

INSTITUT FÜR  
THEORIE DER KONDENSIERTEN MATERIE

FAKULTÄT FÜR PHYSIK  
UNIVERSITÄT KARLSRUHE

# **Bandstrukturrechnung für Photonische Kristalle mittels Mehrgitter-Verfahren**

Diplomarbeit

von

**Daniel Hermann**

12. Oktober 2001

Referent: Prof. Dr. P. Wölfle  
Korreferent: Prof. Dr. R. von Baltz

Diese Arbeit wurde mit dem Textsatzsystem  $\text{\LaTeX}$  unter Verwendung des KOMA-Script Pakets erstellt. Zur Erzeugung der Abbildungen wurde XFIG und XMGRACE verwendet. Die Konturplots wurden mit MATLAB<sup>®</sup> hergestellt.

Dieses Dokument ist auch erhältlich unter  
<http://www-tkm.physik.uni-karlsruhe.de/veroeffentlichungen/>

© Daniel Hermann, 2001

# Inhaltsverzeichnis

<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>1. Photonische Kristalle</b>	<b>5</b>
1.1. Grundlagen . . . . .	5
1.1.1. Wellengleichung . . . . .	6
1.1.2. Analogie zu elektronischen Kristallen . . . . .	7
1.1.3. Wellengleichung in 2D . . . . .	8
1.2. Eigenschaften: Bandstruktur für Photonen . . . . .	9
1.2.1. Bloch-Theorem . . . . .	9
1.2.2. Entstehung der Bandstruktur . . . . .	10
1.2.3. Skalierbarkeit . . . . .	10
1.3. Bandstrukturrechnung . . . . .	11
1.3.1. Allgemeines Vorgehen . . . . .	12
1.3.2. Bekannte Methoden zur Bandstrukturrechnung . . . . .	13
<b>2. Das Mehrgitter-Verfahren</b>	<b>15</b>
2.1. Diskretisierung . . . . .	16
2.2. Iterative Lösungsverfahren . . . . .	17
2.2.1. Ansatz zur Gewinnung von Iterationsverfahren . . . . .	18
2.2.2. Konvergenz und Glättungseigenschaft . . . . .	19
2.2.3. Algorithmus der einfachen Relaxation . . . . .	19
2.3. Zweigitter-Algorithmus . . . . .	20
2.3.1. Gitter-Hierarchie . . . . .	21
2.3.2. Prolongation und Restriktion . . . . .	21
2.3.3. Formulierung des Grobgitter-Problems (FAS) . . . . .	23
2.3.4. Zweigitter-Algorithmus . . . . .	24
2.4. Mehrgitter-Verfahren . . . . .	24
2.4.1. Vollständiges Mehrgitter-Verfahren (FMG) . . . . .	27
2.5. Eigenwertproblem und Mehrgitter-Verfahren . . . . .	29
2.5.1. Iterative Anpassung des Eigenwert . . . . .	29
2.5.2. Orthogonalisierung der Eigenmoden . . . . .	29
2.5.3. Ritz-Projektion . . . . .	30
2.5.4. Algorithmus für Eigenwertprobleme . . . . .	31
2.6. Verbesserungen und Ausblick . . . . .	32

<b>3. Anwendung auf 2D-Photonischen Kristall</b>	<b>35</b>
3.1. Modell . . . . .	35
3.2. Bandstruktur . . . . .	36
3.3. Modenstruktur . . . . .	37
3.3.1. Entartung . . . . .	39
3.3.2. Symmetrien und ungekoppelte Moden . . . . .	39
3.3.3. Kreuzungs- und Abstoßungspunkte . . . . .	52
3.4. Vergleich mit der Ebene-Wellen-Methode . . . . .	58
<b>4. Photonische Kristalle mit dispersiven Komponenten</b>	<b>61</b>
4.1. Frequenzabhängige Dielektrizitätsfunktion . . . . .	61
4.2. Fixpunktbestimmung . . . . .	62
4.3. Modellsystem: Zwei-Niveau-Atome in dielektrischer Matrix . . . . .	64
4.3.1. Parameterstudie . . . . .	67
4.4. Ausblick: beliebige Dielektrizitätsfunktionen . . . . .	70
4.4.1. Verallgemeinerung auf absorptive Materialien . . . . .	70
4.4.2. Einschränkungen . . . . .	71
<b>Zusammenfassung</b>	<b>73</b>
<b>A. Details zum Mehrgitter-Verfahren</b>	<b>75</b>
A.1. Schablonen-Notation . . . . .	75

# Einleitung

Die aktuelle Elektronik, wie sie zum Beispiel in Computerchips eingesetzt wird, stößt schon heute an ihre Grenzen. Die Taktraten erreichen Dimensionen, in denen die Schaltgeschwindigkeit der Transistoren eine Rolle zu spielen beginnt. Besonders in der Datenkommunikation werden elektronische Bauteile immer mehr zum Flaschenhals, da sowohl die Signalverarbeitungsgeschwindigkeiten als auch die Bandbreiten der Elektronik die hohen Datenraten der optischen Übertragung in Glasfasern nicht mehr verarbeiten können.

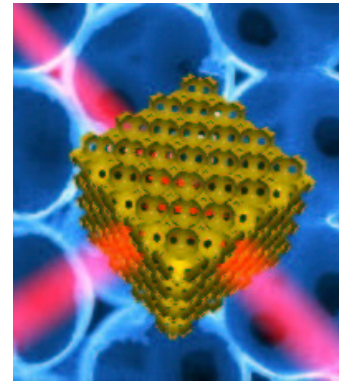
Deshalb gibt es immer mehr Anstrengungen, *photonische* Bauelemente zu entwickeln, die mit Licht (Photonen) anstatt mit Elektronen Signale verarbeiten können. Photonen haben zum einen den Vorteil, daß sie sich (im Vakuum) mit Lichtgeschwindigkeit ausbreiten, d.h. auch die Signalverarbeitungsgeschwindigkeit kann erhöht werden. Zum anderen wechselwirken Photonen nicht untereinander, wodurch sich z.B. zwei Lichtstrahlen problemlos durchdringen können. Dadurch sind beispielsweise parallele Operationen wesentlich einfacher und schneller zu realisieren als mit Elektronen. Ein weiterer Vorteil ist die wesentlich höhere Bandbreite im Infrarot-Frequenzbereich, der in der optischen Kommunikation heute eingesetzt wird.

All diese Gründe sprechen dafür, daß die *Photonik* eine ähnliche Entwicklung nehmen könnte wie die Elektronik im 20. Jahrhundert und schließlich in vielen Gebieten die Elektronik ersetzen könnte. Heute ist man noch weit vom "vollständig optischen Computer" (all-optical computer) entfernt, dennoch existieren schon Bauteile [1] wie einfache optische Gatter, die im übertragenen Sinne an die Röhrentechnologie in der Elektronik erinnern. Der große Durchbruch in der Elektronik wurde durch die Entwicklung der Halbleitertechnologie in der zweiten Hälfte des 20. Jahrhunderts geschafft, als man lernte, die elektronischen Eigenschaften von Halbleitern gezielt zu manipulieren, beispielsweise durch Dotierung, d.h. durch Einbringen von Defektatomen. Dadurch war es möglich, immer kleinere und leistungsfähigere hochintegrierte Bauteile zu entwickeln.

Erst seit circa 15 Jahren werden die sogenannten *Photonischen Kristalle* [2] betrachtet, die in starker Analogie „Halbleiter“ für Photonen darstellen. In diesen aus periodisch angeordneten dielektrischen „Atomen“ (z.B. Kugeln aus einem dielektrischen Material wie Silizium) aufgebauten Kristallen bewegen sich Photonen ähnlich wie Elektronen in herkömmlichen Kristallen unter dem Einfluß eines periodischen „Streupotentials“. Die erlaubten (oder auch nicht erlaubten) Energien oder Frequenzen werden durch eine *optische Bandstruktur* beschrieben, wichtige Größen wie z.B. die Gruppengeschwindigkeit oder die Zustandsdichte können sich beträchtlich vom

Vakuum unterscheiden. Durch geeignete Konstruktion solcher Photonischer Kristalle und durch Einbringen von Defekten lassen sich die Eigenschaften gezielt verändern, wodurch die Realisierung ganz neuer integrierter optischer Bauteile ermöglicht werden könnte. Die Verwendung nichtlinearer Materialien erweitert das Spektrum der Anwendungen noch zusätzlich.

Photonische Kristalle bieten andererseits aber auch ganz neue Möglichkeiten, Grundlagenforschung zu betreiben. Nicht zufällig wurden diese Werkstoffe 1987 von Eli Yablonovitch [3] und Sajeev John [4] unabhängig voneinander im Zusammenhang mit zwei sehr fundamentalen Fragestellungen der Physik betrachtet, nämlich der Frage, ob sich die spontane Emission von Atomen mittels Photonischer Kristalle kontrollieren ließe [3], und der Frage nach der Lokalisierung von Licht in ungeordneten Photonischen Kristallen [4]. Durch die Schaffung eines „Designervakuums“ mit der gewünschten Zustandsdichte in Photonischen Kristallen lassen sich bisher noch ungelöste Probleme in der Quantenoptik gezielt studieren.



optischer Transistor

Thema dieser Diplomarbeit ist die *Bandstrukturrechnung für Photonische Kristalle*, die ein zentrales Element zur Charakterisierung Photonischer Kristalle darstellt. Es soll ein neues Verfahren zur Bandstrukturrechnung vorgestellt werden, welches auf der Mehrgitter-Methode basiert (kürzlich teilweise veröffentlicht in [5]). Mehrgitter-Verfahren werden schon längere Zeit in anderen Bereichen, hauptsächlich in den Ingenieurwissenschaften, sehr erfolgreich zur Lösung partieller Differentialgleichungen eingesetzt. Sie gelten als äußerst effiziente Methoden zur iterativen Lösung vieler unterschiedlicher Typen von Differentialgleichungen (die Komplexität ist linear in der Anzahl der Unbekannten) und werden beispielsweise in der Strömungsmechanik (z.B. Lösung der Navier-Stokes-Gleichungen im Flugzeugbau) angewandt.

Ein weiterer Bestandteil dieser Arbeit ist die Vorstellung einer Methode zur Bandstrukturrechnung für Photonische Kristalle mit dispersiven Komponenten, also Komponenten mit frequenzabhängiger Dielektrizitätsfunktion. Für alle Materialien ist im allgemeinen die Dielektrizitätsfunktion frequenzabhängig, jedoch kann die Frequenzabhängigkeit weit weg von Resonanzen oft vernachlässigt werden. Materialien mit starker Frequenzabhängigkeit sind dagegen beispielsweise Metalle unterhalb der Plasmafrequenz oder polare Halbleiter nahe der Resonanzfrequenz, aber auch Dielektrika mit Beimischungen von Zwei-Niveau-Atomen. Es können in solchen Fällen auch interessante neue Phänomene auftreten, die die ohnehin schon reiche Vielfalt der Anwendungen Photonischer Kristalle noch erweitern könnten. Mehr zu Photonischen Kristallen mit frequenzabhängigen Dielektrizitätsfunktionen findet man in [6, 7, 8].

---

---

## Überblick

Die vorliegende Arbeit ist folgendermaßen aufgebaut: Zunächst werden in *Kapitel 1* die wichtigsten Grundlagen und Begriffe zu Photonischen Kristalle erklärt und die Analogie zu elektronischen Kristallen etwas näher betrachtet. Wesentliche Eigenschaften wie die Ausbildung einer Bandstruktur werden vorgestellt und es wird auf die Grundlagen der Bandstrukturrechnung eingegangen.

*Kapitel 2* beinhaltet eine Einführung in die Konzepte des Mehrgitter-Verfahrens anhand der schrittweisen Verbesserung einfacher Iterationsverfahren zur Lösung von Randwertproblemen. Das Verfahren wird auf Eigenwertprobleme erweitert. Der resultierende Algorithmus ist weitgehend unabhängig von der Diskretisierungsmethode. Mögliche Verbesserungen, unter anderem zu der verwendeten Finite-Differenzen-Diskretisierung auf uniformen Gittern, werden diskutiert.

In *Kapitel 3* wird dann das in Kapitel 2 hergeleitete Verfahren auf einen speziellen 2D Modellkristall angewandt und die Ergebnisse vorgestellt. Die resultierende Band- und Modenstruktur wird anhand von Plots der Eigenmoden entlang der Symmetrielinien der Brillouinzone ausführlich diskutiert.

*Kapitel 4* befasst sich mit Photonischen Kristallen mit dispersiven Komponenten, d.h. Komponenten mit frequenzabhängiger Dielektrizitätsfunktion. Es wird ein Algorithmus präsentiert, der die Berechnung von Bandstrukturen solcher Kristalle erlaubt. Dies wird dann anhand eines Beispielkristalls vorgeführt, der aus dielektrischen Zylindern besteht, in welchen Zwei-Niveau-Atome eingebracht sind. Es zeigt sich, daß bei solchen Kristallen mit dispersiven Komponenten interessante neue Phänomene in der Bandstruktur auftauchen können.

Schließlich werden die wesentlichen Ergebnisse im abschließenden Kapitel zusammengefasst.





# 1. Photonische Kristalle

## 1.1. Grundlagen

Photonische Kristalle sind periodisch strukturierte Dielektrika. Sie bestehen z.B. aus einer periodischen Anordnung von dielektrischen „Atomen“, d.h. einzelnen Streuern aus dielektrischem Material. In Abbildung 1.1(a) ist ein dreidimensionaler photonischer Kristall aus sphärischen Streuern schematisch dargestellt. Es sind auch zwei- und eindimensionale Kristalle denkbar (Abbildungen 1.1(b) und 1.1(c)), deren „Atome“ beispielsweise Zylinder bzw. einzelne dielektrische Schichten sind. Darüber hinaus kann man sich auch inverse Strukturen, wo die Zwischenräume zwischen den „Atomen“ mit dielektrischem Material gefüllt sind, als Photonische Kristalle vorstellen.

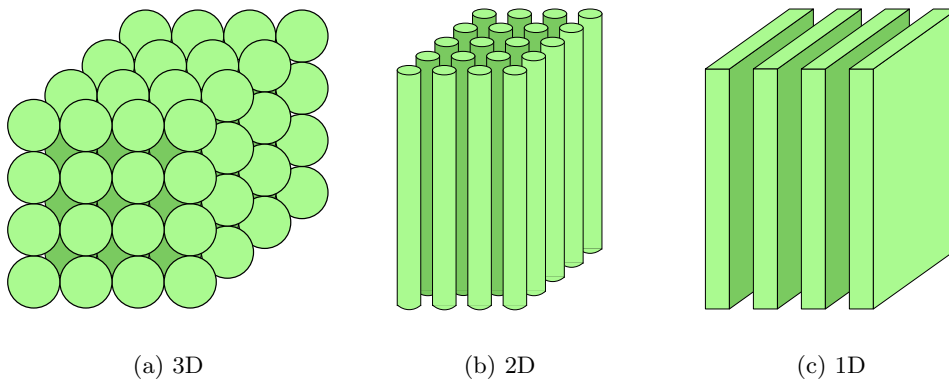


Abbildung 1.1.: schematische Darstellung von Beispielen Photonischer Kristalle in unterschiedlichen Dimensionen

In Analogie zu elektronischen Kristallen, wo Streuung der Elektronen am effektiven Kristallpotential stattfindet, werden Photonen in photonischen Kristallen an Übergängen zwischen Materialien mit unterschiedlichen Brechungsindizes bzw. Dielektrizitätskonstanten gestreut. Sind diese Übergänge periodisch angeordnet, so spielt diese periodisch variierende Dielektrizitätskonstante die Rolle eines „Kristallpotentials“ für Photonen und man erhält sehr ähnliche Phänomene für elektromagnetische Wellen, wie man sie für Elektronenwellen schon kennt. Insbesondere erhält man eine *Bandstruktur* für Photonen.

### 1.1.1. Wellengleichung

Die Dynamik des elektromagnetischen Feldes wird beschrieben durch die Maxwellgleichungen (SI-Einheiten)

$$\nabla \cdot \vec{D} = \rho \qquad \nabla \cdot \vec{B} = 0 \qquad (1.1)$$

$$\nabla \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \qquad \nabla \times \vec{H} = \vec{j} + \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} \qquad (1.2)$$

mit dem elektrischen bzw. magnetischen Feld  $\vec{E}$  und  $\vec{H}$ , der Verschiebungsdichte  $\vec{D}$  und der magnetischen Induktion  $\vec{B}$ . In isotropen Medien und unter Vernachlässigung von Quadrupol- und höheren Momenten gelten die Materialgleichungen

$$\vec{D} = \epsilon_0 \epsilon \vec{E} \qquad (1.3)$$

$$\vec{B} = \mu_0 \mu \vec{H} \ , \qquad (1.4)$$

wobei  $\epsilon$  die Dielektrizitätskonstante und  $\mu$  die Permeabilität des betrachteten Mediums bezeichnen. Wir gehen im folgenden immer davon aus, daß keine freien Ladungen und Ströme auftreten und betrachten nur nichtmagnetische Medien:

$$\rho = 0, \quad \vec{j} = 0, \quad \mu = 1 \ . \qquad (1.5)$$

Aus den Gleichungen (1.1) und (1.2) läßt sich die zeitabhängige Wellengleichung

$$\nabla \times \nabla \times \vec{E}(\vec{r}, t) - \epsilon(\vec{r}) \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \vec{E}(\vec{r}, t) = 0 \qquad c = \frac{1}{\sqrt{\epsilon_0 \mu_0}} \qquad (1.6)$$

für das  $\vec{E}$ -Feld einfach ableiten (siehe z.B. [9]). In Photonischen Kristallen variiert die Dielektrizitätskonstante im Raum und wurde daher ortsabhängig geschrieben. Mit dem Ansatz einer harmonischen Zeitabhängigkeit

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \vec{E}(\vec{r}) e^{-i\omega t} \qquad (1.7)$$

erhalten wir die stationäre Wellengleichung:

$$\boxed{\nabla \times \nabla \times \vec{E}(\vec{r}) - \epsilon(\vec{r}) \frac{\omega^2}{c^2} \vec{E}(\vec{r}) = 0} \qquad (1.8)$$

Analog läßt sich die Wellengleichung für das  $\vec{H}$ -Feld herleiten:

$$\boxed{\nabla \times \frac{1}{\epsilon(\vec{r})} \nabla \times \vec{H}(\vec{r}) - \frac{\omega^2}{c^2} \vec{H}(\vec{r}) = 0} \qquad (1.9)$$

Diese Gleichungen stellen jeweils Eigenwertprobleme für die Felder mit den Eigenwerten  $\omega^2/c^2$  dar. Sie für eine bestimmte Kristallstruktur und Dielektrizitätsfunktion  $\epsilon(\vec{r})$  und geeignete Bloch-Randbedingungen zu lösen ist allgemein die Aufgabe der Bandstrukturrechnung.

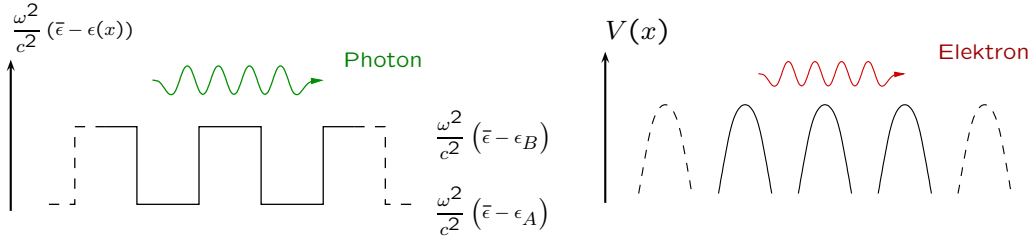


Abbildung 1.2.: Analogie zwischen Elektronen und Photonen in einer eindimensionalen Darstellung. Das „Potential“ im Photonischen Kristall hängt selbst von der „Energie“ ab.

### 1.1.2. Analogie zu elektronischen Kristallen

Wir wollen die Analogie zwischen elektronischen und photonischen Kristallen etwas genauer beleuchten. Für Elektronen im Kristallpotential  $V(\vec{r})$  gilt die Schrödingergleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\nabla^2\psi(\vec{r}) + V(\vec{r})\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}), \quad (1.10)$$

wobei  $V(\vec{r})$  eine gitterperiodische Funktion ist. Analog gilt für Photonen in einem Photonischen Kristall die Wellengleichung, die folgendermaßen umgeschrieben werden kann:

$$\nabla \times \nabla \times \vec{E}(\vec{r}) + \underbrace{\frac{\omega^2}{c^2}(\bar{\epsilon} - \epsilon(\vec{r}))}_{\text{„Potential“}} \vec{E}(\vec{r}) = \underbrace{\frac{\omega^2}{c^2}\bar{\epsilon}}_{\text{„Energie“}} \vec{E}(\vec{r}). \quad (1.11)$$

Hierbei ist  $\bar{\epsilon}$  z.B. die über den Raum gemittelte Dielektrizitätskonstante. Den gekennzeichneten Term auf der linken Seite können wir als eine Art „Kristallpotential“ für Photonen auffassen, während auf der rechten Seite ein „Energieterm“ auftaucht. Das Frequenzquadrat übernimmt also hier im wesentlichen die Rolle eines „Energieeigenwerts“. Wir sehen somit, daß die Wellengleichung eine zur Schrödingergleichung sehr ähnliche Struktur hat und wir deshalb sehr ähnliche Eigenschaften der Photonen in Photonischen Kristallen im Vergleich zu Elektronen in elektronischen Kristallen erwarten.

Die Analogie hat aber auch ihre Grenzen:

- Die „Energie“ der Photonen ist immer positiv.
- Das „Potential“ ist selbst „energieabhängig“.
- Das elektromagnetische Feld hat im Gegensatz zur elektronischen Wellenfunktion Vektorcharakter.

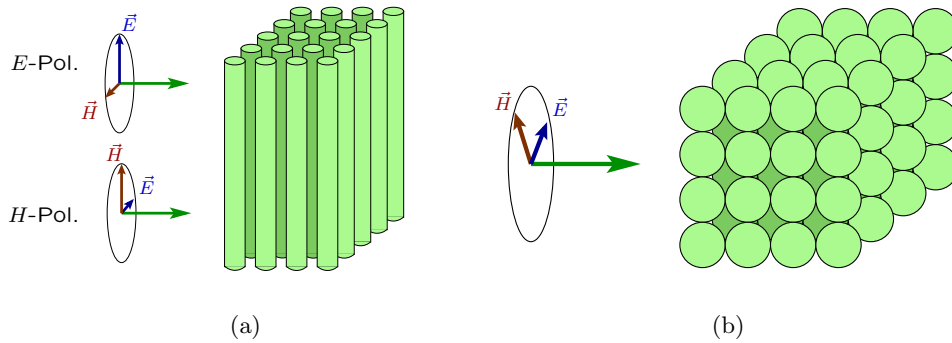


Abbildung 1.3.: (a) In 2D entkoppeln die  $E$ -Polarisation und die  $H$ -Polarisation, während (b) in 3D die verschiedenen Polarisationen mischen.

Die positive Energie und die Energieabhängigkeit des Potentials führen beispielsweise dazu, daß Lokalisierung für Photonen schwerer zu erreichen ist. Während für Elektronen auch negative Energien erlaubt sind und die Lokalisierungstendenz zu kleineren Energien hin zunimmt, nimmt für Photonen das „Potential“ zu kleineren „Energien“ hin ab, und der Streumechanismus, der schließlich zur Lokalisierung führen würde, verschwindet für  $\omega^2/c^2 \rightarrow 0$  vollständig.

