnet man dies nun nach q_1^2 , q_2^2 und $q_1 q_2$, so erhält man folgende Ausdrücke für die einzelnen Komponenten der Gruppengeschwindigkeitsdispersion

$$M_{11} = \frac{c^2}{2\omega_{m\vec{k}}} \left(a, m\vec{k} | a, m\vec{k} \right) - \frac{1}{2\omega_{m\vec{k}}} v_{(a),x}^2 + \frac{c^2}{\omega_{m\vec{k}}} \sum_{l \neq n} \frac{2c^2}{\omega_{m\vec{k}}^2 - \omega_{l\vec{k}^2}} \left(a, m\vec{k} | \hat{\Omega}(\vec{k})_x | l\vec{k} \right) \left\langle l\vec{k} | \hat{\Omega}(\vec{k})_x | a, m\vec{k} \right\rangle \quad (\text{B.1})$$

$$M_{22} = \frac{c^2}{2\omega_{m\vec{k}}} \left(a, m\vec{k} | a, m\vec{k} \right) - \frac{1}{2\omega_{m\vec{k}}} v_{(a),y}^2 + \frac{c^2}{\omega_{m\vec{k}}} \sum_{l \neq n} \frac{2c^2}{\omega_{m\vec{k}}^2 - \omega_{l\vec{k}^2}} \left(a, m\vec{k} | \hat{\Omega}(\vec{k})_y | l\vec{k} \right) \left\langle l\vec{k} | \hat{\Omega}(\vec{k})_y | a, m\vec{k} \right\rangle \quad (\text{B.2})$$

$$M_{00} = -\frac{1}{2\omega_{m\vec{k}}} \vec{v}_{m\vec{k};x}^{(a)} \cdot \vec{v}_{m\vec{k};y}^{(a)} + \frac{c^2}{\omega_{m\vec{k}}} \sum_{l \neq n} \frac{2c^2}{\omega_{m\vec{k}}^2 - \omega_{l\vec{k}^2}} \left(a, m\vec{k} | \hat{\Omega}(\vec{k})_x | l\vec{k} \right) \left\langle l\vec{k} | \hat{\Omega}(\vec{k})_y | a, m\vec{k} \right\rangle . \quad (\text{B.3})$$

Diese Gleichungen können mit Hilfe der aus dem vorherigen Programm bestimmten Gruppengeschwindigkeiten berechnet werden.

Anhang C

Eindimensionaler Fall

Um das Schema genauer darzustellen betrachten wir nun einmal den eindimensionalen Fall. Dies bedeutet, dass wir nur einen Kanal zu berücksichtigen haben, da keine Variation in y -Richtung auftritt. Wir setzen also $N = 1$. Unsere Matrix hat dann die Dimension 4×4 und die Vektoren besitzen 4 Komponenten. Der einzige betrachtete Kanal trägt die Kanalzahl $n = 0$, da $N = 2n + 1$ gesetzt wurde. Daher sind nur die Unbekannten A_0 , B_0 , T_0 und R_0 zu finden. Für den betrachteten Fall der Kanalzahl $n = 0$ gilt weiterhin $G_0 = 0$ und dadurch vereinfacht sich der Ausdruck für $\xi^{(n)}$ zu

$$\xi_{1/2}^{(0)} = \pm \sqrt{\frac{\gamma}{M_{m\vec{k}}^{(11)}}}.$$

Eine weitere Folge von $G_0 = 0$ ist, dass $k_0^{(r)} = k$ und $k_0^{(t)} = -k$ gilt. Da wir den eindimensionalen Fall betrachten, entfallen auch die y -Komponenten in den zuvor hergeleiteten Gleichungen des Gleichungssystems. Ebenso entfällt die Summe über alle Kanalzahlen n bzw. j . Das zu lösende Gleichungssystem hat mit diesen Vereinfachungen die Form