Der Vektorcharakter des elektromagnetischen Feldes bewirkt zum Beispiel, daß Photonische Kristalle mit vollständigen Bandlücken (Frequenzbereiche, für die unabhängig von der Einfallsrichtung und der Polarisation keine Wellenausbreitung möglich ist) schwerer zu realisieren sind, da die Polarisation des Feldes einen zusätzlichen Freiheitsgrad darstellt. Durch diesen Freiheitsgrad ergeben sich andererseits aber auch neue Eigenschaften, die für Elektronen nicht auftreten.

### 1.1.3. Wellengleichung in 2D

Das elektrische Feld  $\vec{E}$  ist eine vektorielle Größe, deshalb muß die Lösung der Wellengleichungen (1.8) und (1.9) in 3D als volles Vektorproblem behandelt werden. Die verschiedenen Polarisationen mischen dabei und können nicht getrennt voneinander betrachtet werden (s. Abb. 1.3(b)).

In 2D-Kristallen, wenn wir Wellenausbreitung senkrecht zur ausgezeichneten Achse, also in der Ebene der Periodizität betrachten, ist es jedoch möglich, die beiden Polarisationen, in welchen zum einen das  $\vec{E}$ -Feld parallel zu den Zylindern des Photonischen Kristalls steht ( $E$ -Polarisation) und zum anderen das  $\vec{H}$ -Feld parallel zu den Zylindern steht ( $H$ -Polarisation), voneinander zu entkoppeln (s. Abb. 1.3(a)). Das bedeutet, daß anstatt der Wellengleichung für das vektorielle Feld nur zwei getrennte Gleichungen für die skalaren  $z$ -Komponenten des  $\vec{E}$ - bzw.  $\vec{H}$ -Feldes gelöst werden

müssen:

$$E\text{-Polarisation} \quad \boxed{\frac{1}{\epsilon(\vec{r})} \Delta_2 E(\vec{r}) + \frac{\omega^2}{c^2} E(\vec{r}) = 0} \quad (1.12)$$

$$H\text{-Polarisation} \quad \boxed{\left[ \nabla_2 \cdot \frac{1}{\epsilon(\vec{r})} \nabla_2 \right] H(\vec{r}) + \frac{\omega^2}{c^2} H(\vec{r}) = 0} \quad (1.13)$$

mit

$$\Delta_2 \equiv \partial_x^2 + \partial_y^2 \quad \nabla_2 \equiv \begin{pmatrix} \partial_x \\ \partial_y \end{pmatrix} . \quad (1.14)$$

Dies stellt eine große Vereinfachung für die Bandstrukturrechnung dar.

Der Operator in der Wellengleichung (1.13) für die H-Polarisation ist zusammen mit den in Abschnitt 1.2.1 besprochenen Bloch-Randbedingungen hermitesch, daher bilden die Lösungen von (1.13) ein Orthonormalsystem:

$$\frac{1}{V} \int_{\Omega} d^2r H_i^*(\vec{r}) H_j(\vec{r}) = \delta_{ij} . \quad (1.15)$$

Hier ist  $V$  das Volumen der Wigner-Seitz-Zelle  $\Omega$ . Der Index  $i$  bezeichnet die  $i$ -te Eigenmode und wird auch als Bandindex bezeichnet (s. Abschnitt 1.2.1).

Die Gleichung der E-Polarisation entspricht in der Form (1.12) keinem hermiteschen Eigenwertproblem, kann aber umgeformt werden in ein verallgemeinertes Eigenwertproblem mit hermiteschem Operator, so daß die Lösungen von (1.12) einer verallgemeinerten Orthonormalitätsrelation genügen:

$$\frac{1}{V} \int_{\Omega} d^2r \epsilon(\vec{r}) E_i^*(\vec{r}) E_j(\vec{r}) = \delta_{ij} \quad (1.16)$$

## 1.2. Eigenschaften: Bandstruktur für Photonen

Aufgrund der im letzten Abschnitt diskutierten weitgehenden Analogie zwischen elektronischen und Photonischen Kristallen können wir viele Konzepte aus der „Elektronik“ direkt übernehmen. So beschreiben wir einen Photonischen Kristall durch ein *Raumgitter*, welches durch die Symmetrie des Kristalls vorgegeben ist. Jedem Raumgitter mit den Gittertranslationen  $\vec{a}$  ist ein *reziprokes Gitter* mit den reziproken Gittervektoren  $\vec{G}$  zugeordnet, welches durch Fouriertransformation des Raumgitters erhalten werden kann. Die Wigner-Seitz-Zelle (primitive Einheitszelle mit kleinstem Volumen) des reziproken Gitters wird als *Brillouinzone* bezeichnet.

### 1.2.1. Bloch-Theorem

Die Eigenmoden der Wellengleichung müssen als Eigenlösungen einer partiellen Differentialgleichung mit periodischen Koeffizienten dem Bloch-Theorem genügen, d.h.

sie müssen *gitterperiodisch* sein bis auf einen *Phasenfaktor*  $e^{i\vec{k}\vec{r}}$ ,

$$\vec{E}_{n\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}} \vec{u}_{n\vec{k}}(\vec{r}), \quad (1.17)$$

wobei  $\vec{u}_{n\vec{k}}(\vec{r})$  gitterperiodisch ist.  $n$  und  $\vec{k}$  bezeichnen den Bandindex bzw. den Wellenvektor dieser sog. Blochmoden. Die Blochmoden sind also ebene Wellen, moduliert mit einer gitterperiodischen Funktion.

Das Bloch-Theorem wird verwendet, um *Randbedingungen* für die Lösungen der Wellengleichung vorzugeben:

$$\vec{E}_{n\vec{k}}(\vec{r} + \vec{a}) = e^{i\vec{k}\vec{r}} \vec{E}_{n\vec{k}}(\vec{r}). \quad (1.18)$$

Diese „periodischen“ Randbedingungen beinhalten also den Wellenvektor  $\vec{k}$  als Parameter, der ansonsten nicht in der Wellengleichung vorkommt.

### 1.2.2. Entstehung der Bandstruktur

Vom mathematischen Standpunkt aus gesehen wird die Bandstruktur eines Photonischen Kristalls gebildet aus allen Eigenfrequenzen und Eigenmoden der Wellengleichung (1.8) bzw. (1.9) in der Einheitszelle unter Randbedingungen, die durch das Bloch-Theorem gegeben sind. Die Entstehung von Bändern und Bandlücken läßt sich aber auch physikalisch recht einfach verstehen. In Abbildung 1.4 ist ein eindimensionales Beispiel dargestellt. An den Punkten, wo die Brillouin-Bedingung  $\vec{k} \cdot \vec{G} = \frac{1}{2}G^2$  erfüllt ist, d.h. bei  $k = \pm\frac{\pi}{a}, \pm\frac{2\pi}{a}, \pm\frac{3\pi}{a}, \dots$ , findet *resonante Bragg-Streuung* statt, es bilden sich stehende Wellen mit Gruppengeschwindigkeit  $v_g = 0$ . Die lineare Dispersionsrelation  $\omega = ck$  der Photonen wird aufgespalten und man erhält ein *Stoppband* (Bandlücke), in welchem keine erlaubten Frequenzen liegen (s. Abb. 1.4). Beschränkt man sich auf die erste Brillouinzone, d.h.  $-\frac{\pi}{a} \leq k \leq \frac{\pi}{a}$ , dann müssen die außerhalb liegenden Äste zurückgefaltet werden. So ergeben sich die verschiedenen Bänder, die durch den Bandindex  $n$  durchnummeriert werden. Bandlücken in mehreren Dimensionen entstehen dann, wenn die Stoppbänder in allen unterschiedlichen Richtungen der Brillouinzone eine nichtleere Schnittmenge bilden.

Bei Photonischen Kristallen spielt zusätzlich auch die Polarisation des elektromagnetischen Feldes eine Rolle. Bei 2D Kristallen äußert sich dies darin, daß sich die Stoppbänder *beider* Polarisationen (*E- und H-Polarisation*) konstruktiv überlagern müssen, um eine vollständige Bandlücke zu ergeben. In 3 Dimensionen mischen alle möglichen Polarisationen und erschweren so ebenfalls die Entstehung von Bandlücken.

### 1.2.3. Skalierbarkeit

Ein weiterer wichtiger Aspekt bei Photonischen Kristallen ist die Tatsache, daß die Maxwell-Gleichungen, und damit auch die Wellengleichung, sich sehr einfach unter einer Skalierung

$$\vec{r}' = s\vec{r} \quad (1.19)$$

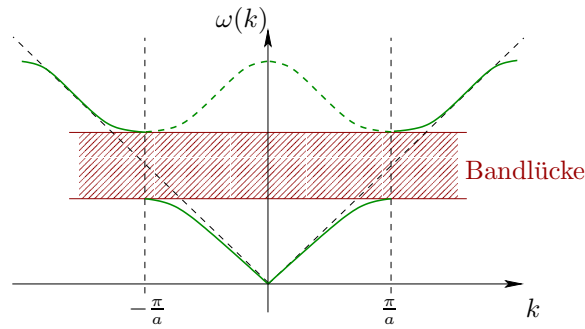


Abbildung 1.4.: Entstehung der Bandstruktur durch Aufspaltung und Zurückfaltung der linearen Dispersionsrelation am Rand der Brillouinzone. Eindimensionales Beispiel eines Stoppbandes (Bandlücke).

verhalten. Eigenmoden und Eigenfrequenzen können mitskaliert werden:

$$\epsilon'(\vec{r}') = \epsilon(\vec{r}'/s) \quad \vec{E}'(\vec{r}') = \vec{E}(\vec{r}'/s) \quad \omega' = \frac{\omega}{s}. \quad (1.20)$$

Dadurch sind Bandstrukturen lediglich abhängig von der Geometrie des Problems, nicht aber von der Längenskala. Photonische Kristalle für den Mikrowellenbereich (Längenskala cm) haben also bis auf die Skalierung der Frequenzen und der Ortsabhängigkeit dieselbe Band- und Modenstruktur wie Photonische Kristalle gleicher Geometrie für den Infrarotbereich (Längenskala  $\mu\text{m}$ ). Dies erlaubt die direkte Übertragung von experimentellen Erkenntnissen, die man beispielsweise an Mikrowellenkristallen unter Umständen einfacher ermitteln kann, auf andere Frequenzbereiche.

### 1.3. Bandstrukturrechnung

Die Berechnung der Bandstruktur, d.h. der Eigenfrequenzen und Eigenmoden, ist das Kernelement in der theoretischen Charakterisierung von Photonischen Kristallen:

- In der Bandstruktur sind alle wesentlichen Eigenschaften (Geometrie, Symmetrien, etc.) eines Photonischen Kristalls enthalten.
- Aus der Bandstruktur lassen sich alle physikalisch relevanten Größen wie z.B. die Gruppengeschwindigkeit und die effektive Masse gewinnen. Sie ist somit eine wichtige Grundlage für beispielsweise die Pulsausbreitung in Photonischen Kristallen.
- Die Kenntnis der Bandstruktur ist der Schlüssel zur Lösung von Randwertproblemen bei endlichen Photonischen Kristallen. Die Eigenmoden des unendlichen Kristalls bilden hierfür eine geeignete Orthonormalbasis.
- Probleme mit in Photonische Kristalle eingebauten Defektstrukturen können mittels stark lokalisierter Basisfunktionen (z.B. Wannierfunktionen) behandelt werden, welche aus den Eigenmoden (Blochmoden) konstruiert werden können.

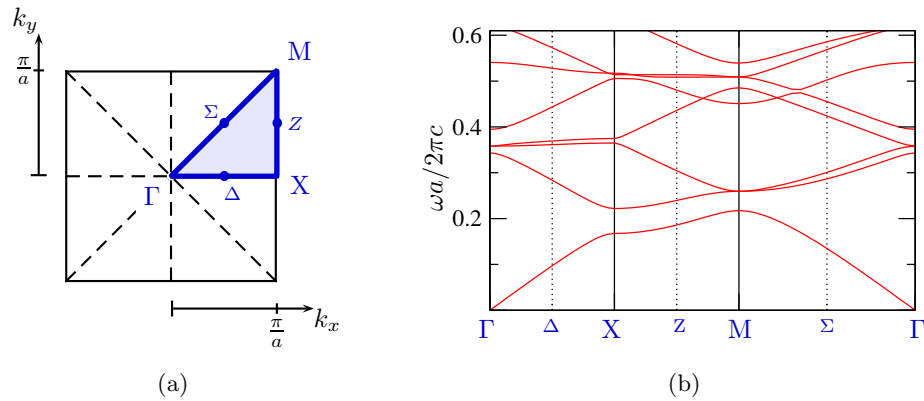


Abbildung 1.5.: (a) Brillouinzone eines Kristalls mit quadratischer Einheitszelle (hervorgehoben: irreduzible B.Z.). Eingezeichnet sind die Hochsymmetriepunkte und die Symmetrielinien dazwischen. (b) Schema einer Bandstruktur. Die Bänder sind entlang der Symmetrielinien geplottet.

Die Bandstruktur bildet also die Grundlage für viele verschiedene Anwendungen. Man ist demnach daran interessiert, Bandstrukturen möglichst genau und effizient berechnen zu können.

### 1.3.1. Allgemeines Vorgehen

Zunächst ist das Ziel der Bandstrukturrechnung, die Eigenfrequenzen und Eigenmoden der Wellengleichung zu allen  $\vec{k}$ -Vektoren der Brillouinzone eines gegebenen Photonischen Kristalls zu bestimmen. Die so bestimmten Eigenmoden bilden eine vollständige Orthonormalbasis. Da es aber unmöglich ist, *alle*  $\vec{k}$ -Vektoren zu berücksichtigen, und außerdem recht schwierig, die Bandstruktur in mehr als einer Dimension (insbesondere in 3 Dimensionen) geeignet darzustellen, beschränkt man sich üblicherweise auf die Berechnung der Bandstruktur entlang bestimmter Symmetrielinien in der Brillouinzone, die die Hochsymmetriepunkte miteinander verbinden. Man erwartet, daß diese eindimensionale Darstellung der Bänder ausreicht und zwischen den Symmetrielinien beispielsweise keine Maxima oder Minima auftreten.

Als Beispiel ist in Abbildung 1.5 für einen 2D Kristall mit quadratischer Einheitszelle die Brillouinzone mit den Hochsymmetriepunkten  $\Gamma$ ,  $X$  und  $M$  und das Schema einer Bandstruktur dargestellt. Die Frequenz wird üblicherweise in dimensionslosen Einheiten

$$\tilde{\omega} = \frac{\omega a}{2\pi c} \quad (1.21)$$

aufgetragen, so daß sie unabhängig vom Gitterabstand  $a$  ist.



### 1.3.2. Bekannte Methoden zur Bandstrukturrechnung

**Ebene-Wellen-Methode:** Die Standardmethode, Bandstrukturen für Photonische Kristalle zu berechnen, ist die Ebene-Wellen-Methode [10]. Sie basiert im wesentlichen auf der *Fouriertransformation* der Wellengleichung und der Lösung des entstandenen algebraischen Eigenwertproblems. Die ortsabhängigen Größen in der Wellengleichung (Dielektrizitätsfunktion  $\epsilon(\vec{r})$  und Lösung  $\vec{E}(\vec{r})$  bzw.  $\vec{H}(\vec{r})$ ) werden zunächst nach Ebenen Wellen entwickelt und in die Wellengleichung eingesetzt. Man erhält ein unendlichdimensionales algebraisches Eigenwertproblem, welches approximativ durch Abschneiden höherer reziproker Gittervektoren und Lösung des endlichen Systems gelöst werden kann. Die Eigenwerte und Eigenvektoren liefern die Eigenfrequenzen bzw. die Fourierkoeffizienten der Eigenmoden des Photonischen Kristalls zum betrachteten  $\vec{k}$ -Vektor.

Diese Methode hat einige Nachteile:

- Da sich die Dielektrizitätsfunktion  $\epsilon(\vec{r})$  beispielsweise an den Zylinder Grenzen diskontinuierlich ändert, ist es schwierig, diese nach Ebenen Wellen zu entwickeln. Für die Entwicklung ist eine große Anzahl an reziproken Gittervektoren nötig (oft mehr als 1000, um Konvergenz zu erreichen). Daher wird auch das entstehende Eigenwertproblem sehr groß.
- Der Mehraufwand, um neben den Eigenfrequenzen auch die Eigenmoden zu berechnen, ist erheblich.
- Durch Abschneiden höherer Fourierkomponenten treten in den Eigenmoden künstliche Oszillationen an den Diskontinuitäten von  $\epsilon(\vec{r})$  auf (Gibbs-Phänomen), die sich beispielsweise bei der Berechnung von Matrixelementen oder der Konstruktion anderer Basisfunktionen negativ auswirken können.

**Transfermatrix-Methode:** Diese Methode beruht auf der Aufstellung der sogenannten Transfermatrix, welche das Wellenfeld auf der einen Seite des Kristalls in Bezug setzt zum Feld auf der gegenüberliegenden Seite [6]. Diese Methode eignet sich daher beispielsweise für Transmissionsrechnungen. Das Eigenwertspektrum der Transfermatrix beinhaltet jedoch auch die Information über die Eigenfrequenzen und Eigenmoden des Photonischen Kristalls, wodurch diese Methode auch zur Bandstrukturrechnung verwendet werden kann.

**FDTD-Methoden:** (FDTD = Finite Difference Time Domain). Diese Klasse von Methoden geht direkt von der *zeitabhängigen Wellengleichung* im Ortsraum aus und *simuliert* die zeitliche Entwicklung eines Wellenfeldes im Photonischen Kristall, das zu einem bestimmten Zeitpunkt angeregt wird. Durch eine  $\delta$ -förmige Anregung können beispielsweise alle Frequenzen gleichzeitig angeregt werden. Das Eigenfrequenzspektrum ergibt sich durch die Fourieranalyse des Wellenfeldes am Ende der Simulation, wo sich die Eigenfrequenzen als Peaks zeigen. Die Eigenmoden ergeben sich automatisch bei Anregung nur der zugehörigen Eigenfrequenzen.

Eine Variante der FDTD-Methoden ist die Anregung des Wellenfeldes mittels eines zeitlich oszillierenden Dipols mit fester Frequenz [11]. Es werden alle Frequenzen durchgeföhren und jeweils die nach einer festgelegten Zeit auf das Wellenfeld übertragene Energie registriert. Eigenfrequenzen ergeben sich in diesem Verfahren dann als Peaks im Energieübertrag.

FDTD-Methoden haben den Vorteil, daß sie eingeschränkt auch auf Bandstrukturen Photonischer Kristalle mit dispersiven und absorptiven Komponenten angewandt werden können [8]. Andererseits hängen aber die Resultate entscheidend von der Art der Anfangsanregung ab, denn bei der Anregung der Eigenmoden spielen auch Ankopplungseffekte eine große Rolle. Außerdem können entartete Eigenmoden nicht automatisch getrennt berechnet werden.

## 2. Das Mehrgitter-Verfahren

Im folgenden Kapitel soll nun das Mehrgitter-Verfahren vorgestellt und dessen Verwendung zur Bandstrukturechnung erklärt werden. Eigentlich handelt es sich hierbei um eine ganze Klasse von Verfahren, die unter dem Oberbegriff Mehrgitter- oder Mehrniveau-Verfahren (engl. *multigrid* bzw. *multilevel methods*) zusammengefasst sind. In dieser Arbeit soll es nicht darum gehen, einen möglichst umfassenden Überblick über dieses breite Gebiet der Numerik zu geben, sondern es sollen lediglich die zum Verständnis des Algorithmus wichtigen Grundstrategien erklärt und motiviert werden. Für eine vollständigere Darstellung sei der interessierte Leser auf [12, 13, 14] verwiesen. Das hier vorgestellte Mehrgitter-Verfahren, vor allem auch die Behandlung des Eigenwertproblems, lehnt sich stark an [15] an.

Die Mehrgitter-Methode basiert auf der *Diskretisierung* der Differentialgleichung im Ortsraum und der anschließenden *iterativen Lösung* des entstandenen algebraischen Gleichungssystems. Der Algorithmus soll zunächst anhand der Lösung eines Randwertproblems auf einem abgeschlossenen Gebiet  $\Omega$  mit Rand  $\partial\Omega$

$$\hat{L}(\vec{r}) u(\vec{r}) = \tau(\vec{r}) \quad \forall \vec{r} \in \Omega \quad (2.1)$$

Randbedingungen für  $u(\vec{r})$  auf  $\partial\Omega$

mit dem Operator der Differentialgleichung  $\hat{L}(\vec{r})$ , der Lösungsfunktion  $u(\vec{r})$  und der rechten Seite  $\tau(\vec{r})$  entwickelt werden. Die Berechnung einer Eigenmode der Wellengleichung bei *bekanntem* Eigenwert stellt ein solches Randwertproblem dar, wenn man für  $\hat{L}$ ,  $u$  und  $\tau$  die in Tabelle 2.1 angegebenen Größen einsetzt. Wie man zusätz-

	<i>E</i> -Polarisation	<i>H</i> -Polarisation
$\hat{L}(\vec{r})$	$\frac{1}{\epsilon(\vec{r})} \Delta_2 - \frac{\omega^2}{c^2}$	$\left[ \nabla_2 \cdot \frac{1}{\epsilon(\vec{r})} \nabla_2 \right] - \frac{\omega^2}{c^2}$
$u(\vec{r})$	$E(\vec{r})$	$H(\vec{r})$
$\tau(\vec{r})$	0	0

Tabelle 2.1.: Randwertproblem einer Eigenmode der Wellengleichung bei bekanntem Eigenwert  $\frac{\omega^2}{c^2}$ .

lich den Eigenwert  $\frac{\omega^2}{c^2}$  der Wellengleichung, der natürlich eine zusätzliche Unbekannte darstellt, iterativ mit der Eigenmode ermitteln kann, und wie auch die höheren

Eigenmoden und Eigenfrequenzen ermittelt werden können, wird in Abschnitt 2.5 besprochen.

Wir wollen uns im folgenden wo nötig auf zweidimensionale Probleme beziehen und wählen zur Vereinfachung für das Gebiet  $\Omega$  das Einheitsquadrat. Große Teile des Mehrgitter-Algorithmus' können und werden aber dimensions- und gebietsunabhängig formuliert werden. Verallgemeinerungen auf drei Dimensionen und auf andere Gebiete sind daher möglich.

## 2.1. Diskretisierung

Im ersten Schritt müssen sämtliche Größen in der Differentialgleichung (2.1) diskretisiert werden. Die einfachste Form der Diskretisierung sind *Finite Differenzen*. Wir definieren ein kartesisches Gitter  $\mathcal{G} \in \Omega$  mit uniformem Gitterabstand  $h$  durch

$$\mathcal{G} = \{ \vec{r} \in \Omega \mid \vec{r} = \vec{r}_{i,j} = (ih, jh); i, j = 0 \dots N, N = 1/h \} . \quad (2.2)$$

Die Lösungsfunktion  $u(\vec{r})$  und die rechte Seite  $\tau(\vec{r})$  in (2.1) werden nur auf den Gitterpunkten ausgewertet:

$$u_{i,j} \equiv u(\vec{r}_{i,j}) \quad f_{i,j} \equiv \tau(\vec{r}_{i,j}) . \quad (2.3)$$

Im Operator  $\hat{L}(\vec{r})$  aus (2.1) müssen also alle Ableitungen ebenfalls diskretisiert werden. Dies geschieht durch Verwendung von Differenzenoperatoren anstelle von Differentialoperatoren (beispielsweise  $\partial_x$ ):

$$\hat{d}_x^+ u(\vec{r}_{i,j}) \equiv \frac{u_{i+1,j} - u_{i,j}}{h} \quad (2.4)$$

$$\hat{d}_x^- u(\vec{r}_{i,j}) \equiv \frac{u_{i,j} - u_{i-1,j}}{h} \quad (2.5)$$

$$\hat{d}_x^S u(\vec{r}_{i,j}) \equiv \frac{u_{i+1,j} - u_{i-1,j}}{2h} . \quad (2.6)$$

Im Grenzwert  $h \rightarrow 0$  sind alle diese Differenzenoperatoren äquivalent und entsprechen der exakten Ableitung  $\partial_x$ , jedoch ist für endlichen Gitterabstand die Genauigkeit des symmetrischen Differenzenoperators  $\hat{d}_x^S$  von der Ordnung  $\mathcal{O}(h^2)$ , während sie für die Vorwärts- bzw. Rückwärtsdifferenzenoperatoren  $\hat{d}_x^+$  bzw.  $\hat{d}_x^-$  nur von der Ordnung  $\mathcal{O}(h)$  ist.  $\hat{d}_x^S$  zeichnet außerdem keine Richtung aus und ist deshalb den anderen beiden Differenzenoperatoren vorzuziehen.

Für die zweiten Ableitungen (beispielsweise  $\partial_x^2$ ) gibt es wiederum verschiedene Kombinationsmöglichkeiten:

$$\hat{d}_x^+ \hat{d}_x^- \quad \hat{d}_x^- \hat{d}_x^+ \quad \frac{1}{2} (\hat{d}_x^+ \hat{d}_x^- + \hat{d}_x^- \hat{d}_x^+) \quad (2.7)$$

Wir wählen z.B. zur Definition der diskretisierten zweiten Ableitung die symmetrische Kombination

$$\hat{d}_x^2 u(\vec{r}_{i,j}) \equiv \frac{1}{2} (\hat{d}_x^+ \hat{d}_x^- + \hat{d}_x^- \hat{d}_x^+) = \frac{u_{i+1,j} + u_{i-1,j} - 2u_{i,j}}{h^2} \quad (2.8)$$

Der Laplaceoperator  $\Delta_2$ , wie er in der Wellengleichung in  $E$ -Polarisation vorkommt, läßt sich somit in diskretisierter Form schreiben als

$$\Delta_2 u(\vec{r}_{i,j}) \equiv \hat{d}_x^2 + \hat{d}_y^2 = \frac{u_{i+1,j} + u_{i-1,j} + u_{i,j+1} + u_{i,j-1} - 4u_{i,j}}{h^2}, \quad (2.9)$$

oder in Schablonen-Notation (siehe Anhang A)

$$[\Delta_2] = \frac{1}{h^2} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & -4 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \quad (2.10)$$

Man sieht anhand der Schablone, daß  $\Delta_2$  in dieser Diskretisierung stark lokalisiert ist, er verknüpft jeden Gitterpunkt nur mit seinen nächsten Nachbarn. Diese starke Lokalität ist eine allgemeine Eigenschaft diskretisierter Differentialoperatoren und führt dazu, daß die Matrizen der entstehenden Gleichungssysteme sehr schwach besetzt sind.

Im Fall „reiner“ zweiter Ableitungen (wie im Fall der Wellengleichung in  $E$ -Polarisation) führen in der Tat alle drei Kombinationen in (2.7) auf dasselbe Ergebnis. Das ist allerdings dann nicht mehr der Fall, wenn wir Terme der Form

$$\partial_x \left( \frac{1}{\epsilon(\vec{r})} \partial_x H(\vec{r}) \right) \quad (2.11)$$

betrachten, wie sie in der Wellengleichung in  $H$ -Polarisation auftauchen. Die Genauigkeit der Diskretisierung hängt dann stark von der gewählten Kombination der Differenzenoperatoren ab. Wir wählen in solchen Fällen immer eine symmetrische Kombination aus  $\hat{d}^+$  und  $\hat{d}^-$ . Für die  $H$ -Polarisation verwenden wir daher als Differenzenoperator

$$\left\{ \nabla_2 \cdot \frac{1}{\epsilon(\vec{r})} \nabla_2 \right\} u(\vec{r}_{i,j}) \equiv \frac{1}{2} \left( \hat{d}_x^+ \epsilon^{-1} \hat{d}_x^- + \hat{d}_x^- \epsilon^{-1} \hat{d}_x^+ + \hat{d}_y^+ \epsilon^{-1} \hat{d}_y^- + \hat{d}_y^- \epsilon^{-1} \hat{d}_y^+ \right). \quad (2.12)$$

In den einzelnen Termen wirkt der links stehende Differenzenoperator jeweils auch auf die inverse Dielektrizitätsfunktion. Deshalb wurden die Faktoren  $\hat{d}^+$ ,  $\hat{d}^-$  und  $\epsilon^{-1}$  einzeln in Matrixform ausgedrückt und der effektive Differenzenoperator durch Multiplikation der Matrizen aufgestellt.

Es ist neben dem hier angedeuteten Diskretisierungsschema auch möglich, Differenzenoperatoren höherer Ordnung (d.h. höherer Genauigkeit in  $h$ ) zu definieren. Diese haben im allgemeinen eine ausgedehntere Schablone mit mehr involvierten Gitterpunkten, und sind deshalb auch numerisch aufwendiger. Wir beschränken uns hier auf die einfachste Finite-Differenzen-Diskretisierung.

## 2.2. Iterative Lösungsverfahren

Die Diskretisierung führt auf ein algebraisches Gleichungssystem, welches nun numerisch gelöst werden kann. Da die Differenzenoperatoren, wie gesehen, nur lokal

wirken, ist die Matrix des entstehenden Gleichungssystems dünn besetzt. Daher sind *direkte* Löser wie z.B. der Gauß-Algorithmus ungeeignet, weil sie diese schwache Besetzung nicht ausnutzen. Außerdem ist die Anzahl der Unbekannten bei feinen Gittern (z.B. 200x200 Gitterpunkte) sehr groß und liegt oft über 10000, was die Anwendung direkter Löser, die alle eine Komplexität von  $\mathcal{O}(N^3)$  haben, ineffizient macht ( $N$ : Anzahl der Unbekannten).

Es bieten sich deshalb *iterative* Lösungsverfahren an, die sowohl der schwachen Besetzung der Matrix als auch der Größe des Gleichungssystems besser angepasst sind (Komplexität  $\mathcal{O}(N^2)$  und Beibehaltung der schwachen Besetzung im Laufe des Lösungsverfahrens). Eine detailliertere Beschreibung verschiedener Verfahren findet sich z.B. in [16].

### 2.2.1. Ansatz zur Gewinnung von Iterationsverfahren

Wir wollen ein Gleichungssystem der Form

$$A\mathbf{x} = \mathbf{b} \tag{2.13}$$

mit einer dünnbesetzten Matrix  $A$ , dem Lösungsvektor  $\mathbf{x}$  und der rechten Seite  $\mathbf{b}$  iterativ lösen, d.h. wir gehen von einer noch ungenauen Lösung  $\tilde{\mathbf{x}}$  aus und suchen eine Korrektur  $\delta\mathbf{x}$  dazu:

$$\mathbf{x} = \tilde{\mathbf{x}} + \delta\mathbf{x} \quad A\tilde{\mathbf{x}} \approx \mathbf{b} . \tag{2.14}$$

Für die Korrektur  $\delta\mathbf{x}$  gilt also die exakte Gleichung

$$A\delta\mathbf{x} = \mathbf{b} - A\tilde{\mathbf{x}} . \tag{2.15}$$

Die Idee der Iterationsverfahren ist nun, die recht aufwendig zu invertierende Matrix  $A$  (Inversion entspräche direkter Lösung, d.h. Komplexität  $\mathcal{O}(N^3)$ ) durch eine wesentlich einfacher zu invertierende Matrix  $B$  zu ersetzen und so eine näherungsweise Korrektur  $\delta\tilde{\mathbf{x}}$  zu  $\tilde{\mathbf{x}}$  zu berechnen:

$$B\delta\tilde{\mathbf{x}} = \mathbf{b} - A\tilde{\mathbf{x}} \tag{2.16}$$

Einen Iterationsschritt von einer Näherungslösung  $\mathbf{x}_k$  zu einer verbesserten Lösung  $\mathbf{x}_{k+1}$  können wir also formulieren als

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \delta\mathbf{x}_k = B^{-1}\mathbf{b} + B^{-1}[B - A]\mathbf{x}_k . \tag{2.17}$$

Die verschiedenen Iterativen Löser unterscheiden sich nun im wesentlichen durch die Wahl der Matrix  $B$ . Wir schreiben  $A$  in der Form

$$A = D + U + O \tag{2.18}$$

mit der Diagonalmatrix  $D$ , und den echten unteren und oberen Dreiecksmatrizen  $U$  bzw.  $O$ . Die elementarsten Iterationsverfahren sind unter den Namen Jacobi-Relaxation<sup>1</sup> und die Gauß-Seidel-Relaxation bekannt:

$$\begin{aligned} \text{Jacobi-Relaxation:} & \quad B = D \\ \text{Gauß-Seidel-Relaxation:} & \quad B = D + U \end{aligned}$$

---

<sup>1</sup>Relaxation = Iteration

## Algorithmus 2.1: Einfache Relaxation

**IN:** Startlösung  $u_{\text{init}}$   
**OUT:** verbesserte Lösung  $\tilde{u}$   
**PARAM:**  $N_{\text{relax}}$ ,  $\text{SMOOTH}(\tilde{u}, \tau)$

- 1:  $\tilde{u} = u_{\text{init}}$
- 2: **repeat**  $N_{\text{relax}}$  times
- 3:      $\tilde{u} = \text{SMOOTH}(\tilde{u}, \tau)$      // Relaxation
- 4: **end**

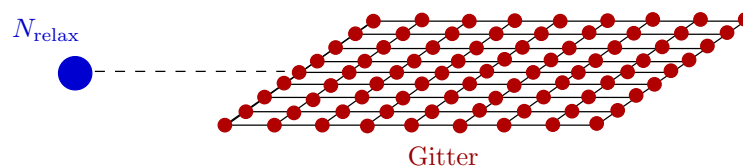


Abbildung 2.1.: symbolische Darstellung der einfachen Relaxation (Alg. 2.1). Der Punkt links stellt die Ausführung von Relaxationen auf dem rechts gezeigten Gitter dar, wobei die Anzahl der Relaxationsschritte daneben angegeben ist.

### 2.2.2. Konvergenz und Glättungseigenschaft

Es zeigt sich, daß die Konvergenz iterativer Lösungsverfahren sehr unterschiedlich ist für verschiedene Anteile des Fehlers [12]. Sie eliminieren sehr schnell die *oszillierenden* (räumlich stark variierenden) Fehleranteile, während sie die *glatten* Fehleranteile nur sehr langsam abbauen. Das bedeutet, daß der Fehler lediglich effizient ausgeglättet wird, die glatten Anteile aber kaum reduziert werden. Man spricht daher im Zusammenhang mit iterativen Lösungsverfahren auch von *Glätten* (engl. *smoother*). Durch diese Eigenschaft der iterativen Lösungsverfahren verschlechtert sich im Laufe des Iterationsprozeß die Konvergenzgeschwindigkeit, wodurch unter Umständen sehr viele Iterationen nötig sind, um auch die glatten Fehleranteile zu eliminieren. Dies ist der Punkt, wo die Mehrgitter-Methode ansetzt.

### 2.2.3. Algorithmus der einfachen Relaxation

Um die Darstellung übersichtlich zu halten, führen wir eine Abkürzung für den Relaxationsschritt in Gl.(2.17) ein:

$$\text{SMOOTH}(\tilde{u}, \tau) = B^{-1}[B - L]\tilde{u} + B^{-1}\tau . \quad (2.19)$$

Hierbei wurden wieder die Bezeichnungen aus dem Ausgangs-Randwertproblem (2.1) verwendet, wobei die Größen  $L$ ,  $\tilde{u}$  und  $\tau$  nun als Matrizen bzw. Vektoren zu verstehen sind.

Damit läßt sich der Algorithmus der Relaxation mit  $N_{\text{relax}}$  Relaxationsschritten auf einem einzigen Gitter einfach formulieren (Alg. 2.1). Die Parameter dieses Algorithmus' sind

- die Anzahl der durchgeführten Relaxationen  $N_{\text{relax}}$
- das iterative Lösungsverfahren  $\text{SMOOTH}(\tilde{u}, \tau)$

In Abbildung 2.1 wird eine symbolische Darstellung eingeführt, die sich später für das Verständnis des Mehrgitterverfahrens als nützlich erweisen wird. Die Relaxationen werden dargestellt durch einen dickeren Punkt. Direkt daneben wird die Anzahl der Relaxationsschritte angegeben. Das Gitter, auf dem relaxiert wird, ist jeweils rechts daneben gezeigt.

### 2.3. Zweigitter-Algorithmus

Wir haben in Abschnitt 2.2.2 diskutiert, daß der Hauptnachteil der Iterativen Löser darin besteht, daß sie zwar effizient für oszillierende Fehleranteile arbeiten, nicht aber für glatte Fehleranteile. Das gibt zu folgenden Überlegungen Anlaß:

**Grundgedanke:** Wir führen neben dem feinen Gitter  $\mathcal{G}^k$  mit Gitterabstand  $h$  (Gl. (2.2)) ein gröberes Gitter  $\mathcal{G}^{k-1}$  ein, was z.B. doppelten Gitterabstand  $H = 2h$  habe. Auf diesem Grobgitter ist nicht nur die Relaxation erheblich weniger aufwendig, es erscheinen vor allem die (auf dem Feingitter) glatten Fehleranteile für den iterativen Löser stärker oszillierend. Relaxationen auf dem Grobgitter sind dementsprechend gerade für die (auf dem Feingitter) nur sehr schwer zu eliminierenden glatten Fehleranteile effizienter. Deshalb bietet es sich an, Relaxationen auf dem Feingitter und auf dem Grobgitter geeignet zu kombinieren, so daß sowohl die oszillierenden als auch die glatten Fehleranteile effizient eliminiert werden können.

Der Ansatz ist also folgender: Zunächst werden einige Relaxationsschritte auf dem Feingitter ausgeführt, wodurch die oszillierenden Fehleranteile der Lösung ausgeglättet werden (*Vorglättung*). Dann übertragen wir das zu lösende Problem „in geeigneter Weise“ auf das Grobgitter (s.u.), wo wir weitere Relaxationsschritte ausführen, die effizienter die glatten Fehleranteile eliminieren. Schließlich korrigieren wir die Feingitterlösung durch die Grobgitterlösung. Zuletzt werden die hauptsächlich durch den Transfer der Lösung zwischen den Gittern neu entstandenen hochfrequenten Fehler wieder auf dem Feingitter durch *Nachglättung* eliminiert.

Um diese Grundidee umzusetzen, müssen folgende Punkte spezifiziert werden:

- Wie werden Operatoren und Gitterfunktionen vom feinen auf das grobe Gitter und umgekehrt übertragen? ( $\rightarrow$  Prolongation und Restriktion, Abschnitt 2.3.2)



- Wie kann das Grobgitter-Problem konstruiert werden, so daß dessen Lösung dazu geeignet ist, die Feingitterlösung zu korrigieren? (→ Full Approximation Scheme FAS, Abschnitt 2.3.3)

### 2.3.1. Gitter-Hierarchie

Wir wollen zunächst einige Begriffe und Konzepte im Zusammenhang mit der Grobgitter-Korrektur und der Mehrgitter-Methode einführen.

Ausgangspunkt sei unser kontinuierliches Randwertproblem

$$\hat{L}u = \tau . \quad (2.20)$$

Wir definieren eine Gitter-Hierarchie aus uniformen Gittern  $\mathcal{G}^k$  wie in (2.2) mit aufsteigend immer feinerem Gitterabstand, wobei jedes Gitter durch einfaches Halbieren des Gitterabstandes aus dem nächstgrößeren hervorgeht:

$$\mathcal{G}^k : k = 1, 2, \dots, l . \quad (2.21)$$

Das Gitter  $\mathcal{G}^l$  bezeichnet somit das feinste Gitter. Größen auf dem  $k$ -ten Gitter bekommen den hochgestellten Index  $k$ , so z.B.  $L^k$ ,  $u^k$  und  $\tau^k$ . Wir verwenden für die auf den Gittern diskretisierten Funktionen im folgenden auch die Bezeichnung *Gitterfunktion*.

### 2.3.2. Prolongation und Restriktion

Der Zusammenhang zwischen Größen auf verschiedenen Gittern ist noch festzulegen, denn wir müssen Gitterfunktionen zwischen Gittern übertragen können. Deshalb führen wir *Transfer-Operatoren* für den Übergang von einem Gitter  $\mathcal{G}^k$  auf ein feineres Gitter  $\mathcal{G}^{k+1}$  (*Prolongation*) bzw. auf ein gröberes Gitter  $\mathcal{G}^{k-1}$  (*Restriktion*) ein:

$$u^{k+1} = \hat{P}^k u^k \quad u^{k-1} = \hat{R}^k u^k \quad (2.22)$$

Für die Verknüpfung der Repräsentationen eines Operators auf verschiedenen Gittern gibt es im wesentlichen zwei unterschiedliche Methoden:<sup>2</sup>

- Unabhängige Diskretisierung auf den einzelnen Gittern oder
- Galerkin Methode

$$\hat{A}^{k-1} = \hat{R}^k \hat{A}^k \hat{P}^{k-1} . \quad (2.23)$$

Für die Implementierung wurde erstere Methode gewählt, d.h. man verwendet auf jedem Gitter die Diskretisierungsvorschriften aus Abschnitt 2.1, um die Operatoren zu definieren.

---

<sup>2</sup>In Spezialfällen sind diese Methoden äquivalent.

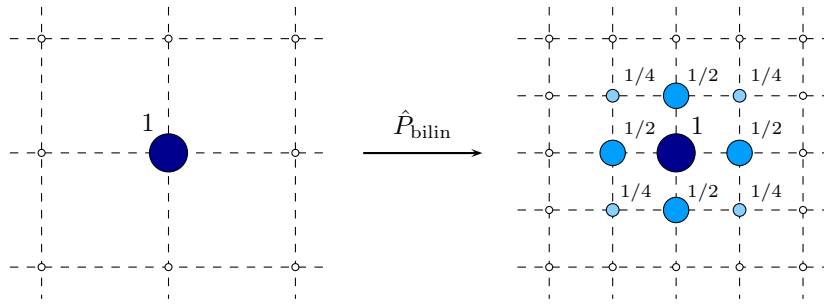


Abbildung 2.2.: Veranschaulichung der Wirkungsweise der Transfer-Operatoren anhand der bilinearen Interpolation.

Die am weitesten verbreitete Prolongationsvariante ist die *bilineare Interpolation*. Dabei wird auf den Gitterpunkten des feinen Gitters, die direkt auf einem Gitterpunkt des Grobgitters liegen, der Wert übernommen; auf Feingitterpunkten zwischen zwei Grobgitterpunkten bzw. im Zentrum eines Quadrates aus Grobgitterpunkten wird über die angrenzenden Werte gemittelt (siehe Abbildung 2.2). Sie ist exakt für Funktionen  $f(x, y) = x, y, xy$  und kann in Schablonen-Notation (siehe Anhang A) ausgedrückt werden als

$$[\hat{P}_{\text{bilin}}^\dagger] = \frac{1}{4} \begin{bmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 2 & 4 & 2 \\ 1 & 2 & 1 \end{bmatrix}. \quad (2.24)$$

Die einfachste Wahl für die Restriktion ist die *direkte Injektion* (engl. *straight injection*)

$$[\hat{R}_{\text{inj}}] = [1], \quad (2.25)$$

bei der einfach der Wert an jedem Grobgitterpunkt vom korrespondierenden Feingitterpunkt übernommen wird und alle Feingitterpunkte, die zwischen den Grobgitterpunkten liegen ignoriert werden. Dies kann aber zum Verlust von zuviel Information über die Gitterfunktion führen.

Deshalb ist es besser (aber auch aufwendiger), den zur gewählten Prolongation adjungierten Operator oder ein Vielfaches desselben als Restriktion zu verwenden. Im Falle der bilinearen Interpolation ist dies die sog. *Vollgewichtung* (engl. *full weighting*)

$$R_{\text{fw}} = \frac{1}{4} P_{\text{bilin}}^\dagger \quad (2.26)$$

Ein Kompromiß zwischen direkter Injektion und Vollgewichtung ist die sog. *Halbgewichtung* (engl. *half weighting*)

$$[\hat{R}_{\text{hw}}] = \frac{1}{8} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 4 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}. \quad (2.27)$$

Diese ist dünner besetzt als die Vollgewichtung und ist deshalb numerisch weniger aufwendig.

In der Implementierung wurde als Prolongation bilineare Interpolation und als Restriktion Halbgewichtung gewählt. Es ist zu bemerken, daß an den Rändern des Gebietes die Transferoperatoren mithilfe der Randbedingungen modifiziert werden müssen, da dort nicht alle Nachbargitterpunkte definiert sind.

### 2.3.3. Formulierung des Grobgitter-Problems (FAS)

Es bestehen mehrere Möglichkeiten, das Grobgitter-Problem zu formulieren:

1. Übertragung der Residuumsleichung (Gleichung für den Fehler) auf das Grobgitter. Die berechnete und rückübertragene Grobgitterkorrektur wird dann zur Feingitterlösung hinzuaddiert. Die Grobgitterkorrektur muß somit in Konvergenz null sein.

Diese Methode wird meist bei linearen Problemen verwendet.

2. Übertragung der Feingittergleichung selbst auf das Grobgitter und Berechnung der vollen Lösung anstatt nur einer Korrektur zur Lösung. In diesem Fall liefert dann die *Differenz* zwischen Feingitterlösung und Grobgitterlösung die Korrektur zur Feingitterlösung (s.u., Gl. (2.31))

Diese sog. FAS-Methode (engl. *Full Approximation Scheme*) wird hauptsächlich bei nichtlinearen Problemen angewandt.

Wir verwenden im folgenden die FAS-Methode, da diese für Eigenwertprobleme besser geeignet ist.

Das Problem auf dem feinen Gitter ist gegeben durch

$$L^k u^k = \tau^k . \quad (2.28)$$

Ziel ist es nun, das Grobgitter-Problem so zu konstruieren, daß dessen Lösung eine gute Näherung für die auf das Grobgitter übertragene Feingitterlösung ist, d.h. in Konvergenz sollte gelten

$$U^{k-1} = \hat{R}^k U^k , \quad (2.29)$$

wobei  $U^{k-1}$  und  $U^k$  die exakten Lösungen des Grobgitter- bzw. Feingitter-Problems bezeichnen. Dies kann erreicht werden, indem man die rechte Seite  $\tau^{k-1}$  des Grobgitterproblems wie folgt spezifiziert:

$$L^{k-1} u^{k-1} = \tau^{k-1} \quad \text{mit} \quad \tau^{k-1} = L^{k-1} R^k u^k + R^k (\tau^k - L^k u^k) . \quad (2.30)$$

In Konvergenz ist damit (2.29) tatsächlich erfüllt, wie man durch Einsetzen der exakten Lösung  $U^k$  in (2.30) einfach nachprüfen kann.

Eine Lösung  $u^{k-1}$  von (2.30) kann dann verwendet werden, um die Lösung  $u^k$  auf dem Feingitter zu korrigieren:

$$u^k = u^k + \hat{P}^{k-1}(u^{k-1} - \hat{R}^k u^k) . \quad (2.31)$$

Hier sieht man, daß in Konvergenz, d.h. wenn (2.29) zutrifft, die Klammer in (2.31) verschwindet und somit die exakte Lösung  $U^k$  nicht mehr verändert wird. Die Klammer in (2.31) ist gerade die Differenz zwischen Grobgitterlösung und übertragener Feingitterlösung auf dem groben Gitter.