$$\begin{aligned} T_0 &= A_0 \left(D_{m\vec{k}}^{(0)} + i\xi_1^{(0)} \left[\sum_{l \neq m} D_{l\vec{k}}^{(0)} \vec{\Gamma}_{\vec{k}}^{lm} \right]_x \right) \\ &+ B_0 \left(D_{m\vec{k}}^{(0)} + i\xi_2^{(0)} \left[\sum_{l \neq m} D_{l\vec{k}}^{(0)} \vec{\Gamma}_{\vec{k}}^{lm} \right]_x \right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
-ikT_0 &= A_0 \left(i\xi_1^{(0)} D_{m\vec{k}}^{(0)} + T_{m\vec{k}}^{(0)} - (\xi_1^{(0)})^2 \left[\sum_{l \neq m} D_{l\vec{k}}^{(0)} \vec{\Gamma}_{\vec{k}}^{lm} \right]_x \right. \\
&\quad \left. + i\xi_1^{(0)} \left[\sum_{l \neq m} T_{l\vec{k}}^{(0)} \vec{\Gamma}_{\vec{k}}^{lm} \right]_x \right) \\
&+ B_0 \left(i\xi_2^{(0)} D_{m\vec{k}}^{(0)} + T_{m\vec{k}}^{(0)} - (\xi_2^{(0)})^2 \left[\sum_{l \neq m} D_{l\vec{k}}^{(0)} \vec{\Gamma}_{\vec{k}}^{lm} \right]_x \right. \\
&\quad \left. + i\xi_2^{(0)} \left[\sum_{l \neq m} T_{l\vec{k}}^{(0)} \vec{\Gamma}_{\vec{k}}^{lm} \right]_x \right) \\
E_0 + R_0 &= A_0 \left(F_{m\vec{k}}^{(0)} + i\xi_1^{(0)} \left[\sum_{l \neq m} F_{l\vec{k}}^{(0)} \vec{\Gamma}_{\vec{k}}^{lm} \right]_x \right) e^{i\xi_1^{(0)} L} \\
&+ B_0 \left(F_{m\vec{k}}^{(0)} + i\xi_2^{(0)} \left[\sum_{l \neq m} F_{l\vec{k}}^{(0)} \vec{\Gamma}_{\vec{k}}^{lm} \right]_x \right) e^{i\xi_2^{(0)} L} \\
-ikE_0 + ikR_0 &= A_0 \left(i\xi_1^{(0)} F_{m\vec{k}}^{(0)} + S_{m\vec{k}}^{(0)} - (\xi_1^{(0)})^2 \left[\sum_{l \neq m} F_{l\vec{k}}^{(0)} \vec{\Gamma}_{\vec{k}}^{lm} \right]_x \right. \\
&\quad \left. + i\xi_1^{(0)} \left[\sum_{l \neq m} S_{l\vec{k}}^{(0)} \vec{\Gamma}_{\vec{k}}^{lm} \right]_x \right) e^{i\xi_1^{(0)} L} \\
&+ B_0 \left(i\xi_2^{(0)} F_{m\vec{k}}^{(0)} + S_{m\vec{k}}^{(0)} - (\xi_2^{(0)})^2 \left[\sum_{l \neq m} F_{l\vec{k}}^{(0)} \vec{\Gamma}_{\vec{k}}^{lm} \right]_x \right. \\
&\quad \left. + i\xi_2^{(0)} \left[\sum_{l \neq m} S_{l\vec{k}}^{(0)} \vec{\Gamma}_{\vec{k}}^{lm} \right]_x \right) e^{i\xi_2^{(0)} L} .
\end{aligned}$$

Um diese Gleichungen in eine Matrixgleichung der Form (5.24) umzuschreiben, wollen wir zunächst die beiden Vektoren \mathbf{a} und \mathbf{b} festlegen. Im \mathbf{a} sollen die unbekanntenen Grössen, also in unserem Fall T_0, R_0, A_0 und B_0 , stehen. Wir setzen daher

$$\mathbf{a} = \begin{pmatrix} T_0 \\ R_0 \\ A_0 \\ B_0 \end{pmatrix} .$$

Der Vektor \mathbf{b} enthält die nichtlinearen Komponenten der Gleichungen. Wir bleiben der Reihenfolge der obigen Gleichungen treu und erhalten daher

$$\mathbf{b} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ E_0 \\ -ikE_0 \end{pmatrix} .$$

Die durch

$$\hat{M} = \{m_{ij}\}; \quad i, j = 1, 2, 3, 4$$

definierten Matrixelemente der Matrix \hat{M} müssen noch bestimmt werden. Durch obige Wahl von \mathbf{a} sind die Spalten (Index i) der Matrix \hat{M} festgelegt. In der ersten Spalte der Matrix stehen daher die Koeffizienten der Unbekannten T_0 , in der zweiten die von R_0 . Die dritte Spalte besteht aus den Koeffizienten von A_0 und die vierte aus denen von B_0 . Die Zeilen der Matrix \hat{M} werden durch die Wahl von \mathbf{b} festgelegt. Die erste Zeile (Index j) entspricht dabei der ersten Gleichung, die zweite die der zweiten. In der dritten Zeile ist die dritte Gleichung und in der vierten die vierte zu finden. Somit sind die Matrixelemente wie folgt gegeben