#### 2.3.4. Zweigitter-Algorithmus

Mit den in den vorangegangenen Abschnitten vorgestellten Konzepten läßt sich nun der Zweigitter-Algorithmus formulieren. Ein sog. *Zyklus* des Algorithmus ist in Alg. 2.2 dargestellt. Man kann den Zyklus beliebig oft wiederholen, bis die gewünschte Konvergenz erreicht wird.

Der Zyklus kann im wesentlichen in 5 Schritte gegliedert werden:

1.  $N_{\text{pre}}$  Relaxationsschritte auf dem Feingitter (Vorglättung)
2. Übertragung der Lösung auf das Grobgitter
3.  $N_{\text{coarse}}$  Relaxationsschritte auf dem Grobgitter
4. Korrektur der Feingitterlösung
5.  $N_{\text{post}}$  Relaxationsschritte auf dem Feingitter (Nachglättung)

Die Struktur und Funktionsweise des Algorithmus ist in Abbildung 2.3 angedeutet.

Die entscheidende Verbesserung gegenüber der einfachen Relaxation besteht darin, daß jetzt durch die Relaxation auf dem groben Gitter auch die glätteren Fehleranteile besser eliminiert werden können. Der Zweigitter-Algorithmus führt damit schon auf die wesentliche Technik die allen Mehrgitter-Verfahren zugrunde liegt, nämlich das *Zusammenspiel* von Relaxationen auf unterschiedlich groben Gittern zur effizienten Eliminierung *aller* Fehlerkomponenten, nicht nur der oszillierenden Komponenten.

### 2.4. Mehrgitter-Verfahren

Das Grobgitter im Zweigitter-Algorithmus 2.2 ist üblicherweise immer noch recht fein, daher können dort noch nicht alle glatten Fehlerkomponenten effizient eliminiert werden. Wir können den Algorithmus aber erweitern und die einfache Relaxation auf dem Grobgitter (Zeilen 6 bis 8 in Alg. 2.2) wiederum durch eine Grobgitterkorrektur, jetzt mit einem noch gröberen Gitter  $\mathcal{G}^{k-2}$ , ersetzen. Dieses Schema kann rekursiv zu immer gröberen Gittern hin fortgesetzt werden. Man erhält dadurch das sog. Mehrgitter-Verfahren, welches in Algorithmus 2.3 dargestellt ist und in Abbildung 2.4 illustriert wird. Die Durchführung von rekursiven Grobgitterkorrekturen mit einem feinen Gitter als Ausgangs- und Endpunkt bezeichnet man als *Mehrgitter-Zyklus*.

## Algorithmus 2.2: Zweigitter-Algorithmus

**NAME:**  $ZG(u^k)$   
**IN:**  $u^k$ : Startlösung auf dem feinen Gitter;  $\tau^k$ : rechte Seite des Feingitterproblems  
**OUT:**  $u^k$ : verbesserte Lösung auf dem feinen Gitter  
**PARAM:**  $N_{\text{pre}}, N_{\text{post}}, N_{\text{coarse}}, \text{SMOOTH}(u^k, \tau^k), \hat{R}, \hat{P}$

```

1: repeat  $N_{\text{pre}}$  times
2:    $u^k = \text{SMOOTH}(u^k, \tau^k)$  // Vorglättung
3: end
4:  $u^{k-1} = \hat{R}^k u^k$  // Übertragung auf grobes Gitter
5:  $\tau^{k-1} = L^{k-1} R^k u^k + R^k (\tau^k - L^k u^k)$ 
6:   repeat  $N_{\text{coarse}}$  times
7:      $u^{k-1} = \text{SMOOTH}(u^{k-1}, \tau^{k-1})$  // Grobgitter-Relaxation
8:   end
9:  $u^k = u^k + \hat{P}^{k-1} (u^{k-1} - \hat{R}^k u^k)$  // Korrektur der Feingitterlösung
10: repeat  $N_{\text{post}}$  times
11:    $u^k = \text{SMOOTH}(u^k, \tau^k)$  // Nachglättung
12: end

```

---

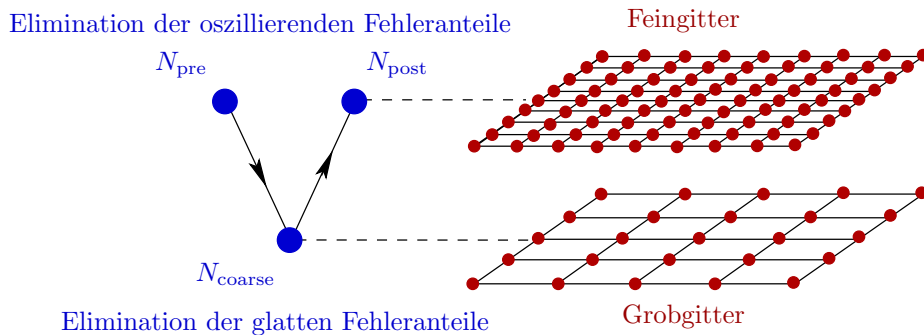


Abbildung 2.3.: symbolische Darstellung der Zwei-Gitter-Korrektur (Alg. 2.2). Die drei Punkte links stehen für die Vor- und Nachglättung sowie für die Grobgitter-Relaxation, wobei die Anzahl der Relaxationsschritte jeweils daneben angegeben ist. Die Verbindungen zwischen den Punkten sollen die Übertragung des Problems vom Feingitter auf das Grobgitter und die Korrektur der Feingitterlösung nach der Grobgitter-Relaxation symbolisieren.

## Algorithmus 2.3: Mehrgitter-Verfahren

**NAME:**  $\text{MG}(u^k, \tau^k)$   
**IN:**  $u^k$ : Lösung auf dem Gitter  $\mathcal{G}^k$ ;  $\tau^k$ : rechte Seite des Problems auf  $\mathcal{G}^k$   
**OUT:**  $u^k$ : verbesserte Lösung auf  $\mathcal{G}^k$   
**PARAM:**  $N_{\text{pre}}, N_{\text{post}}, N_{\text{base}}, n_{\text{cycles}}, \text{SMOOTH}(u^k, \tau^k), \hat{R}, \hat{P}$

```

1:  if  $k = 1$  then                                     // Basisgitter erreicht
2:      repeat  $N_{\text{base}}$  times
3:           $u^1 = \text{SMOOTH}(u^1, \tau^1)$                  // Relaxation auf Basisgitter
4:      end
5:  else                                                 // rekursive Grobgitter-Korrektur
6:      repeat  $N_{\text{pre}}$  times
7:           $u^k = \text{SMOOTH}(u^k, \tau^k)$                  // Vorglättung
8:      end
9:       $u^{k-1} = \hat{R}^k u^k$ 
10:      $\tau^{k-1} = L^{k-1} R^k u^k + R^k (\tau^k - L^k u^k)$  // Übertragung auf grobes Gitter
11:     repeat  $n_{\text{cycles}}$  times
12:          $\text{MG}(u^{k-1}, \tau^{k-1})$                      // rekursiver Aufruf von MG
13:     end
14:      $u^k = u^k + \hat{P}^{k-1} (u^{k-1} - \hat{R}^k u^k)$        // Korrektur der Feingitterlösung
15:     repeat  $N_{\text{post}}$  times
16:          $u = \text{SMOOTH}(u^k, \tau^k)$                  // Nachglättung
17:     end
18: end if

```

---

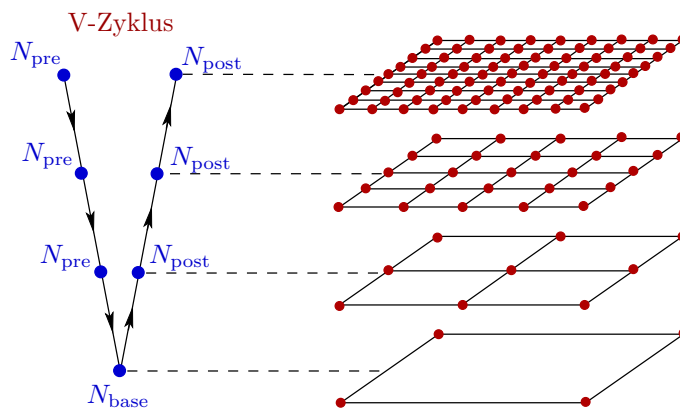


Abbildung 2.4.: symbolische Darstellung des Mehrgitter-Verfahrens (Alg. 2.3). Begonnen wird auf dem feinsten Gitter mit einer beliebigen (zufälligen) Startlösung, die durch Relaxation und rekursiv angewandte Grobgitter-Korrektur schrittweise verbessert wird.

Zusätzlich zu den im Zweigitter-Algorithmus auftauchenden Parametern kommen weitere Freiheiten hinzu:

- die Anzahl der Gitter bzw. die Wahl des größten Gitters (*Basisgitter*), wo keine weitere Grobgitterkorrektur mehr durchgeführt wird.
- die Anzahl  $n_{\text{cycles}}$  der rekursiven Aufrufe des Mehrgitterzyklus. In Abbildung 2.4 ist ein sog. *V-Zyklus* ( $n_{\text{cycles}} = 1$ ) dargestellt. Auch gebräuchlich ist der sog. *W-Zyklus* mit  $n_{\text{cycles}} = 2$ .

### 2.4.1. Vollständiges Mehrgitter-Verfahren (FMG)

Das Mehrgitter-Verfahren (Alg. 2.3) geht von einer Startlösung auf dem feinsten Gitter aus, die durch Relaxation auf dem Feingitter und durch rekursive Grobgitter-Korrektur verbessert wird. Es bleibt also die Frage nach einer geeigneten Startlösung.

Es bietet sich an, auch für die Ermittlung einer Startlösung die größeren Gitter zu benutzen. Relaxationen sind dort im Vergleich zum Feingitter sehr viel weniger aufwendig, besonders auf dem größten Gitter  $\mathcal{G}^1$ . Deshalb starten wir auf  $\mathcal{G}^1$  mit einer zufälligen Lösung und führen dort zunächst einige Relaxationen durch. Deren Anzahl  $N_{\text{init}}$  kann dabei sehr groß sein, da der Aufwand von Relaxationen auf  $\mathcal{G}^1$  vernachlässigbar klein ist. Dann wird die Lösung auf das nächst feinere Gitter  $\mathcal{G}^2$  übertragen. Hier kann nun das Konzept der Grobgitter-Korrektur wieder angewendet werden, wir führen also anstatt einfacher Relaxationen auf  $\mathcal{G}^2$  einen Mehrgitter-Zyklus ausgehend von  $\mathcal{G}^2$  aus ( $\mathcal{G}^2 \rightarrow \mathcal{G}^1 \rightarrow \mathcal{G}^2$ ).

Dieses Schema kann nun zu immer feineren Gittern hin fortgesetzt werden, bis das feinste Gitter  $\mathcal{G}^l$  erreicht ist, wo die erhaltene Lösung als Startpunkt für den eigentlichen Mehrgitter-Zyklus dient. Man nennt diese Vorgehensweise zur Bestimmung einer Startlösung *geschachtelte Iteration* (engl. *nested iteration*).

Setzen wir nun die geschachtelte Iteration und den Mehrgitter-Zyklus zusammen, so ergibt sich das sog. vollständige Mehrgitter-Verfahren (engl. *Full Multigrid*, FMG), welches in Alg. 2.4 und in Abb. 2.5 dargestellt ist.

---

Algorithmus 2.4: Vollständiges Mehrgitter-Verfahren

---

**NAME:** FMG( $u^1$ )  
**IN:**  $u^1$ : (zufällige) Startlösung auf dem größten Gitter  
**OUT:**  $u^l$ : Lösung auf dem feinsten Gitter  $\mathcal{G}^l$   
**PARAM:**  $l, N_{\text{init}}, \text{SMOOTH}(u^k, \tau^k), \hat{P}, \text{MG}(u^k, \tau^k)$

```

1: repeat  $N_{\text{init}}$  times
2:    $u^1 = \text{SMOOTH}(u^1, 0)$  // Relaxation mit Startlösung
3: end
4: for  $k = 2 \dots l$ 
5:    $u^k = \hat{P}^{k-1} u^{k-1}$  // geschachtelte Iteration + Mehrgitter-Zyklus
6:    $\text{MG}(u^k, 0)$ 
7: next  $k$ 

```

---

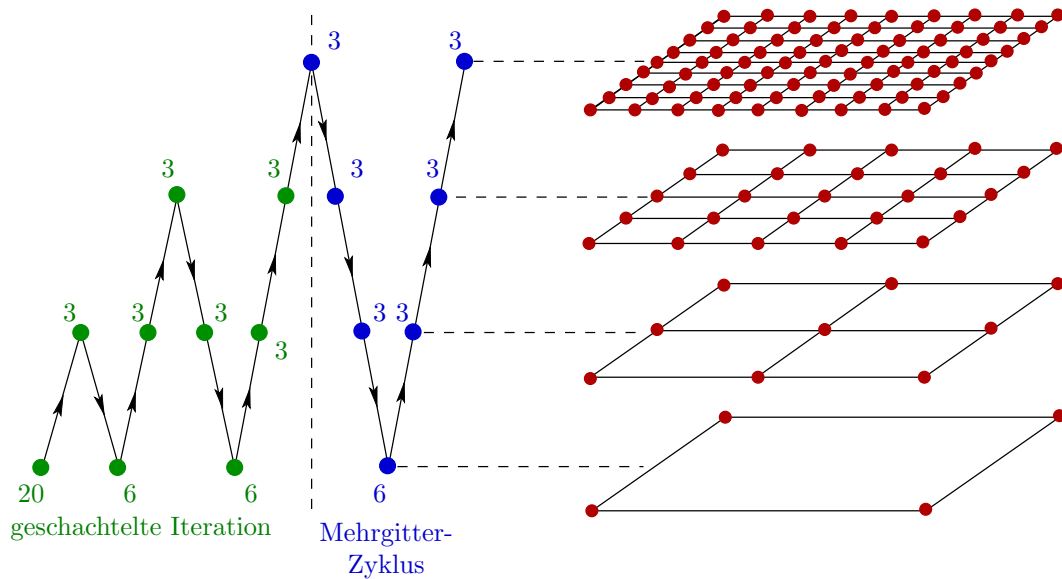


Abbildung 2.5.: symbolische Darstellung des Vollständigen Mehrgitter-Verfahrens. Zusätzlich zum Mehrgitter-Zyklus, der auf dem feinsten Gitter beginnt, wird eine geeignete Startlösung durch geschachtelte Iteration bestimmt. (Die Zahlenangaben sind Beispiele für sinnvolle Werte der Parameter:  $N_{\text{init}} = 20, N_{\text{pre}} = N_{\text{post}} = 3, N_{\text{base}} = N_{\text{pre}} + N_{\text{post}}$ )



## 2.5. Eigenwertproblem und Mehrgitter-Verfahren

### 2.5.1. Iterative Anpassung des Eigenwert

Zu Beginn des Kapitels wurde schon angedeutet, daß Eigenwertprobleme der Form

$$M(\vec{r})u_i(\vec{r}) - \lambda_i u_i(\vec{r}) = 0, \quad (2.32)$$

im speziellen das Eigenwertproblem der Wellengleichung mit

$$M(\vec{r}) = \frac{1}{\epsilon(\vec{r})} \Delta_2 \quad M(\vec{r}) = \nabla_2 \cdot \frac{1}{\epsilon(\vec{r})} \nabla_2 \quad \lambda_i = \frac{\omega_i^2}{c^2}, \quad (2.33)$$

(E-Polarisation)                      (H-Polarisation)

bei *bekanntem* Eigenwert  $\lambda_i$  als Randwertprobleme der Form (2.1) für die einzelnen Eigenmoden behandelt werden können, indem man  $\lambda_i$  nur als Parameter behandelt und in (2.1) als Operator

$$L(\vec{r}) = M(\vec{r}) - \lambda_i \quad (2.34)$$

verwendet. Hierfür kann das Mehrgitter-Verfahren direkt eingesetzt werden.

Die Eigenwertberechnung selbst kann parallel zur iterativen Bestimmung der Eigenmode erfolgen. Der sog. *Rayleigh-Quotient*

$$\lambda = \frac{\langle \hat{M}^k u^k - \tau^k | u^k \rangle}{\langle u^k | u^k \rangle} \quad (2.35)$$

liefert für eine gegebene Eigenmode  $u^k$  eine gute Approximation für den Eigenwert.<sup>3</sup> Wir aktualisieren also lediglich den Eigenwert „regelmäßig“ im Verlauf des Algorithmus und behandeln ihn sonst weiterhin als Parameter. Diese Aktualisierung wird vorzugsweise auf dem *Basisgitter* durchgeführt, wo die Berechnung des Rayleigh-Quotienten am wenigsten aufwendig ist.

### 2.5.2. Orthogonalisierung der Eigenmoden

Aufgrund der Glättungseigenschaft der iterativen Lösungsverfahren konvergiert das Mehrgitter-Verfahren immer gegen die glättteste Eigenmode bzw. den kleinsten Eigenwert. Um mehrere, linear unabhängige Eigenmoden zu erhalten, müssen diese folglich innerhalb des Mehrgitter-Algorithmus voneinander getrennt gehalten werden, damit sie nicht alle gegen dieselbe Eigenmode konvergieren. Dies wird beispielsweise durch regelmäßige *Gram-Schmidt-Orthogonalisierung*

$$u_n = u_n - \sum_{i=1}^{n-1} \langle u_n | u_i \rangle u_i \quad (2.36)$$

---

<sup>3</sup>die rechte Seite  $\tau^k$  tritt durch die Konstruktion des Grobgitterproblems (Abschnitt 2.3.3) auf und ist auf dem feinsten Gitter null.

bewerkstelligt, wobei das Skalarprodukt im Falle der Wellengleichung entsprechend der Orthonormalitätsrelationen (1.15) und (1.16) definiert werden muß. Die Orthogonalisierung wird vorzugsweise auf dem Basisgitter in Kombination mit der Aktualisierung des Eigenwerts ausgeführt, weil zum einen der Aufwand auf dem Basisgitter am geringsten ist und weil zum anderen für die Aktualisierung des Eigenwerts Vermischungen der Eigenmoden verhindert werden müssen, die den Rayleigh-Quotienten verfälschen würden.

### 2.5.3. Ritz-Projektion

Nach einem Mehrgitter-Zyklus erhält man  $q$  linear unabhängige Eigenmoden ( $\tilde{u}_i$ ) und zugehörige Eigenwerte, die gegenseitig aufeinander orthonormal stehen. Sie spannen den Unterraum  $\tilde{\mathcal{X}}$  des gesamten Raums  $\mathcal{Y}$  der Eigenmoden von  $\hat{L}$  auf:

$$\tilde{\mathcal{X}} = \text{span}(\tilde{u}_1, \dots, \tilde{u}_q) \quad \tilde{\mathcal{X}} \subset \mathcal{Y}. \quad (2.37)$$

$\tilde{\mathcal{X}}$  ist wegen der evtl. immer noch vorhandenen Fehleranteile der approximativen Eigenmoden nicht gleich dem exakten Eigenraum  $\mathcal{X}$  der ersten  $q$  Eigenmoden, aber schon eine gute Approximation desselben.

Mit der Ritz-Projektion wird nun versucht, die *bestmögliche Basis* von  $\tilde{\mathcal{X}}$  zu finden, deren Basisvektoren  $\bar{u}_i$  in einer gewissen Weise den exakten Eigenmoden  $u_i$  am nächsten liegen.

Wir schreiben zunächst die gesuchten Eigenmoden  $\bar{u}_i$  als Linearkombination der bekannten  $\tilde{u}_i$ :

$$\mathbf{U} = [\tilde{u}_1, \dots, \tilde{u}_q] \quad \bar{u}_i = \mathbf{U}\mathbf{z}_i, \quad (2.38)$$

wobei  $\mathbf{U}$  und  $\mathbf{z}$  Vektoren in  $\tilde{\mathcal{X}}$  seien. Damit ist  $\mathbf{U}\mathbf{U}^T$  ein Projektor auf den Unterraum  $\tilde{\mathcal{X}}$ .

Im nächsten Schritt wird gefordert, daß die Projektion der Residuen der neuen Eigenmoden  $\bar{u}_i$  auf  $\tilde{\mathcal{X}}$  verschwinden soll:

$$\mathbf{U}\mathbf{U}^T(\hat{M}\mathbf{U}\mathbf{z}_i - \lambda_i\mathbf{U}\mathbf{z}_i) \stackrel{!}{=} 0 \quad \iff \quad \boxed{\mathbf{U}^T\hat{M}\mathbf{U}\mathbf{z}_i - \lambda_i\mathbf{z}_i = 0}. \quad (2.39)$$

Dies entspricht der Forderung, daß das Residuum der  $\bar{u}_i$  keine Komponenten mehr aus dem Unterraum  $\tilde{\mathcal{X}}$  enthält, d.h. alle Fehleranteile, die in  $\tilde{\mathcal{X}}$  dargestellt werden können, werden durch die Ritz-Projektion eliminiert.

Die Gleichung (2.39) stellt ein  $q$ -dimensionales, hermitesches Eigenwertproblem für die Eigenwerte  $\lambda_i$  und die Koeffizientenvektoren des Basiswechsels  $\mathbf{z}_i$  dar. Aus den Lösungen  $\mathbf{z}_i$  lassen sich die neuen Eigenmoden  $\bar{u}_i$  konstruieren, die dadurch automatisch orthogonal sind. Die Eigenwerte  $\lambda_i$  sind gleich den Rayleigh-Quotienten der  $\bar{u}_i$ .

Es stellt sich heraus, daß die Ritz-Projektion *entscheidend* zur stabilen Konvergenz des gesamten Mehrgitter-Verfahrens beiträgt.

### 2.5.4. Algorithmus für Eigenwertprobleme

Abschließend ist in Algorithmus 2.5 das auf Eigenwertprobleme erweiterte Mehrgitter-Verfahren aufgelistet. Einige Details der Implementierung sind der Einfachheit halber in diesem Abschnitt ausgelassen worden. Eine vollständigere Darstellung findet sich in [15].

---

Algorithmus 2.5: Vollständiges Mehrgitter-Verfahren für Eigenwertprobleme

**NAME:** EW-FMG( $\{u_i^1\}, \{\lambda_i\}$ )  
**IN:**  $\{u_i^1\}$ : Startlösungen auf dem gröbsten Gitter ;  $\{\lambda_i\}$ : Startwerte  
**OUT:**  $\{u_i^l\}$ : Eigenmoden auf dem feinsten Gitter  $\mathcal{G}^l$  ;  $\{\lambda_i\}$ : Eigenfrequenzen  
**PARAM:**  $l, n_{ev}, N_{init}, \text{SMOOTH}(u^k, \tau^k), \hat{P}, \text{EW-MG}(u_i^k, \tau_i^k)$

```

1:  for  $i = 1 \dots n_{ev}$ 
2:    repeat  $N_{init}$  times
3:       $u_i^1 = \text{SMOOTH}(u_i^1, 0)$            // Relaxation auf Basisgitter
4:       $\text{ORTHO}(u_i^1, \{u_{i-1}^1 \dots u_1^1\})$  // Orthogonalisierung
5:       $\lambda_i = \text{RAYLEIGHQUOT}(u_i^1, \tau_i^1)$  // Aktualisierung der Eigenfrequenz
6:    end
7:  next  $i$ 
8:  for  $k = 2 \dots l$ 
9:    for  $i = 1 \dots n_{ev}$ 
10:      $u_i^k = \hat{P}^{k-1} u_i^{k-1}$            // geschachtelte Iteration
11:      $\text{EW-MG}(u_i^k, 0)$                  // + Mehrgitter-Zyklus
12:    next  $i$ 
13:  next  $k$ 
14:   $\text{RITZ}(\{u_i^l\})$                      // Ritz-Projektion
```

**NAME:** EW-MG( $u_i^k, \tau_i^k$ )  
**IN:**  $u_i^k$ :  $i$ -te Eigenmode auf dem Gitter  $\mathcal{G}^k$ ;  $\tau_i^k$ : rechte Seite auf  $\mathcal{G}^k$   
**OUT:**  $u_i^k$ : verbesserte Eigenmode auf  $\mathcal{G}^k$   
**PARAM:**  $N_{pre}, N_{post}, N_{base}, n_{cycles}, \text{SMOOTH}(u^k, \tau^k), \hat{R}, \hat{P}$

```

1:  if  $k = 1$  then                       // Basisgitter erreicht
2:    repeat  $N_{base}$  times
3:       $u_i^1 = \text{SMOOTH}(u_i^1, \tau^1)$        // Relaxation auf Basisgitter
4:       $\text{ORTHO}(u_i^1, \{u_{i-1}^1 \dots u_1^1\})$  // Orthogonalisierung
5:       $\lambda_i = \text{RAYLEIGHQUOT}(u_i^1, \tau_i^1)$  // Aktualisierung der Eigenfrequenz
6:    end
7:  else
8:    ...                                   // analog zu Alg. 2.3, Zeilen 6-17
9:  end if
```

---

## 2.6. Verbesserungen und Ausblick

Das hier vorgestellte Mehrgitter-Verfahren kann prinzipiell in sehr vielen verschiedenen Varianten implementiert werden. Die Freiheiten bestehen in der Wahl

- des Diskretisierungsschemas und der Gitterhierarchie,
- des iterativen Lösungsverfahrens ( $\text{SMOOTH}(u^k, \tau^k)$ ),
- der Transferoperatoren ( $\hat{R}, \hat{P}$ ) und
- der Relaxationsparameter (s. Algorithmus 2.5).

Ein mögliches *Diskretisierungsschema* ist beispielsweise die in Abschnitt 2.1 vorgestellte und auch in der konkreten Implementierung verwendete Finite-Differenzen-Diskretisierung (FD). Weitere Möglichkeiten sind die Finite-Volumen-Diskretisierung (FV) und die *Finite-Elemente-Methode* (FE) [17]. Gerade letztere bietet aufgrund der wesentlich flexibleren Gittergeometriemöglichkeiten und auch wegen der besseren Konvergenzeigenschaften gegenüber der FD-Diskretisierung ein großes Verbesserungspotential. Vom Diskretisierungsschema hängt entscheidend der sog. *Abschneidefehler* ab, der die Diskrepanz zwischen der Lösung des kontinuierlichen und der Lösung des diskretisierten Problems angibt.

Zur Verbesserung des Diskretisierungsschemas gehört ausserdem die Möglichkeit, *adaptive*, lokal verfeinerte Gitter anstatt uniformer Gitter zu verwenden. Durch Verwendung von Fehlerabschätzungen kann bestimmt werden, in welchen Bereichen der Fehler der Lösung besonders groß ist und speziell dort eine feinere Diskretisierung gewählt werden.

Ebenso kann das Mehrgitter-Verfahren durch die Wahl anderer iterativer Lösungsverfahren (anstatt der hier verwendeten Gauß-Seidel-Relaxation) in Zukunft noch weiter ausgebaut werden. Zu erwähnen ist hier beispielsweise die unvollständige LU-Zerlegung (ILU, engl. *Incomplete LU factorization*) [16].

Speziell bei Problemen mit diskontinuierlichen Koeffizienten, wie zum Beispiel der Wellengleichung mit sich sprunghaft ändernder Dielektrizitätskonstante, ist bekannt, daß die Konvergenz und Robustheit der Mehrgitter-Methode stark verbessert werden kann, indem man *operatorabhängige Transferoperatoren* einführt. Als weiteren Schritt kann man auch die Konstruktion der Gitterhierarchie anhand bestimmter operatorabhängiger Gesichtspunkte automatisieren. Dies führt auf die sogenannten *algebraischen Mehrgitter-Verfahren*, die als sehr robust (d.h. auf eine sehr große Klasse von Problemen effizient anwendbar) gelten [18].

Ein weiteres Ziel kann es sein, die Relaxationsparameter, die im Verfahren auftreten, teilweise automatisch anzupassen, z.B. die Zahl der Vor-, Nach- und Basisiterationen flexibel zu handhaben und nach anzugebenden Konvergenzvorgaben zu wählen. Für eine bereits konvergierte Eigenmode müssen beispielsweise keine weiteren Mehrgitterzyklen durchgeführt werden. Dafür kann für andere, schlechter konvergierte Moden mehr Zeit aufgewendet werden. Dies könnte sowohl die Rechenzeit senken als auch die Konvergenz deutlich verbessern.

**Fazit:** Die Mehrgitter-Methode bietet noch sehr viel Spielraum für mögliche Verbesserungen. Das bisher implementierte Verfahren mit uniformer FD-Diskretisierung, Gauß-Seidel-Relaxation und fester Parameterwahl, welches im folgenden Kapitel zur Berechnung der Band- und Modenstrukturen verwendet wird, stellt insofern nur den einfachsten Fall dar.



# 3. Anwendung auf 2D-Photonischen Kristall

## Kristall

In diesem Kapitel soll das Mehrgitter-Verfahren, wie es in Kapitel 2 beschrieben wurde, auf einen 2D-Photonischen Kristall angewandt werden.

### 3.1. Modell

Wir betrachten hier als Beispiel einen 2D-Kristall aus dielektrischem Material (Silizium,  $\epsilon_b = 11.9$ ), in das zylinderförmige Löcher gebohrt sind ( $\epsilon_a = 1.0$ ). Die Einheitszelle sei quadratisch. Das Verhältnis des Radius' zur Gitterkonstanten betrage  $R/a = 0.4$ . Dies entspricht einem Volumenverhältnis Luft-Silizium von  $f = 0.503$ . Ein Modell für diesen Kristall ist in Abbildung 3.1 dargestellt. In Abbildung 3.1(b)

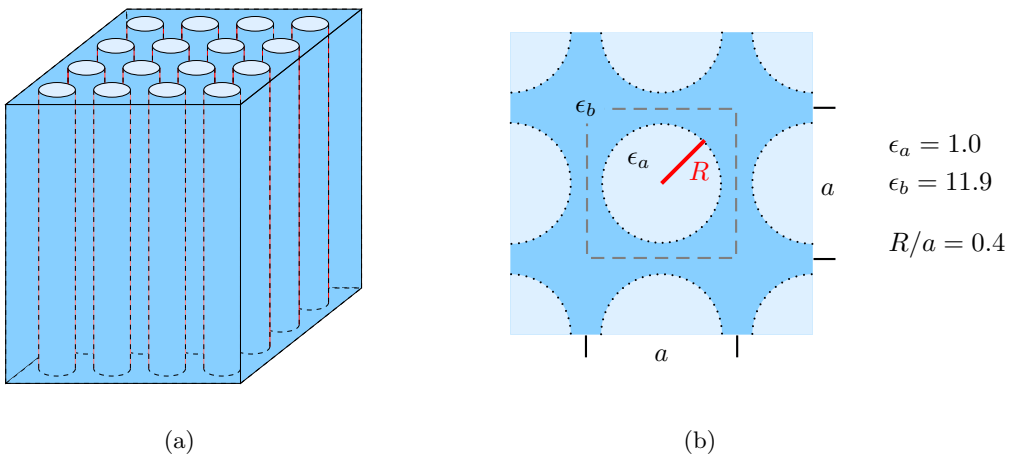


Abbildung 3.1.: (a) Modell eines 2D-Kristalls aus einem dielektrischen Material (Silizium,  $\epsilon_b = 11.9$ , dunkel gezeichnet), in das zylinderförmige Löcher gebohrt sind ( $\epsilon_a = 1.0$ ). (b) Die Einheitszelle (gestrichelt eingezeichnet) ist quadratisch, das Verhältnis  $R/a = 0.4$ .

ist ein Ausschnitt des Kristalls in Draufsicht gezeigt. Er beinhaltet im Zentrum eine Einheitszelle und wird jeweils durch halbe Einheitszellen an den Rändern bzw. viertel

Einheitszellen an den Ecken ergänzt.

Reale Kristalle dieser Form werden zum Beispiel am Max-Planck-Institut für Mikrostrukturphysik (Arbeitsgruppe Prof. Gösele) in Halle [19] hergestellt (Abbildung 3.2).

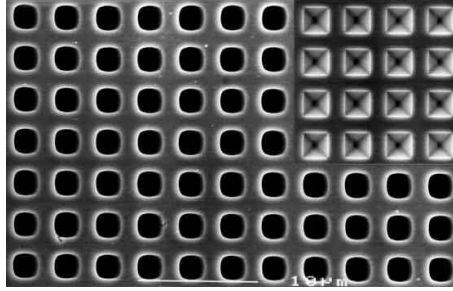


Abbildung 3.2.: Aufsicht eines 2D-Photonischen Kristalls aus makroporösem Silizium mit quadratischer Einheitszelle ( $a \approx 2.5\mu\text{m}$ , Bandlücke im Infraroten). Die Zylinder werden elektrochemisch aus dem Silizium herausgeätzt [19].

### 3.2. Bandstruktur

Wie in Abschnitt 1.1.3 erläutert, können im 2D-Fall die  $E$ - und die  $H$ -Polarisation voneinander entkoppelt werden. Daher können wir für diese beiden Polarisationen getrennte Bandstrukturen berechnen. In Abbildung 3.3 sind die Bandstrukturen für  $E$ - und  $H$ -Polarisation in einem Diagramm jeweils in verschiedenen Farben eingezeichnet. Es sind jeweils die untersten Bänder bis zu einer Frequenz von  $\tilde{\omega} \equiv \omega a/2\pi c = 0.65$  eingezeichnet.

Die Bandstruktur der  $E$ -Polarisation besitzt zwischen erstem und zweitem Band eine kleine Bandlücke:<sup>1</sup>

$$\tilde{\omega}_c = 0.220 \quad \frac{\Delta\tilde{\omega}}{\tilde{\omega}_c} = 2.1\% . \quad (3.1)$$

Desweiteren sieht man, daß sich einige Bänder kreuzen, z.B. das vierte und fünfte Band zwischen X und M und zwischen M und  $\Gamma$ . Es treten andererseits aber auch *Abstoßungspunkte* auf, an denen sich Bänder nahe kommen, sich jedoch nicht kreuzen, sondern gegenseitig abstoßen. Ein Beispiel hierfür ist bei den Bändern 5 und 6 zwischen M und  $\Gamma$  zu sehen. Um den Unterschied zwischen Kreuzungs- und Abstoßungspunkten besser herauszuheben, wurden die Bänder abwechselnd in rot bzw. orange geplottet. In der Diskussion der Modenstruktur in Abschnitt 3.3 wird darauf noch näher eingegangen.

---

<sup>1</sup>Die Größe der Bandlücken  $\Delta\tilde{\omega}$  wird üblicherweise relativ zur Mittenfrequenz  $\tilde{\omega}_c$  in Prozent angegeben.



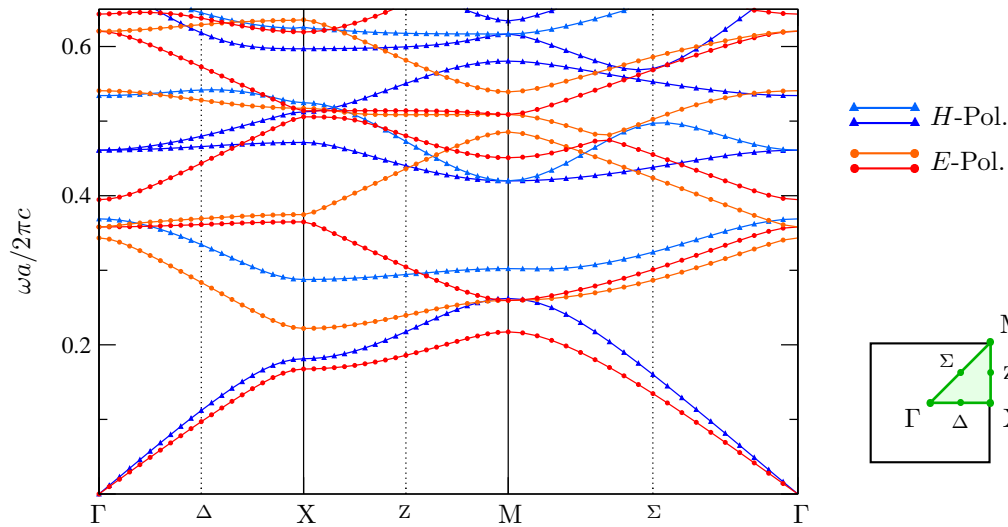


Abbildung 3.3.: Bandstruktur des Modell-Kristalls für  $E$ -Polarisation (rot) und  $H$ -Polarisation (blau). Zur Unterscheidung der Kreuzungs- und Abstoßungspunkte sind die Bänder abwechselnd dunkel und hell dargestellt. Rechts ist die erste Brillouinzone mit den Hochsymmetriepunkten  $\Gamma$ ,  $X$  und  $M$  gezeichnet.

In der  $H$ -Polarisation treten im betrachteten Frequenzbereich zwei Bandlücken auf:

$$\tilde{\omega}_{c,1} = 0.275 \quad \frac{\Delta\tilde{\omega}_1}{\tilde{\omega}_{c,1}} = 2.5\% , \quad (3.2)$$

$$\tilde{\omega}_{c,2} = 0.394 \quad \frac{\Delta\tilde{\omega}_2}{\tilde{\omega}_{c,2}} = 5.1\% . \quad (3.3)$$

Die Bandstrukturen der beiden Polarisationen überlagern sich so, daß keine vollständigen Bandlücken auftreten, auch nicht in höheren Frequenzbereichen. Dies ist eine allgemeine Eigenschaft des Quadratgitters, die auch noch für beliebig hohen Indexkontrast bestehen bleibt. Bei hexagonalen Gittern können dagegen vollständige Bandlücken in 2D vorkommen.

### 3.3. Modenstruktur

Von großem Interesse ist in vielen Anwendungen nicht nur die Bandstruktur im engeren Sinne (d.h. lediglich die Eigenfrequenzen des Kristalls in Abhängigkeit des Wellenvektors  $\vec{k}$ ), sondern auch die *Modenstruktur*. Unter Modenstruktur verstehen wir hier die Gesamtheit der Eigenmoden, die den Eigenfrequenzen in der Bandstruktur zugeordnet sind. Aus der Modenstruktur lassen sich beispielsweise wichtige Erkenntnisse über die Ankopplung eines äußeren Feldes an die Moden im Kristall gewinnen.

Die Ankopplung ist stark abhängig von den Symmetrieeigenschaften der Moden [20]. Einige Moden können allein aufgrund inkompatibler Symmetrien von außen nicht angeregt werden (siehe Abschnitt 3.3.2). Dies ist auch experimentell bestätigt worden [21].

Als Verlauf einer Mode bezeichnen wir die Entwicklung einer Eigenmode am  $\Gamma$ -Punkt (charakteristische Feldverteilung bzw. Betrag dieser), wie diese sich im  $\vec{k}$ -Raum verändert. In vielen Fällen entspricht dies den Moden entlang der Bänder der Bandstruktur, jedoch treten Abstoßungspunkte auf, an denen sich die Bänder der Bandstruktur nicht kreuzen, die Eigenmoden jedoch „ausgetauscht“ werden. Dann können sich die Verläufe der Moden von den Bändern der Bandstruktur unterscheiden. Die Modenverläufe werden nach ihren Frequenzen am  $\Gamma$ -Punkt sortiert.

In den Abbildungen 3.5 bis 3.10 sind die Verläufe der ersten 6 Moden des betrachteten Modellsystems für die  $E$ -Polarisation dargestellt. Die Abbildungen 3.11 bis 3.15 zeigen die Verläufe der ersten 5 Moden für die  $H$ -Polarisation. Aufgetragen sind jeweils die Eigenmoden an den Symmetriepunkten  $\Gamma$ ,  $X$  und  $M$  der Brillouinzone sowie an den Punkten  $\Delta$ ,  $Z$  und  $\Sigma$  (Mittelpunkte der Symmetrielinien  $\overline{\Gamma X}$ ,  $\overline{XM}$  und  $\overline{M\Gamma}$ , s. Abb. 3.3). In den Konturplots wurde der Ausschnitt des Kristalls gewählt, der schon in Abbildung 3.1(b) verwendet wurde. Die Farbskala reicht von dunkelblau (Wert -1 (E-Pol.) bzw. -3.5 (H-Pol.)) über grün (Wert 0) bis zu dunkelrot (Wert +1 bzw. +3.5). Sie ist für alle Moden derselben Polarisation die gleiche. Zusätzlich sind in den Plots die Luftzylinder durch gepunktete Kreise angedeutet.

Da die Blochmoden lediglich bis auf einen Phasenfaktor bestimmt sind, der in der numerischen Berechnung zufällig festgelegt wird, gehen wir zur Darstellung wie folgt vor:

- An den Symmetriepunkten können alle Blochmoden reell gewählt werden, da die Bloch-Randbedingungen dort reell sind und die Blochmoden somit Lösungen eines reellen Randwertproblems sind. Der Phasenfaktor wurde also so gewählt daß der Imaginärteil der Blochmoden verschwindet und es wurde nur der Realteil geplottet.
- Zwischen den Symmetriepunkten sind die Blochmoden komplex und können nicht durch Phasenwahl reell gemacht werden. Daher sind jeweils sowohl Real- als auch Imaginärteil geplottet. Die Phase ist dabei jedoch willkürlich und in den Bildern wurden manuell Phasen gewählt, so daß die resultierenden Real- und Imaginärteile optisch bezüglich des dargestellten Ausschnitts des Kristalls möglichst symmetrisch erschienen. Bei anderer Phasenwahl werden lediglich die hier gewählten Real- bzw. Imaginärteile gemischt bzw. ausgetauscht (Phasenfaktor  $e^{i\pi/2}$ ). Die essentiellen Symmetrieeigenschaften (wie z.B. die Symmetrie bezüglich der eingezeichneten Symmetrieebenen) sind natürlich unabhängig von der Phasenwahl und bleiben bei beliebiger Änderung der Phase bestehen.

### 3.3.1. Entartung

An Entartungspunkten in der Bandstruktur bilden die betroffenen Moden zunächst einen  $g$ -dimensionalen Unterraum ( $g$ : Entartungsgrad). Jede Linearkombination in diesem Unterraum ist selbst Eigenmode. Um die charakteristischen Moden bezüglich einer Richtung im  $\vec{k}$ -Raum zu erhalten (d.h. die Linearkombinationen, die sich als Grenzübergang der am Entartungspunkt entlang dieser Richtung zusammentreffenden Moden ergeben), wurden die Moden nicht direkt am Entartungspunkt, sondern minimal daneben mit einem minimal vom Symmetriepunkt in die entsprechende Richtung verschiedenen  $\vec{k}$ -Vektor berechnet. Dies stellt kaum eine Änderung der Moden selbst dar, jedoch wird die Entartung der zugehörigen Eigenfrequenzen aufgehoben und das Lösungsverfahren kann die jetzt getrennten Unterräume auflösen. In diesem Zusammenhang wären natürlich auch störungstheoretische Methoden anwendbar.

In der vorliegenden Bandstruktur (Abb. 3.3) finden wir Entartungspunkte am  $\Gamma$ -Punkt (Bänder 3+4 sowohl bei E- als auch bei H-Polarisation) und am  $M$ -Punkt (Bänder 2+3 und 6+7 bei E-Polarisation und Bänder 3+4 bei H-Polarisation), die jeweils zweifach entartet sind. Die Abbildungen zur Modenstruktur zeigen die charakteristischen Moden in Richtung der beiden Symmetrielinien, die am entsprechenden Entartungspunkt zusammenlaufen.

### 3.3.2. Symmetrien und ungekoppelte Moden

Anhand der gezeigten Modenstruktur können bestimmte Symmetrieeigenschaften, die in [20, 22] ausführlicher beschrieben werden, für das hier verwendete Modellsystem untersucht werden. Dazu ist es zunächst hilfreich, die Symmetrien gruppentheoretisch zu beschreiben. Das betrachtete Quadratgitter mit Zylindern gehört zur Punktgruppe  $C_{4v}$  (4-zählige Achse (Zylinderachse) mit insgesamt 4 vertikalen Spiegelebenen, s. Abb. 3.4(a)). Neben der Symmetriegruppe des Kristalls ist auch die Symmetriegruppe des betrachteten  $\vec{k}$ -Vektors wichtig, d.h. die Gruppe der Symmetrieeoperationen, unter denen der  $\vec{k}$ -Vektor (bis auf einen reziproken Gittervektor) invariant bleibt. Dies ist an den Hochsymmetriepunkten  $\Gamma$  und  $M$  ebenfalls die Gruppe  $C_{4v}$  während der  $\vec{k}$ -Vektor am  $X$ -Punkt und auf den Symmetrielinien zwischen  $\Gamma$ ,  $X$  und  $M$  nur reduzierte Symmetrie hat, nämlich zur Gruppe  $C_{2v}$  bzw.  $C_{1h}$  gehört. Die Symmetrieeoperationen sind in Abbildung 3.4(b) graphisch dargestellt. Die Gruppen  $C_{4v}$ ,  $C_{2v}$  und  $C_{1h}$  bestehen aus folgenden Elementen:

$$C_{4v} = \{E, 2C_4, C_2, 2\sigma_v, 2\sigma_d\} \quad C_{2v} = \{E, C_2, 2\sigma_v\} \quad C_{1h} = \{E, \sigma\} . \quad (3.4)$$

$E$  bezeichnet das Einheitselement,  $C_4$  und  $C_2$  stehen für Rotationen um  $90^\circ$  bzw.  $180^\circ$ . Desweiteren bezeichnen  $\sigma_v$  und  $\sigma_d$  Spiegelungen.

Jede Eigenmode des Kristalls gehört nun zu einer irreduziblen Darstellung der durch den Kristall und den  $\vec{k}$ -Vektor vorgegebenen Symmetriegruppe. Speziell für

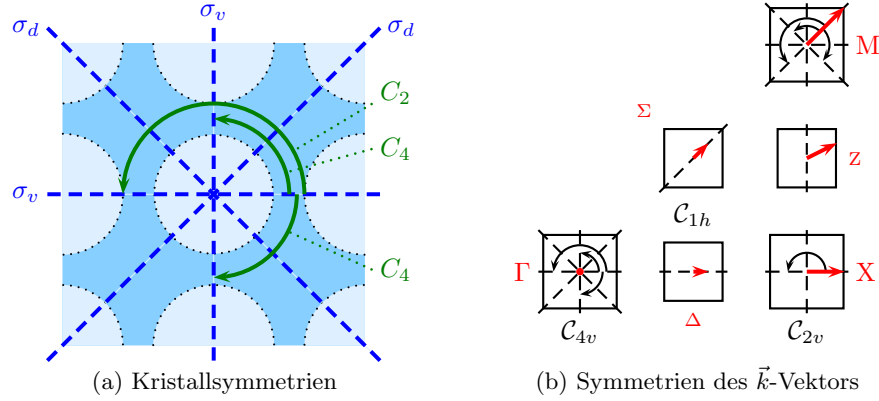


Abbildung 3.4.: Symmetrieeigenschaften des Modellkristalls und verschiedener  $\vec{k}$ -Vektoren in der Brillouinzone. Die gestrichelten Linien bezeichnen Spiegelebenen, die Bogen mit Pfeil stellen Rotationen dar.

die Gruppe  $C_{1h}$  gibt es nur zwei eindimensionale irreduzible Darstellungen  $A$  und  $B$ :

$$\text{Charaktere: } \begin{array}{c|cc} & E & \sigma \\ \hline A & 1 & 1 \\ B & 1 & -1 \end{array} \quad (3.5)$$

$A$  und  $B$  charakterisieren jeweils bezüglich der Ebenenspiegelung  $\sigma$  symmetrische bzw. antisymmetrische Eigenmoden. Auf den Symmetrielinien  $\overline{\Gamma X}$  und  $\overline{\Gamma M}$  wird die Spiegelebene  $\mathcal{S}_\sigma$  gerade aus dem Ausbreitungswellenvektor  $\vec{k}$  und der Zylinderachse des 2D-Kristalls  $\hat{z}$  gebildet. Alle zur Darstellung  $B$  gehörigen, bezüglich  $\sigma$  antisymmetrischen Moden können *nicht* von außen angeregt werden, da das einfallende Wellenfeld immer symmetrisch bezüglich  $\mathcal{S}_\sigma$  ist und daher nicht ankoppeln kann.