$$\begin{aligned} m_{11} &= -1 \\ m_{12} &= 0 \\ m_{13} &= D_{m\vec{k}}^{(0)} + i\xi_1^{(0)} \left[\sum_{l \neq m} D_{l\vec{k}}^{(0)} \vec{\Gamma}_{\vec{k}}^{lm} \right]_x \\ m_{14} &= D_{m\vec{k}}^{(0)} + i\xi_2^{(0)} \left[\sum_{l \neq m} D_{l\vec{k}}^{(0)} \vec{\Gamma}_{\vec{k}}^{lm} \right]_x \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} m_{21} &= -ik \\ m_{22} &= 0 \\ m_{23} &= i\xi_1^{(0)} D_{m\vec{k}}^{(0)} + T_{m\vec{k}}^{(0)} - (\xi_1^{(0)})^2 \left[\sum_{l \neq m} D_{l\vec{k}}^{(0)} \vec{\Gamma}_{\vec{k}}^{lm} \right]_x \\ &\quad + i\xi_1^{(0)} \left[\sum_{l \neq m} T_{l\vec{k}}^{(0)} \vec{\Gamma}_{\vec{k}}^{lm} \right]_x \\ m_{24} &= i\xi_2^{(0)} D_{m\vec{k}}^{(0)} + T_{m\vec{k}}^{(0)} - (\xi_2^{(0)})^2 \left[\sum_{l \neq m} D_{l\vec{k}}^{(0)} \vec{\Gamma}_{\vec{k}}^{lm} \right]_x \\ &\quad + i\xi_2^{(0)} \left[\sum_{l \neq m} T_{l\vec{k}}^{(0)} \vec{\Gamma}_{\vec{k}}^{lm} \right]_x \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} m_{31} &= 0 \\ m_{32} &= -1 \\ m_{33} &= \left(F_{m\vec{k}}^{(0)} + i\xi_1^{(0)} \left[\sum_{l \neq m} F_{l\vec{k}}^{(0)} \vec{\Gamma}_{\vec{k}}^{lm} \right]_x \right) e^{i\xi_1^{(0)} L} \\ m_{34} &= \left(F_{m\vec{k}}^{(0)} + i\xi_2^{(0)} \left[\sum_{l \neq m} F_{l\vec{k}}^{(0)} \vec{\Gamma}_{\vec{k}}^{lm} \right]_x \right) e^{i\xi_2^{(0)} L} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
m_{41} &= 0 \\
m_{42} &= -ik \\
m_{43} &= \left(i\xi_1^{(0)} F_{m\vec{k}}^{(0)} + S_{m\vec{k}}^{(0)} - (\xi_1^{(0)})^2 \left[\sum_{l \neq m} F_{l\vec{k}}^{(0)} \vec{\Gamma}_{\vec{k}}^{lm} \right]_x \right. \\
&\quad \left. + i\xi_1^{(0)} \left[\sum_{l \neq m} S_{l\vec{k}}^{(0)} \vec{\Gamma}_{\vec{k}}^{lm} \right]_x \right) e^{i\xi_1^{(0)} L} \\
m_{44} &= \left(i\xi_2^{(0)} F_{m\vec{k}}^{(0)} + S_{m\vec{k}}^{(0)} - (\xi_2^{(0)})^2 \left[\sum_{l \neq m} F_{l\vec{k}}^{(0)} \vec{\Gamma}_{\vec{k}}^{lm} \right]_x \right. \\
&\quad \left. + i\xi_2^{(0)} \left[\sum_{l \neq m} S_{l\vec{k}}^{(0)} \vec{\Gamma}_{\vec{k}}^{lm} \right]_x \right) e^{i\xi_2^{(0)} L} .
\end{aligned}$$

Diese Matrixgleichung kann nun mit Hilfe von LAPACK-Routinen gelöst werden.

Literaturverzeichnis

- [1] E.Yablonovitch, Phys. Rev. Lett. **58**, 2059 (1987)
- [2] S.John, Phys. Rev. Lett. **58**, 3486 (1987)
- [3] C.M.Soukoulis,"Photonic Crystals and Light Localization in the 21st Century". NATO Science Series, Series C: Mathematical and Physical Sciences - Vol. 563
- [4] Hermann, Frank, Busch and Woelfle,"Photonic band structure computation". Optics Express **8** 3 2001
- [5] A.Nayfeh,"Perturbation Methods".
- [6] Sterke, Sipe,"Envelopefunction approach for the electrodynamics of nonlinear periodic structures". Physical Review A **38** 10 1988
- [7] Kurt Busch and Sajeev John,"Photonic band gap formation in certain self-organizing systems". Physical Review E **58** 3 1998
- [8] Diplomarbeit von Daniel Hermann
- [9] Krylov and Bogoliubov,"Introduction to Nonlinear Mechanics", Princeton University Press (1947).
- [10] A.Taflove,"Computational Electrodynamics: The Finite-Difference Time-Domain Method". Artech House 1995
- [11] K.Sakoda,"Optical properties of photonic crystals". Springer
- [12] Yeh, Yariv,"Optical Waves in Crystals".
- [13] Wei Chen and D.L.Mills,"Optical response of nonlinear dielectric film". Physical Review B **35** 2 1987
- [14] Wei Chen and D. L. Mills,"Gap Solitons and Nonlinear Optical Response of Superlattices". Physical Review Letters **58** 2 1987
- [15] C.Martijn de Sterke and J.E.Sipe,"Extensions and generalizations of an envelope-function approach for the electrodynamics of nonlinear periodic structures". Physical Review A **39** 10 1989

- [16] C.Martijn de Sterke and J.E.Sipe,"Coupled modes and the non-linear Schroedinger equation". Physical Review A **42** 1 1990
- [17] Tosiya Taniuti,"Reductivve Pertubarion Method and Far Fields of Wave Equations". Supp. Prog. The. Physics **55** 1974