In den Abbildungen zur Modenstruktur sind die relevanten Spiegelebenen  $\mathcal{S}_\sigma$  gestrichelt eingezeichnet. Es ist ersichtlich, daß für die E-Polarisation die Moden der Bänder 3 (Abb. 3.7) und 6 (Abb. 3.10) zwischen  $\Gamma$  und X antisymmetrisch bezüglich  $\mathcal{S}_\sigma$  sind. Ebenso sind die Moden der Bänder 2 (Abb. 3.6) und 4 (Abb. 3.8) zwischen  $\Gamma$  und M antisymmetrisch bezüglich  $\mathcal{S}_\sigma$ . Für die H-Polarisation ist die Mode des 3. Bandes (Abb. 3.13) zwischen  $\Gamma$  und X antisymmetrisch bezüglich  $\mathcal{S}_\sigma$ , die Moden der Bänder 3 und 5 (Abb. 3.15) sind zwischen  $\Gamma$  und M antisymmetrisch bezüglich  $\mathcal{S}_\sigma$ . All diese Bänder ergeben folglich in Experimenten beispielsweise *keinen Beitrag* zur Transmission in den entsprechenden Einstrahlrichtungen. Wir bezeichnen dies als *ungekoppelte Moden*. Diese physikalisch relevanten Symmetrieeigenschaften werden durch die Wahl anderer Phasenfaktoren nicht verändert.

Die Symmetrie der Moden zwischen den Punkten X und M bezüglich der ebenfalls eingezeichneten Symmetrieebene  $\mathcal{S}_\sigma$  gebildet aus  $\overline{XM}$  und  $\hat{z}$  hat in diesem Zusammenhang keine so große Relevanz, da hier die Einfallrichtung nicht in  $\mathcal{S}_\sigma$  liegt und somit die einfallende Welle keine festgelegte Symmetrie bezüglich  $\mathcal{S}_\sigma$  hat.

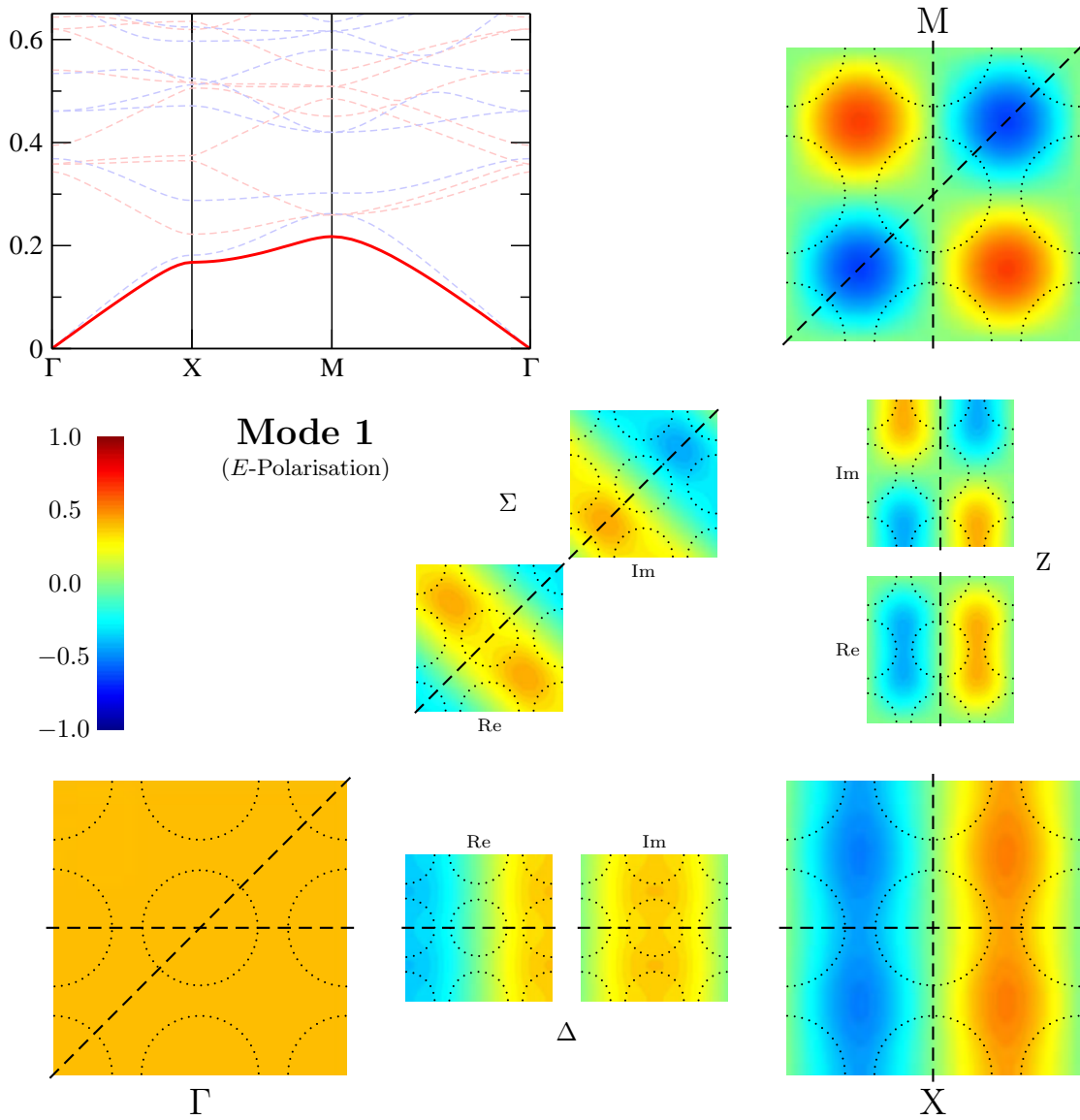


Abbildung 3.5.: Verlauf der 1. Mode der E-Polarisation entlang der Symmetrielinien  $\overline{\Gamma X}$ ,  $\overline{XM}$  und  $\overline{\Gamma M}$ .

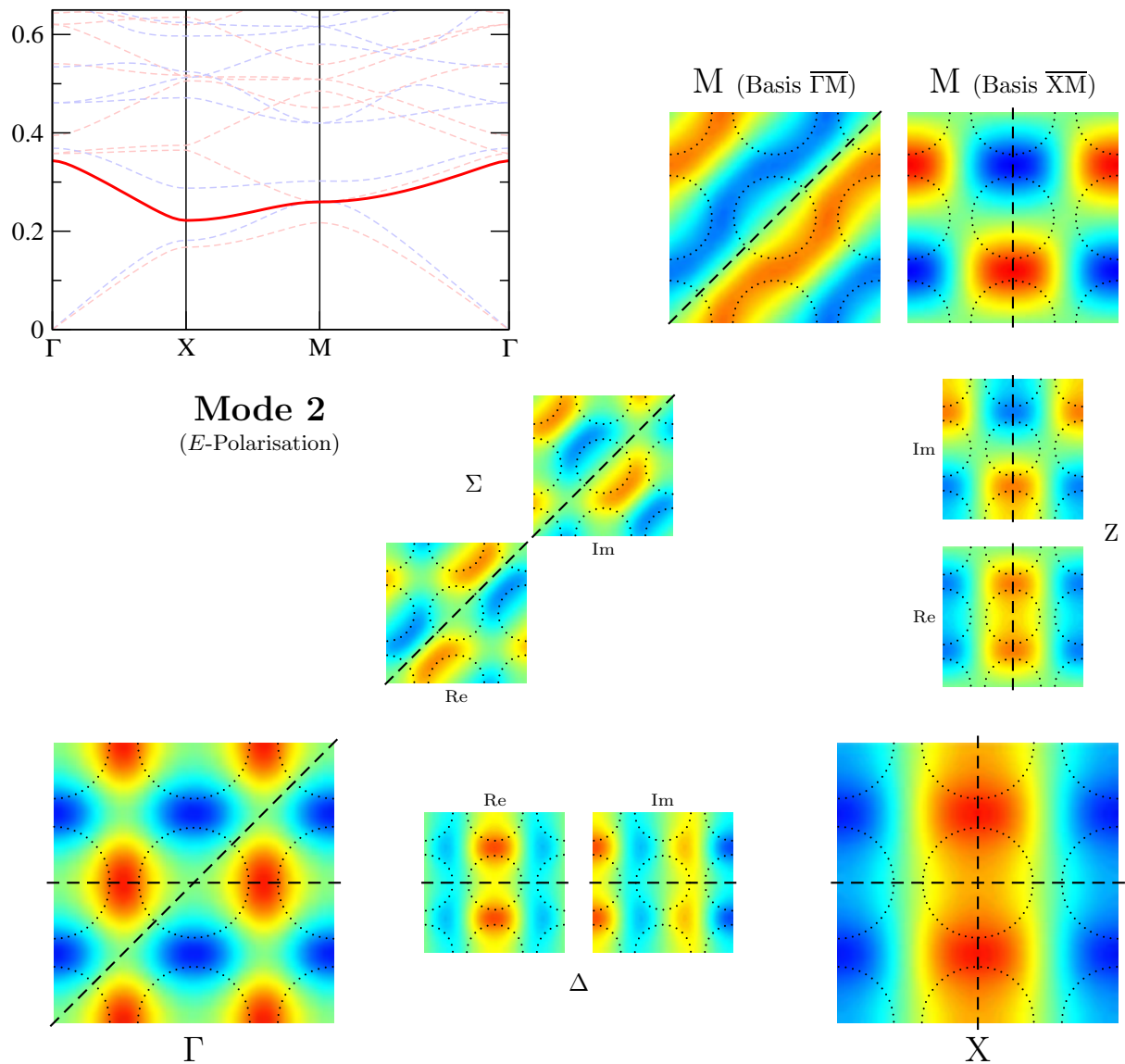


Abbildung 3.6.: Verlauf der 2. Mode der E-Polarisation entlang der Symmetrielinien  $\overline{\Gamma X}$ ,  $\overline{XM}$  und  $\overline{\Gamma M}$ . Am M-Punkt sind die Moden 2 und 3 entartet. Es werden daher zwei charakteristische Linearkombinationen geplottet, die die „natürliche Fortsetzung“ der Moden entlang der Symmetrielinien  $\overline{XM}$  bzw.  $\overline{\Gamma M}$  darstellen (s. Abschnitt 3.3.1).

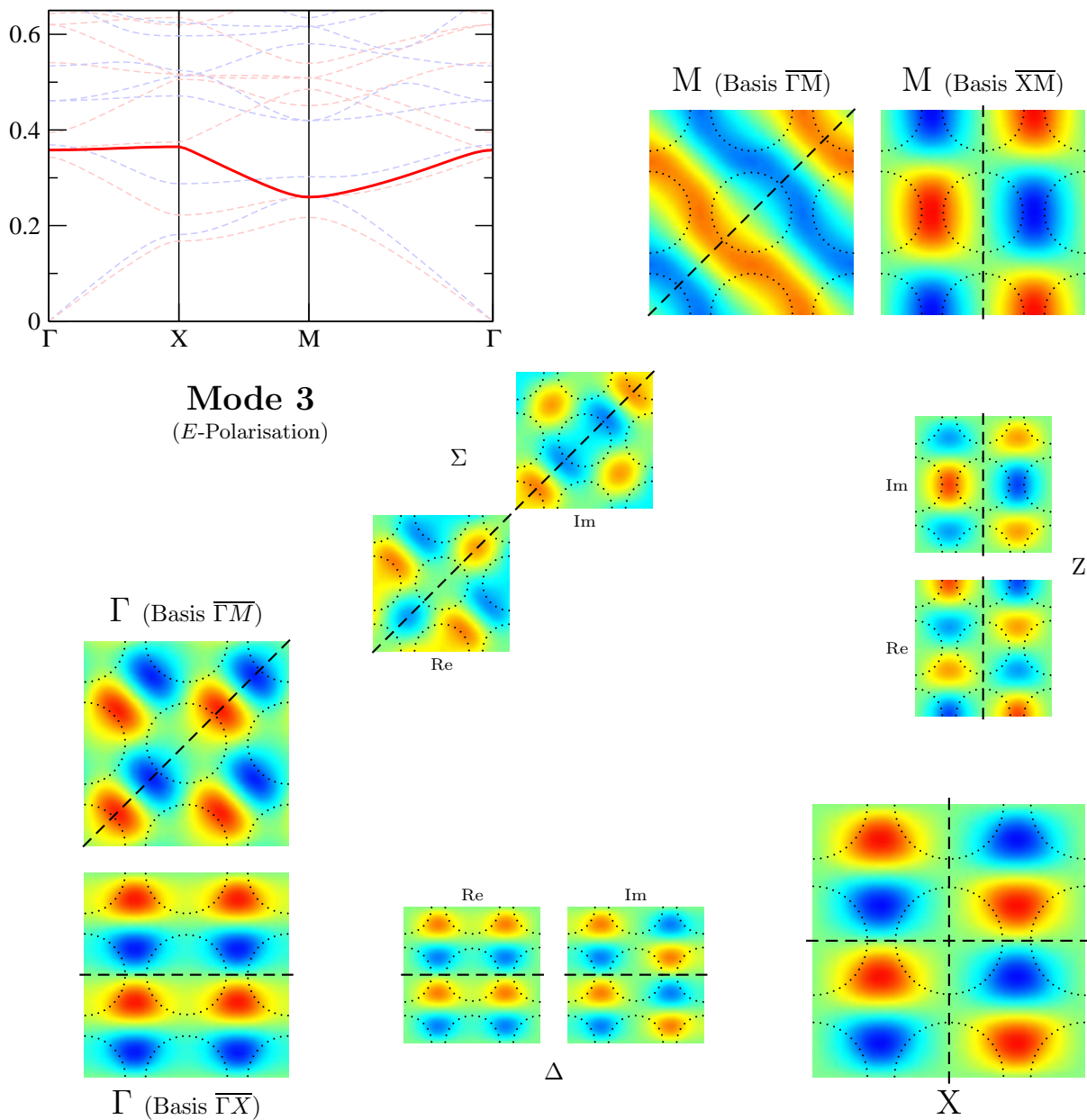


Abbildung 3.7.: Verlauf der 3. Mode der *E*-Polarisation entlang der Symmetrielinien  $\overline{\Gamma X}$ ,  $\overline{XM}$  und  $\overline{\Gamma M}$ . Am  $\Gamma$ -Punkt sind die Moden 3 und 4 entartet. Ebenso besteht am  $M$ -Punkt eine Entartung zwischen den Moden 2 und 3.

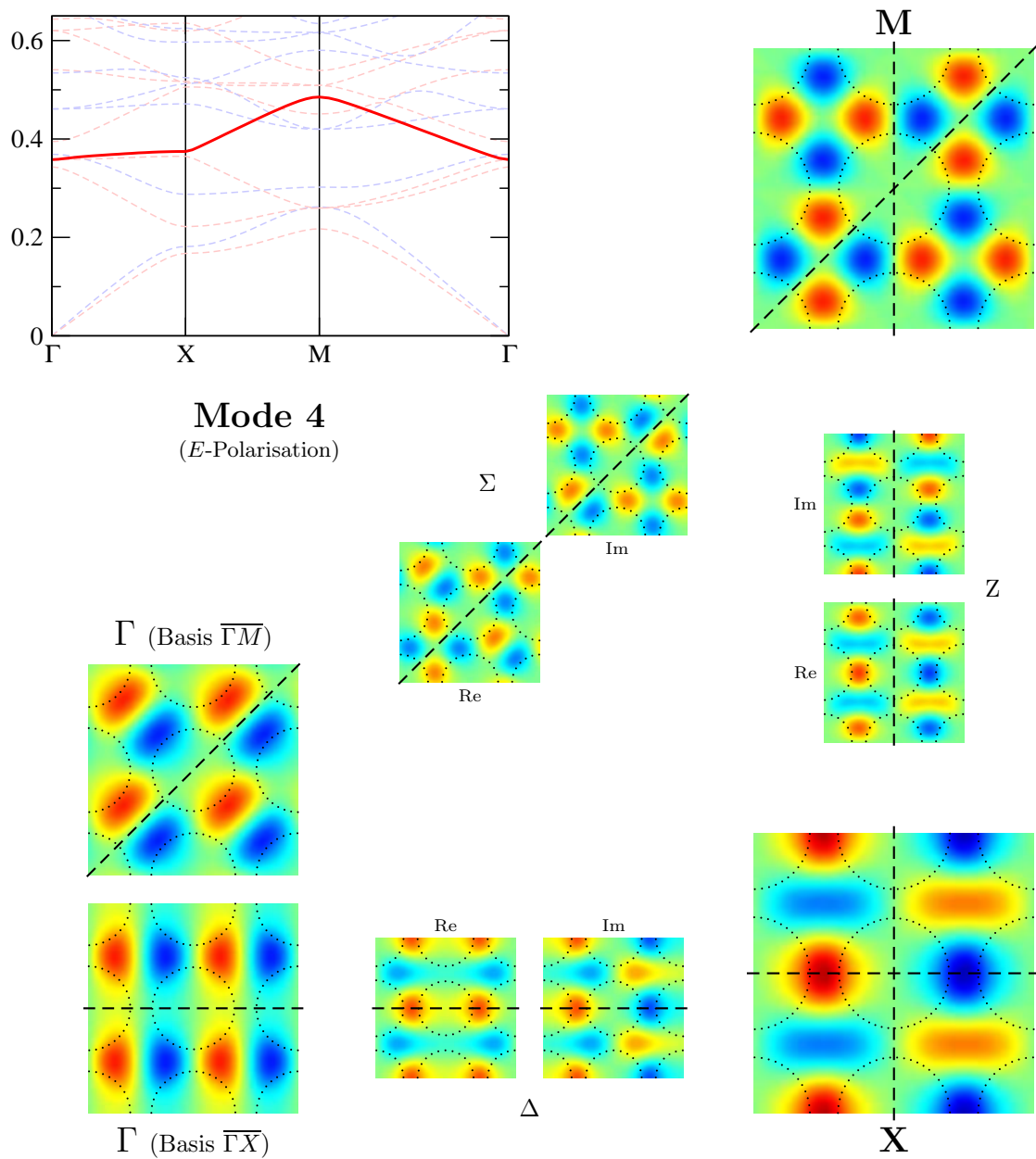


Abbildung 3.8.: Verlauf der 4. Mode der E-Polarisation entlang der Symmetrielinien  $\overline{\Gamma X}$ ,  $\overline{XM}$  und  $\overline{\Gamma M}$ . Am  $\Gamma$ -Punkt sind die Moden 3 und 4 entartet. Die Bänder der 4. und 6. Mode kreuzen sich vor und nach dem M-Punkt.



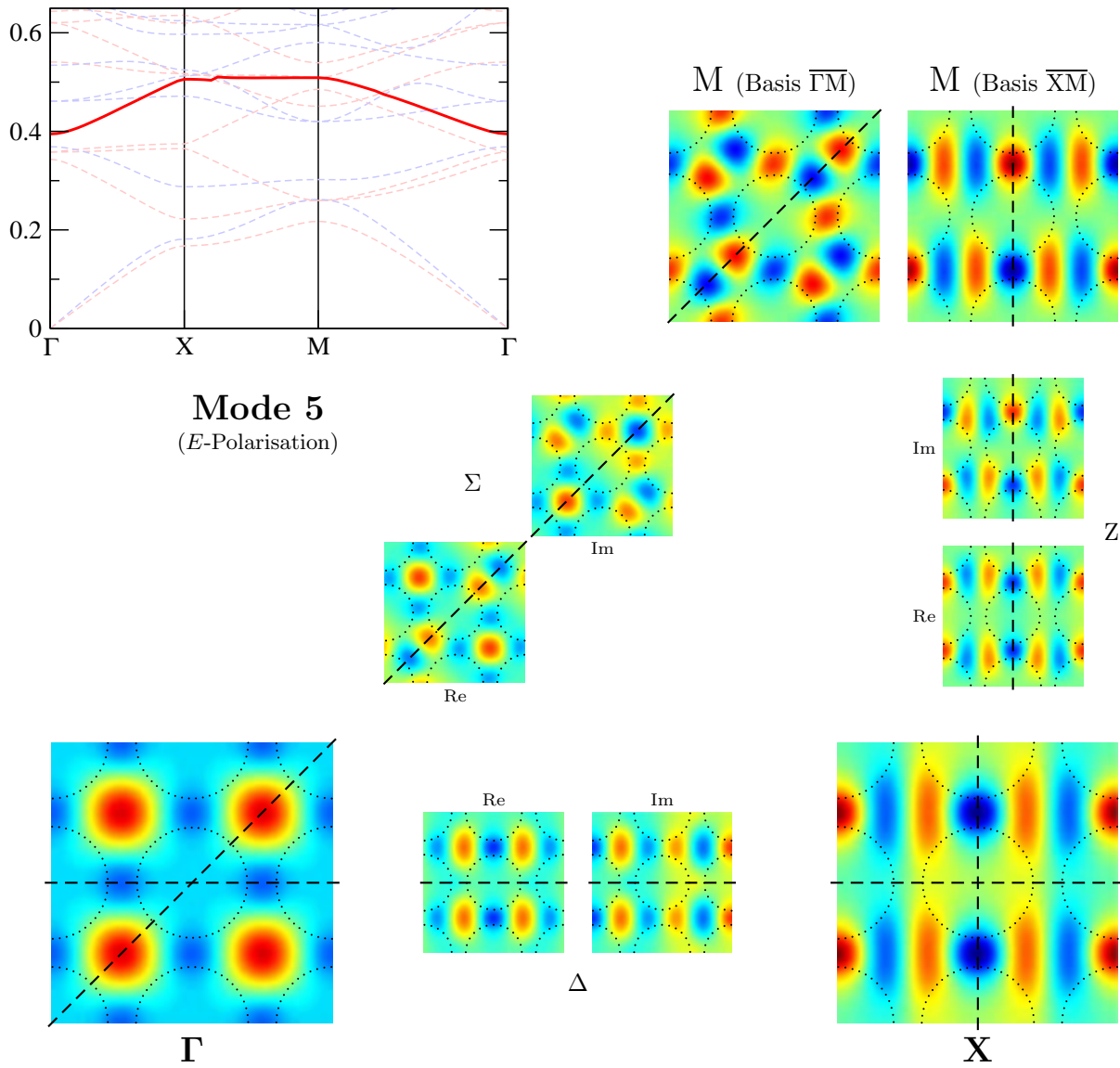


Abbildung 3.9.: Verlauf der 5. Mode der *E*-Polarisation entlang der Symmetrielinien  $\overline{\Gamma X}$ ,  $\overline{X\overline{M}}$  und  $\overline{\Gamma M}$ . Am M-Punkt sind die Moden 5 und 7 entartet. Zwischen X und M geht die Mode 5 vom 5. ins 6. Band über.

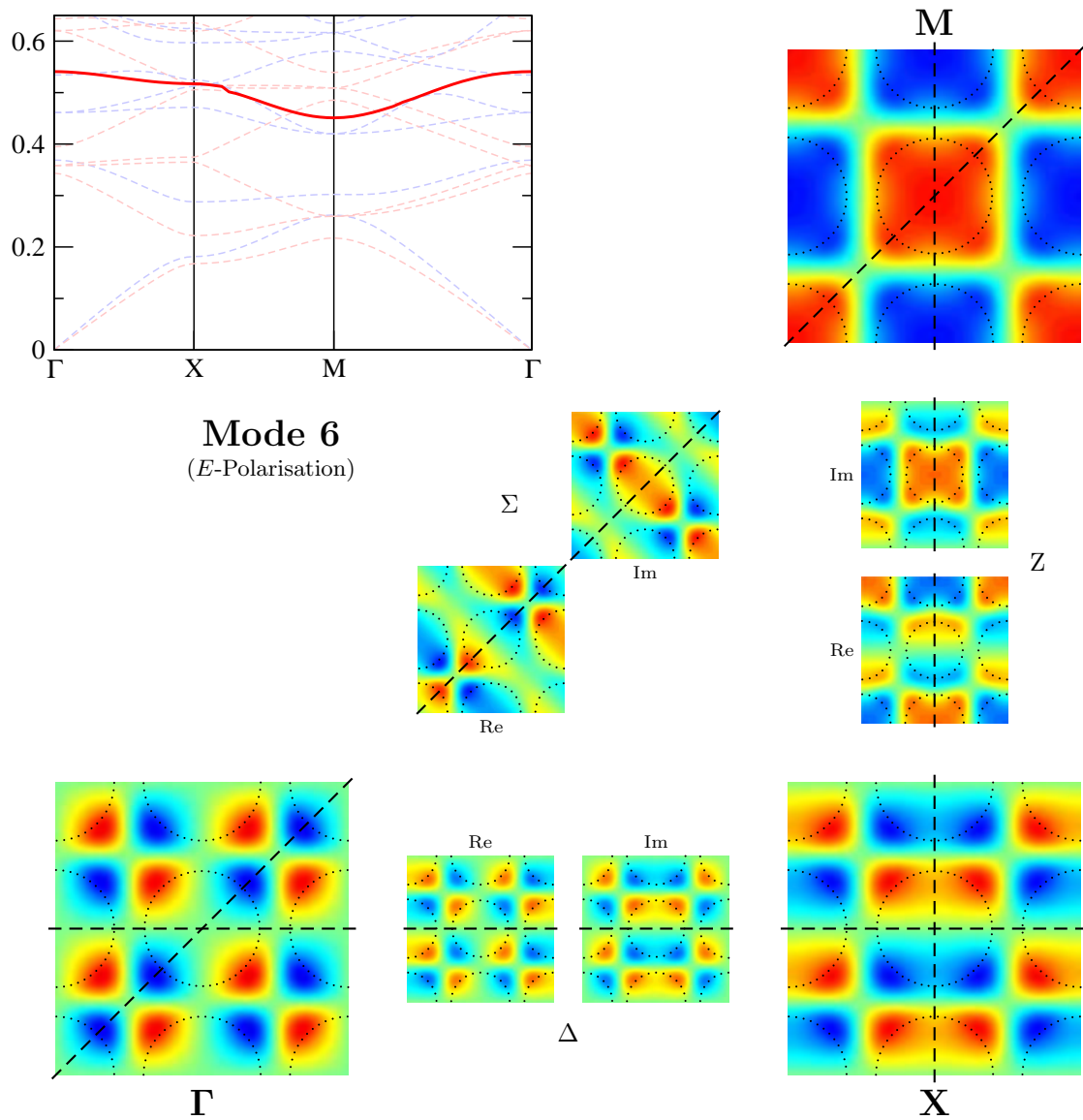


Abbildung 3.10.: Verlauf der 6. Mode der E-Polarisation entlang der Symmetrielinien  $\overline{\Gamma X}$ ,  $\overline{XM}$  und  $\overline{\Gamma M}$ . Zwischen X und M geht die Mode 6 vom 6. ins 5. Band über. Vor und nach dem M-Punkt kreuzen sich die Moden 4 und 6.

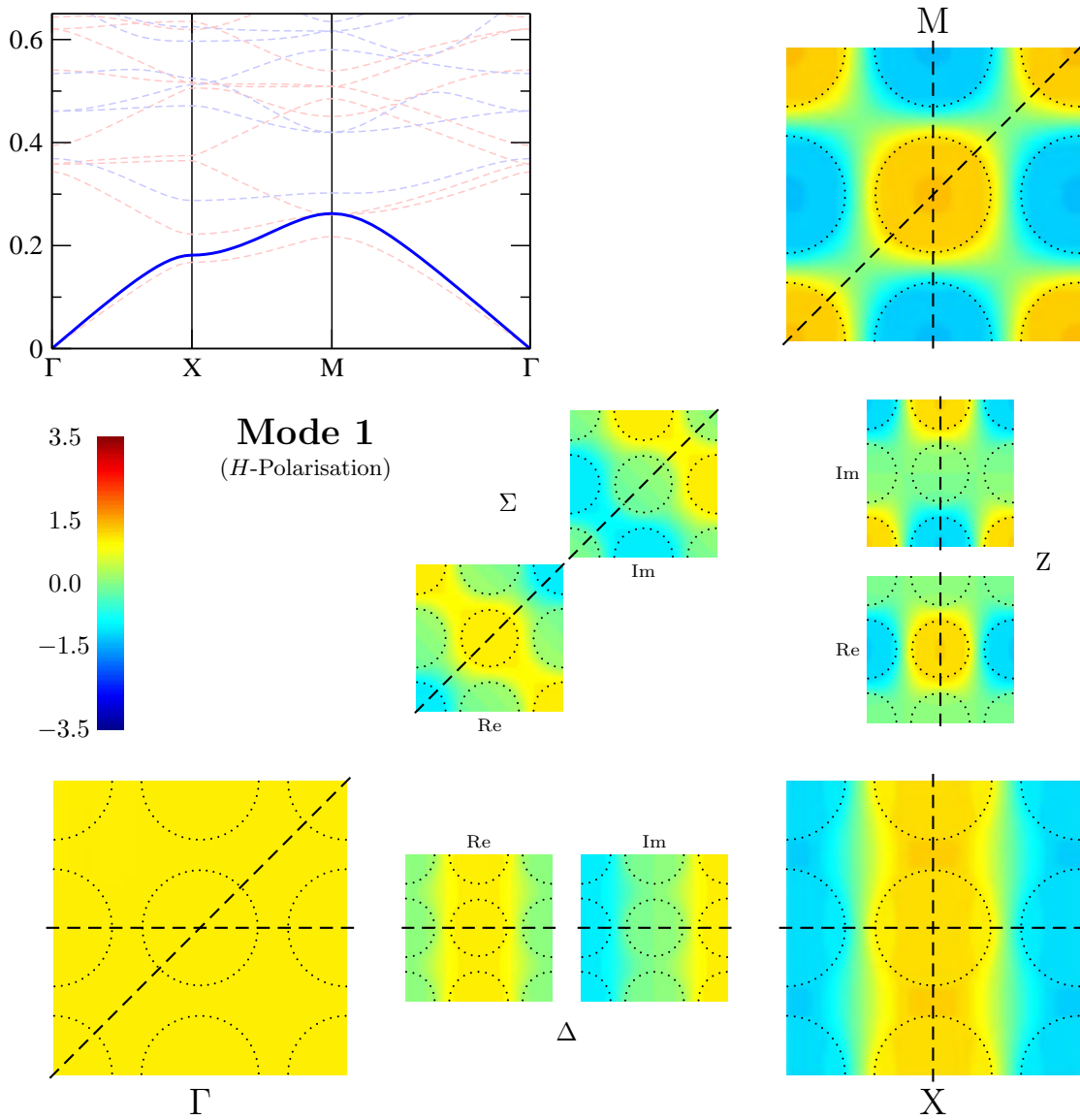


Abbildung 3.11.: Verlauf der 1. Mode der H-Polarisation entlang der Symmetrielinien  $\overline{\Gamma X}$ ,  $\overline{XM}$  und  $\overline{\Gamma M}$ .

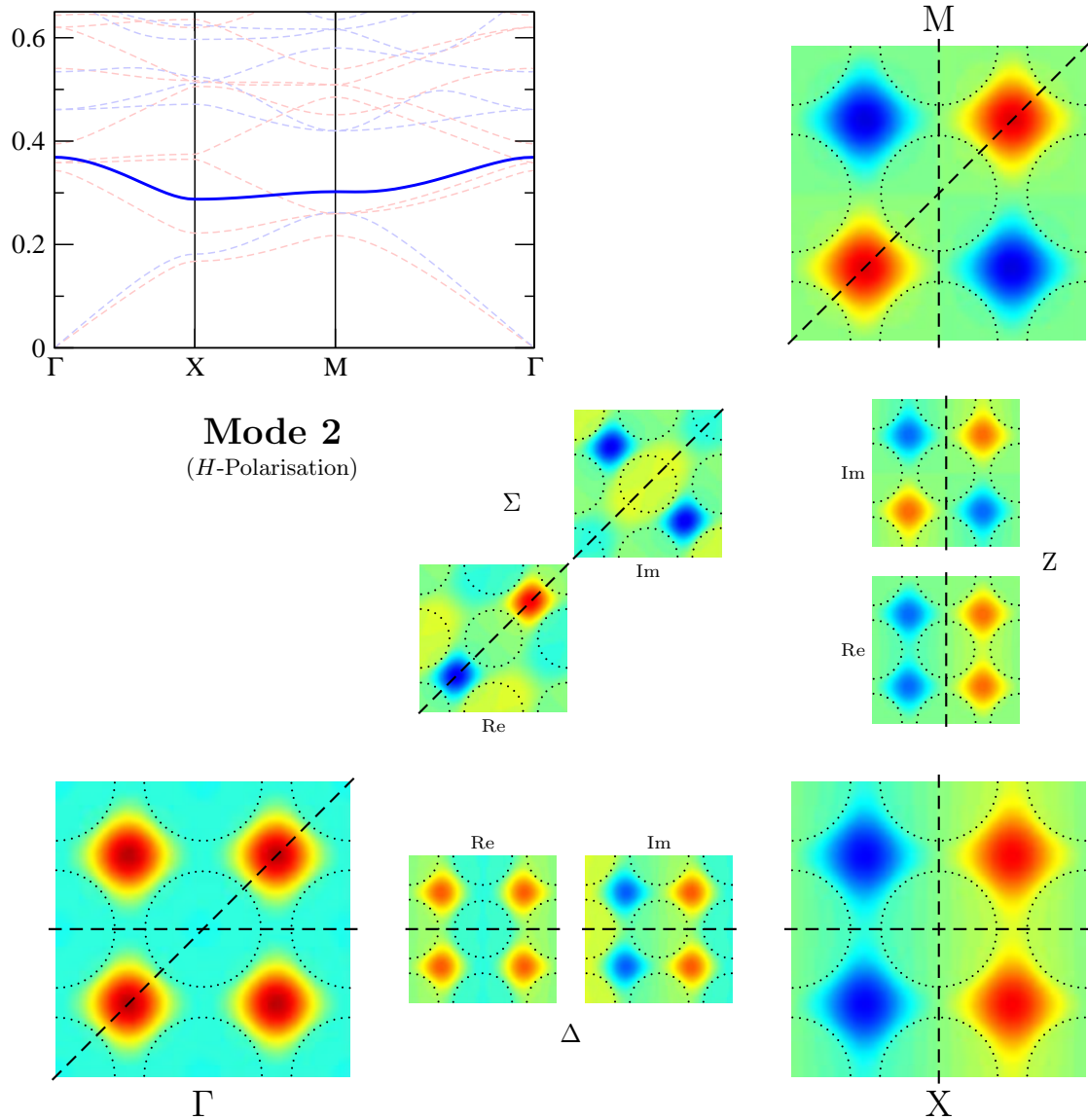


Abbildung 3.12.: Verlauf der 2. Mode der H-Polarisation entlang der Symmetrielinien  $\overline{\Gamma X}$ ,  $\overline{XM}$  und  $\overline{\Gamma M}$ .

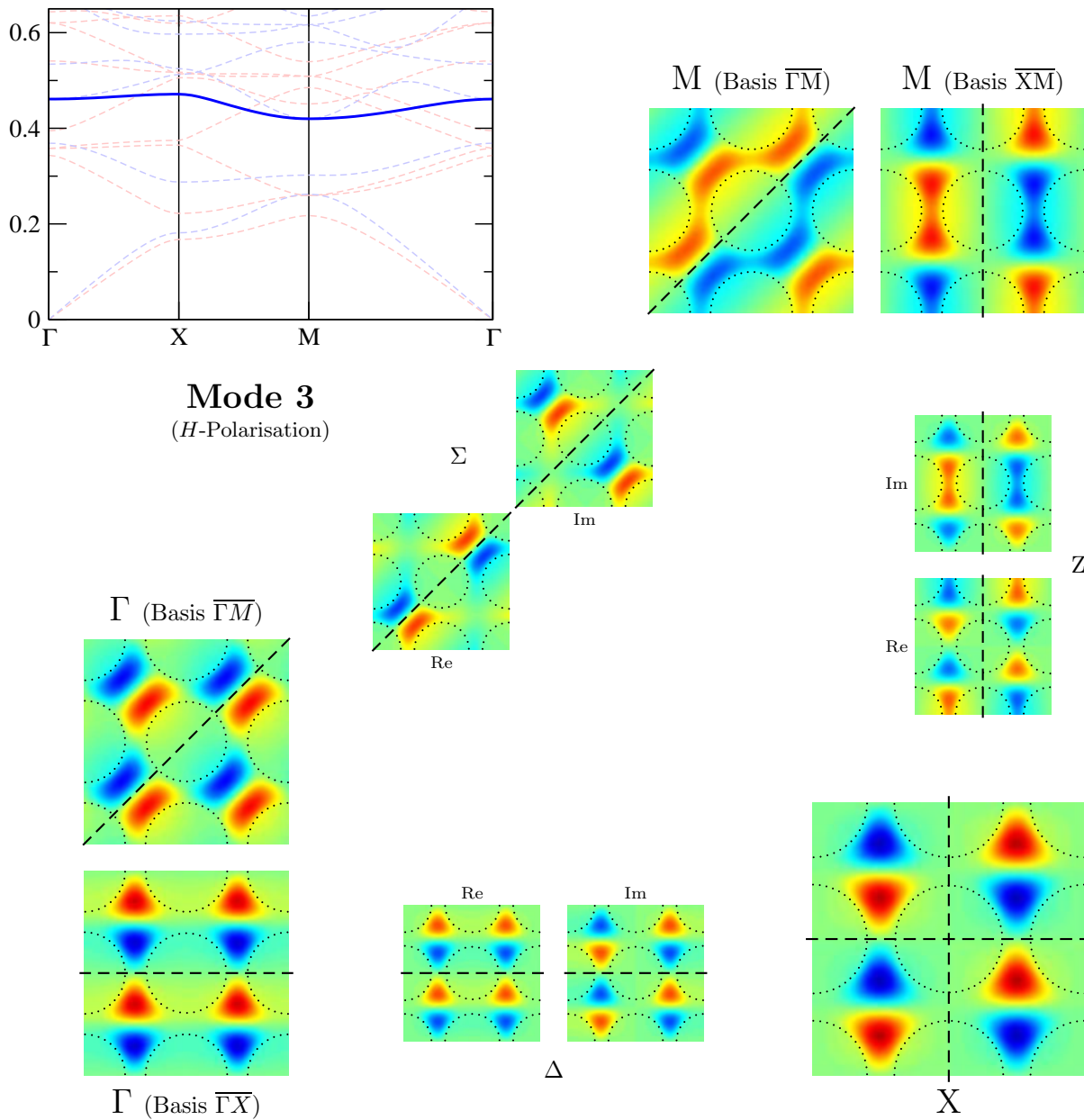


Abbildung 3.13.: Verlauf der 3. Mode der H-Polarisation entlang der Symmetrielinien  $\overline{\Gamma X}$ ,  $\overline{XM}$  und  $\overline{\Gamma M}$ . Am  $\Gamma$ -Punkt und am M-Punkt sind die Moden 3 und 4 entartet.

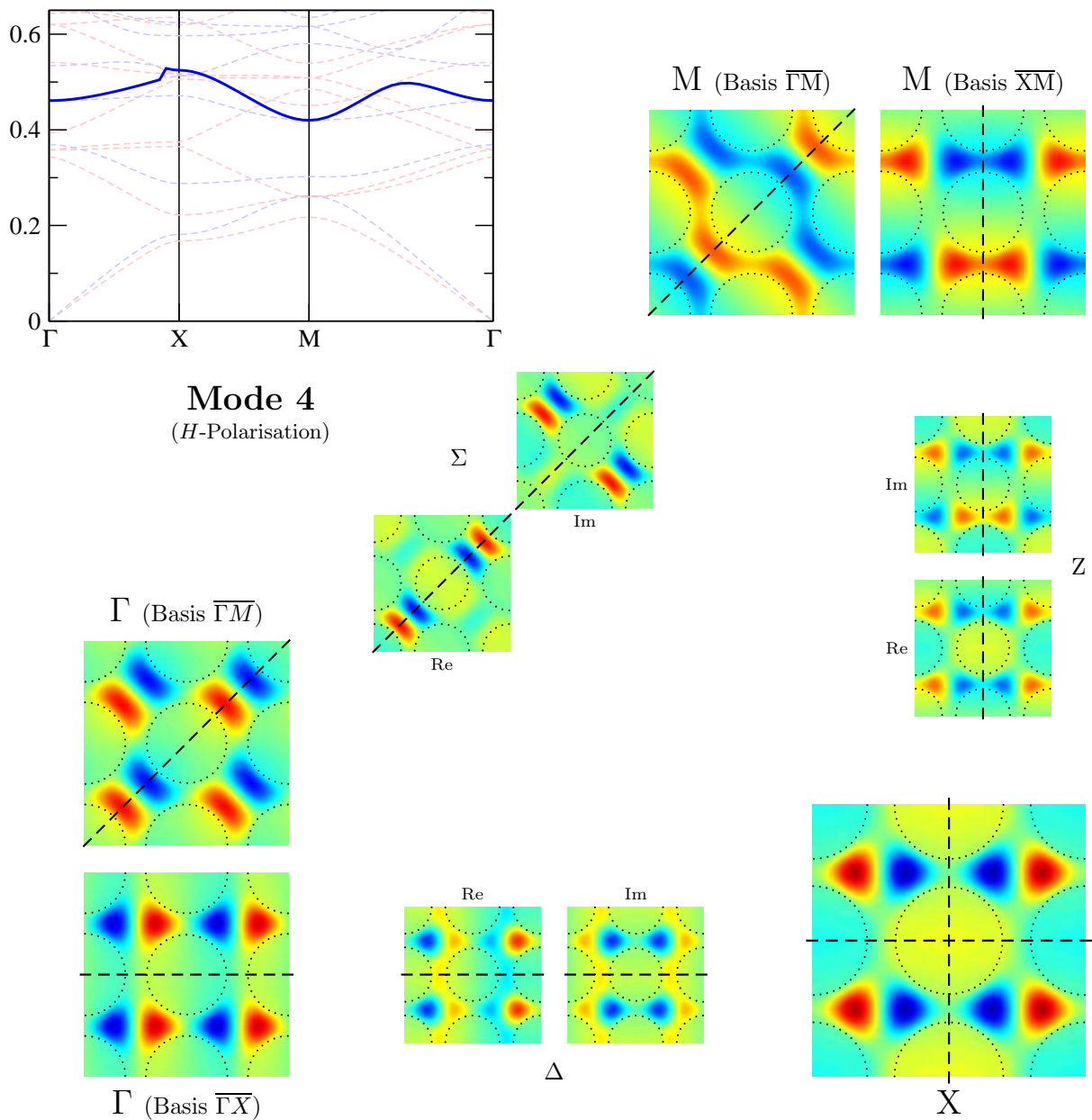


Abbildung 3.14.: Verlauf der 4. Mode der H-Polarisation entlang der Symmetrielinien  $\overline{\Gamma X}$ ,  $\overline{XM}$  und  $\overline{\Gamma M}$ . Am  $\Gamma$ -Punkt und M-Punkt sind die Moden 3 und 4 entartet. Zwischen  $\Gamma$  und X geht die 4. Mode von Band 4 in Band 5 über. Diese beiden Bänder kreuzen sich dann zwischen X und M.

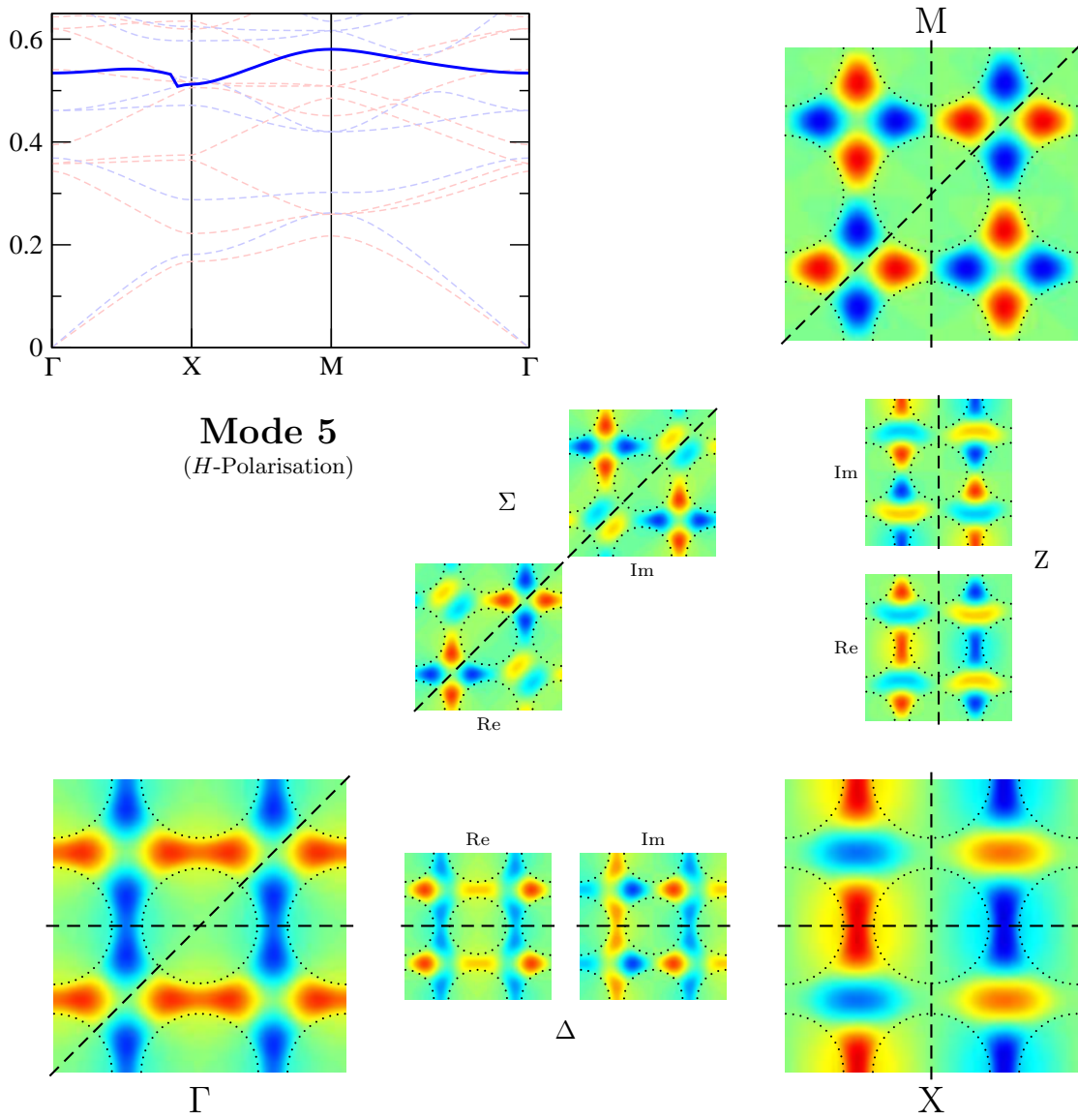


Abbildung 3.15.: Verlauf der 5. Mode der H-Polarisation entlang der Symmetrielinien  $\overline{\Gamma X}$ ,  $\overline{XM}$  und  $\overline{\Gamma M}$ . Zwischen  $\Gamma$  und  $X$  geht die 5. Mode von Band 5 in Band 4 über. Diese Bänder kreuzen sich dann zwischen  $X$  und  $M$ .

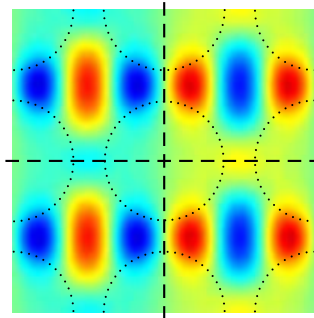


Abbildung 3.16.: Mode des 7. Bandes der E-Polarisation am X-Punkt. Zu sehen ist die Symmetrie bezüglich der Spiegelebene, die die  $\Gamma\bar{X}$ -Richtung und die Zylinderachse  $\hat{z}$  enthält, und die Antisymmetrie bezüglich der  $\hat{y}$ - $\hat{z}$ -Spiegelebene.

### 3.3.3. Kreuzungs- und Abstoßungspunkte

In den Bandstrukturen für die E- und H-Polarisation erscheinen im wesentlichen drei interessante Ausschnitte, wo sich Bänder kreuzen bzw. abstoßen:

1. der Bereich der Bänder 5, 6 und 7 (E-Polarisation) in der Nähe des X-Punktes, dargestellt in Abbildung 3.17, wo sich Band 6 und 7 kreuzen und sich die Bänder 5 und 6 abstoßen,
2. der Bereich der Bänder 5 und 6 (E-Polarisation) zwischen M und  $\Gamma$ , dargestellt in Abbildung 3.18, wo sich diese beiden Bänder abstoßen,
3. die Bänder 4 und 5 (H-Polarisation) um den X-Punkt, dargestellt in Abbildung 3.19, wo diese beiden Bänder zunächst zwischen  $\Gamma$  und X miteinander interagieren und sich dann zwischen X und M kreuzen.

Geplottet ist in den Abbildungen der Absolutbetrag des Feldes, der die Struktur der Moden wiedergibt.<sup>2</sup> Da in dieser Auftragung nicht dargestellt werden kann, ob die betreffenden Moden symmetrisch oder antisymmetrisch bezüglich einer Symmetrieebene sind, wurden die Bänder in den ebenfalls in den Abbildungen gezeigten Bandstrukturausschnitten entsprechend farbig gekennzeichnet.

**Ausschnitt 1 (E-Polarisation nahe X-Punkt):** In Abbildung 3.17 ist zunächst zu sehen, daß sich das 6. und 7. Band kreuzen, ohne daß sich die Feldverteilung der Mode des 7. Bandes dadurch nachhaltig verändert. Die Bänder beeinflussen sich gegenseitig überhaupt nicht. Dieses Verhalten kann auch an anderen Kreuzungspunkten in der

<sup>2</sup>Das (zwischen den Symmetriepunkten) komplexe Feld selbst läßt sich nur sehr schwer übersichtlich darstellen.



Bandstruktur, so z.B. an den Kreuzungspunkten der Bänder 4 und 5 vor und nach dem M-Punkt, beobachtet werden.

Andererseits stellen wir in Abb. 3.17 fest, daß sich die Bänder 5 und 6 gegenseitig abstoßen. Zu sehen ist aber auch, daß die Moden bei diesem Abstoßungsprozeß stark verändert werden. Es erscheint so, als würde ein *Austausch von Modeninformation* stattfinden. Die Mode des 5. Bandes links des Abstoßungspunktes gleicht der Mode des 6. Bandes rechts des Abstoßungspunktes, ebenso umgekehrt.

**Ausschnitt 2 (E-Polarisation zwischen M und  $\Gamma$ ):** Ein ähnliches Verhalten ist in Abbildung 3.18 zu beobachten, wo sich die Bänder 5 und 6 zwischen den Symmetriepunkten M und  $\Gamma$  abstoßen. Auch hier findet ein Informationsaustausch zwischen den Bändern statt. In diesem Fall ist die eine beteiligte Mode (linker oberer bzw. rechter unterer Plot) eine größtenteils dielektrische Mode (d.h. der Hauptanteil der Intensität befindet sich im Dielektrikum zwischen den Zylindern) während die andere Mode (linker unterer bzw. rechter oberer Plot) größtenteils eine Luftmode ist (d.h. die Intensität ist hauptsächlich lokalisiert in den Luftzylindern).

**Ausschnitt 3 (H-Polarisation um den X-Punkt):** Auch in Abbildung 3.19 ist die Entwicklung der beiden Bänder qualitativ dieselbe. Zwischen  $\Gamma$ -Punkt und X-Punkt findet zunächst ein Austausch von Modeninformation zwischen Band 4 und 5 statt. In diesem Fall sind allerdings die Bänder frequenzmäßig recht weit voneinander entfernt, so daß man hier nicht unbedingt von Abstoßung sprechen kann. Interessant ist aber, daß sich dieselben Bänder dann zwischen X-Punkt und M-Punkt ungestört kreuzen.

In diesem Beispiel finden wir außerdem, daß die Bänder 4 und 5 der H-Polarisation nicht im gleichen Punkt enden, in dem sie beginnen. Die Numerierung ist daher gar nicht eindeutig, da sie davon abhängt, ob wir die Bandstruktur entlang der Linie  $\Gamma$ -X-M- $\Gamma$  oder entlang  $\Gamma$ -M-X- $\Gamma$  auftragen.

### Gruppentheoretische Erklärung

Das unterschiedliche Verhalten, daß sich einerseits Bänder abstoßen und dabei Modeninformation austauschen und daß sich andererseits Bänder kreuzen, ohne sich zu beeinflussen, kann dadurch erklärt werden, daß die betroffenen Moden entweder gleiche *Symmetrie* bezüglich der von der Position in der Brillouinzone abhängigen Symmetrieebene  $\mathcal{S}_\sigma$  (s. Abschn. 3.3.2, Abb. 3.4(b)) oder aber gerade entgegengesetzte Symmetrie haben. Die Moden gehören entweder zur gleichen oder zu unterschiedlichen *irreduziblen Darstellungen* der entsprechenden Symmetriegruppe. Auf den Symmetrielinien  $\overline{\Gamma X}$ ,  $\overline{XM}$  und  $\overline{M\Gamma}$ , wo die Kreuzungs- und Abstoßungspunkte auftreten, ist dies die Gruppe  $\mathcal{C}_{1h}$ , die zwei eindimensionale Darstellungen  $A$  und  $B$  besitzt, welche symmetrischen bzw. antisymmetrischen Moden bezüglich  $\mathcal{S}_\sigma$  entsprechen.

Dies erklärt nun zunächst, warum sich Moden gleicher Symmetrie (zur gleichen irreduziblen Darstellung gehörend) nicht kreuzen können, denn am Kreuzungspunkt

würde eine Entartung auftreten, die aber bei eindimensionaler irreduzibler Darstellung nicht auftreten darf. Andererseits können jedoch die Moden beliebig miteinander interagieren, da sich dadurch die Zugehörigkeit zur irreduziblen Darstellung nicht ändert.

Moden unterschiedlicher Symmetrie können dagegen keine Modeninformation austauschen, da die Symmetrie beider Moden dadurch verlorengehe. Die Moden können sich jedoch ohne Probleme kreuzen, da am Kreuzungspunkt zwar eine Entartung vorliegt, die beiden Moden aber zu unterschiedlichen irreduziblen Darstellungen gehören und die Entartung deshalb gruppentheoretisch nicht verboten ist.

In den oben diskutierten Ausschnitten der Bandstruktur wird der Einfluß der Symmetrie auf das Verhalten der Bänder an Kreuzungs- und Abstoßungspunkten bestätigt. Da in den Abbildungen 3.17, 3.18 und 3.19, die die Modenentwicklung in den Ausschnitten zeigen, nur der Absolutbetrag des Feldes aufgetragen ist, ist es nicht möglich, hier symmetrische und antisymmetrische Moden zu unterscheiden, jedoch können wir dazu die entsprechenden Ausschnitte in den Bändern der Modenstruktur (Abbildungen 3.9, 3.10 und 3.16 zur E-Polarisation und Abbildungen 3.14 und 3.15 zur H-Polarisation) heranziehen.

In Ausschnitt 1 (Abb. 3.17) in der Nähe des X-Punktes ist die Mode in Band 7 antisymmetrisch bezüglich der erwähnten  $\hat{y}$ - $\hat{z}$ -Spiegelebene während die beiden anderen Moden zu Band 5 und 6 bezüglich dieser Ebene symmetrisch sind. Daher kreuzen sich Band 6 und 7, während sich Band 5 und 6 abstoßen und Modeninformation austauschen.

Die Moden der Bänder 5 und 6 im Ausschnitt 2 (Abb. 3.18) zwischen M und  $\Gamma$  haben ebenso gleiche Symmetrie bezüglich der relevanten Spiegelebene, hier die durch die  $\vec{k}$ -Richtung und die  $\hat{z}$ -Achse gegebene Spiegelebene. Sie sind beide symmetrisch bezüglich dieser. Daher stoßen sich die beiden Bänder unter Austausch der Moden ab.

In Ausschnitt 3 (Abb. 3.19) wird besonders deutlich, daß die Symmetrien eine entscheidende Rolle spielen. Die beiden Bänder haben zwischen  $\Gamma$  und X gleiche Symmetrie bezüglich der  $\Gamma$ -X-Richtung und interagieren daher sehr stark, obwohl der Abstand der Bänder recht groß ist. Zwischen X und M sind dagegen die Symmetrien bezüglich der  $\hat{y}$ - $\hat{z}$ -Spiegelebene gerade entgegengesetzt, was dazu führt, daß sich die Bänder ungestört kreuzen können.

Der Widerspruch, daß die Bänder im Ausschnitt 3 nicht im selben Punkt enden, in dem sie starten, löst sich dann auf, wenn wir den Verlauf der Moden anstelle der Bänder betrachten, also die Möglichkeit der Übertragung von Modeninformation zwischen Bändern mitberücksichtigen. Die Mode des 4. Bandes geht zwischen  $\Gamma$  und X ins 5. Band der Bandstruktur über, welches im weiteren Verlauf wieder dort endet, wo das 4. Band begonnen hat. Das umgekehrte gilt für den Verlauf der 5. Mode (s. auch die Abbildungen 3.14 und 3.15).

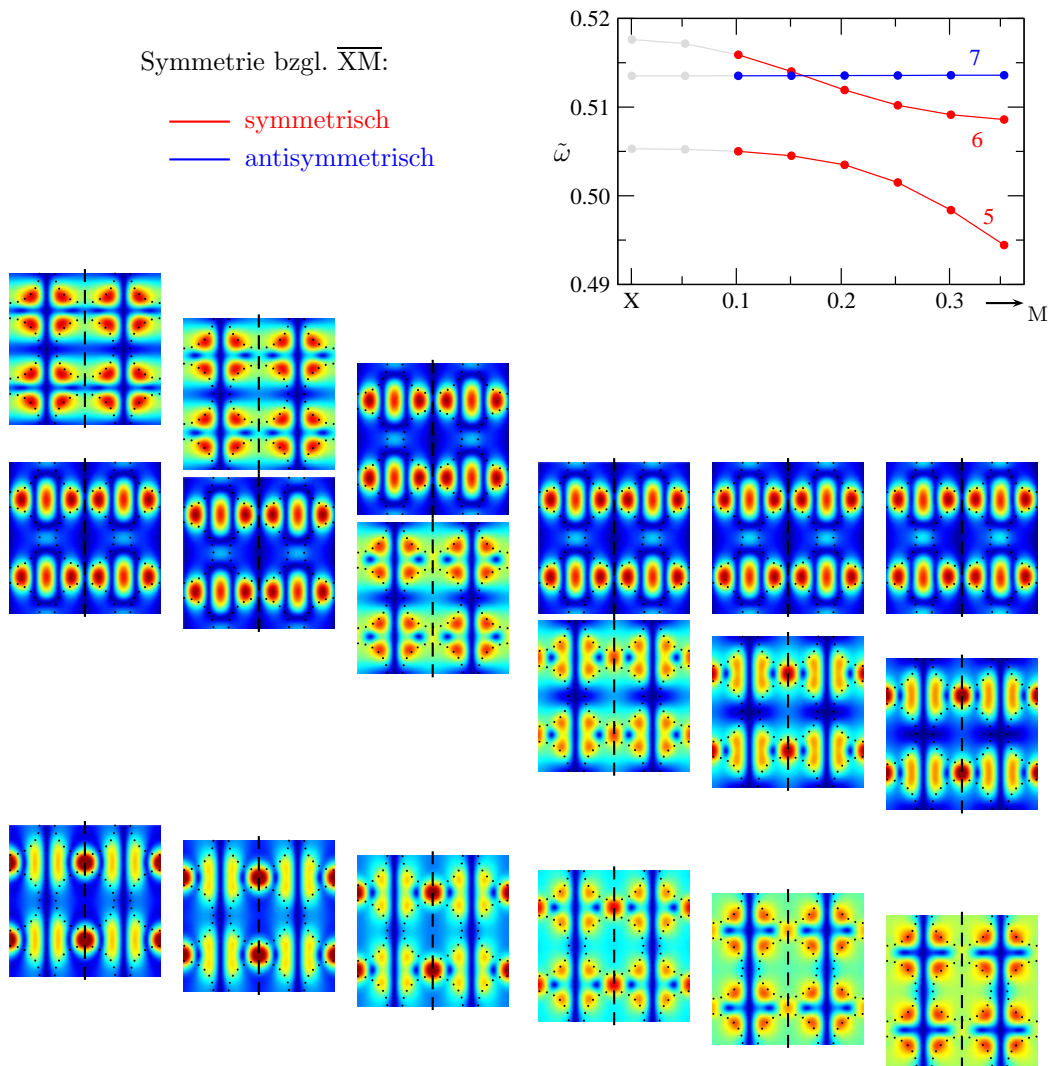


Abbildung 3.17.: Abstoßung des 5. und 6. Bandes nahe des X-Punkts und Kreuzung des 6. und 7. Bandes. Die 5. und 6. Mode tauschen ihre Struktur aus, während die 7. Mode offensichtlich unbeeinflusst bleibt.

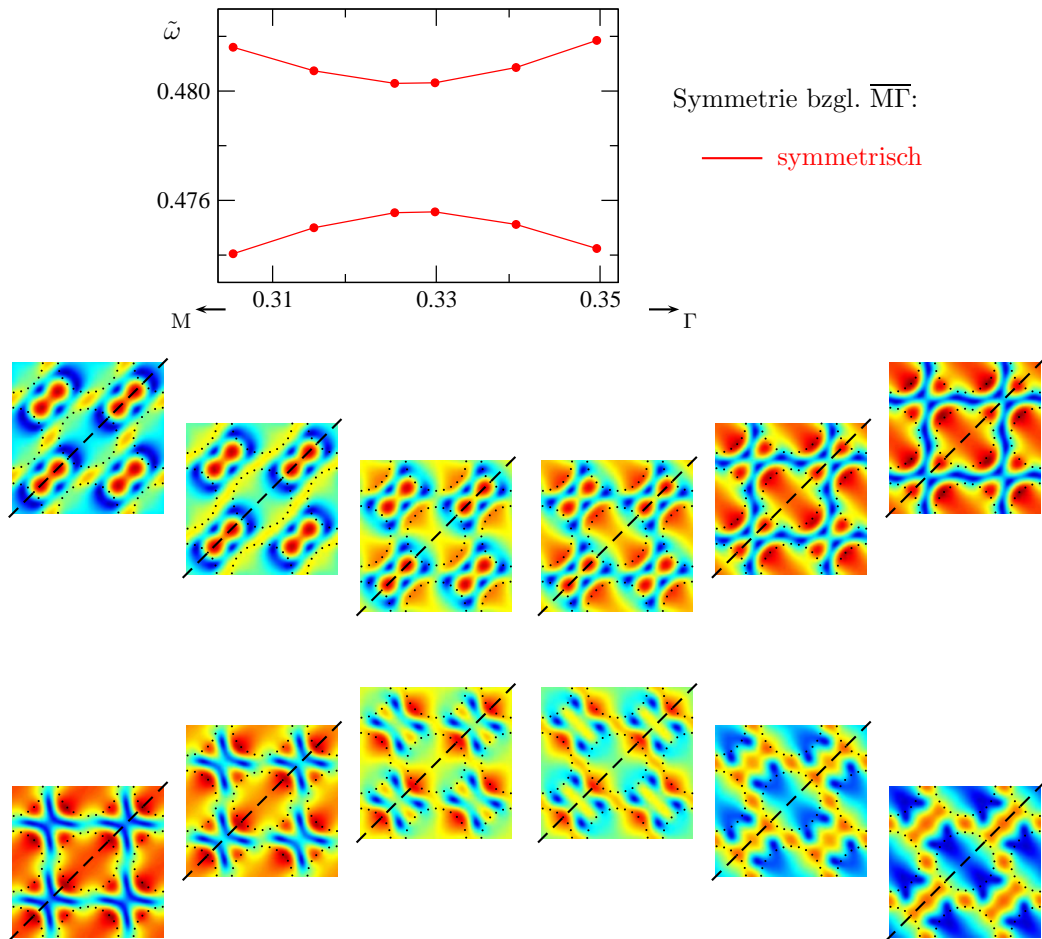


Abbildung 3.18.: Abstoßung des 5. und 6. Bandes zwischen M-Punkt und  $\Gamma$ -Punkt mit Übertragung der Modenstruktur.

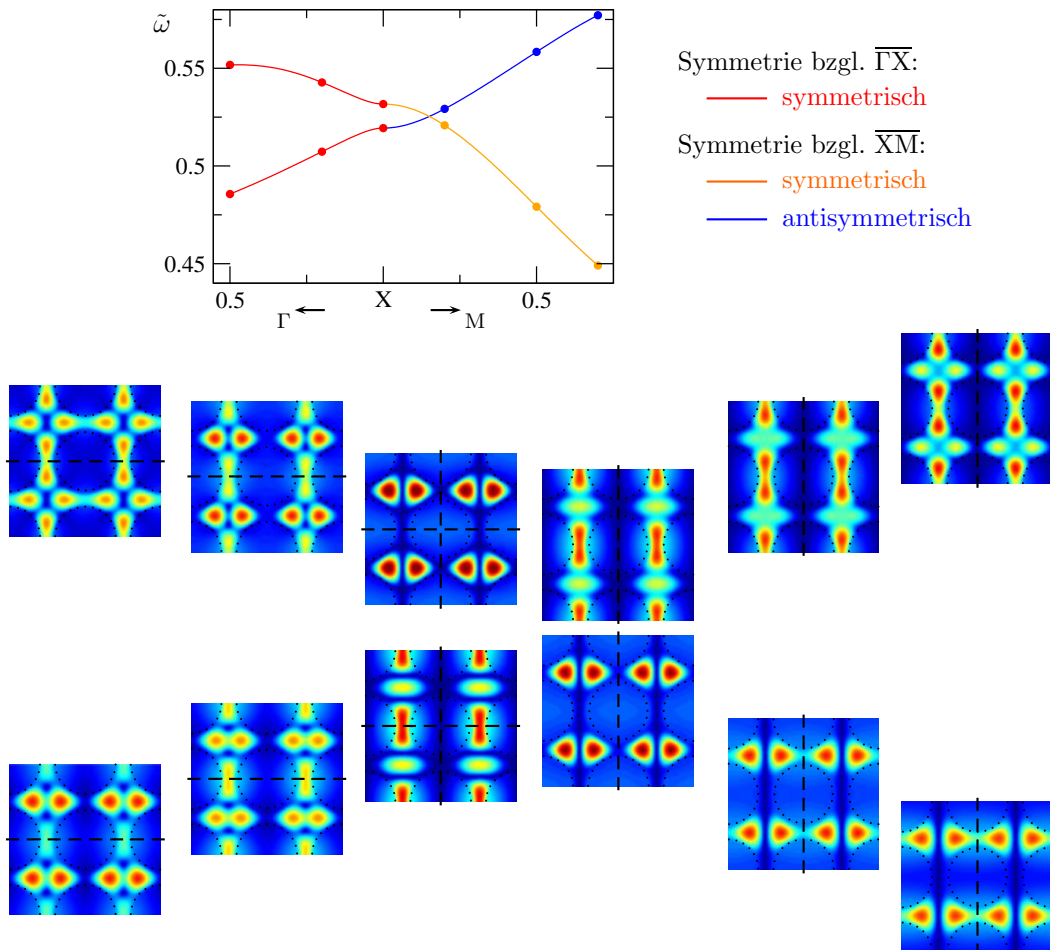


Abbildung 3.19.: Verlauf der 4. und 5. Mode der H-Polarisation um den X-Punkt. Zwischen  $\Gamma$  und X werden zunächst die Moden zwischen den Bändern ausgetauscht. Die Bänder kreuzen sich dann zwischen X und M.

### 3.4. Vergleich mit der Ebene-Wellen-Methode

Wir wollen nun das vorgestellte Mehrgitter-Verfahren mit der Ebene-Wellen-Methode vergleichen. Hierbei soll sowohl die Genauigkeit der Eigenfrequenzen als auch die Rechenzeit berücksichtigt werden.

Die verwendete Ebene-Wellen-Methode geht von der analytisch bekannten Fouriertransformierten der Dielektrizitätskonstanten für die Zylindergeometrie aus [22]. Für andere Geometrien, bei denen die Fouriertransformierte von  $\epsilon(\vec{r})$  analytisch nicht bekannt ist, muß diese stattdessen numerisch durch FFT (engl. *Fast Fourier Transformation*) bestimmt werden, was zu erheblichem Mehraufwand führt. Außerdem werden für den nachfolgenden Vergleich nur die Eigenfrequenzen, nicht aber die Eigenmoden berechnet. Das Mehrgitterverfahren hängt dagegen nicht von einer speziellen Geometrie ab. Zudem werden die Eigenmoden ohne Mehraufwand automatisch mitgeliefert.

In den Tabellen 3.1 (E-Polarisation) und 3.2 (H-Polarisation) sind jeweils die ersten fünf Eigenfrequenzen der Wellengleichung am X-Punkt aufgetragen. Die erste Spalte ( $N$ ) gibt für die Ebene-Wellen-Methode (die ersten vier Zeilen) die Anzahl der verwendeten ebenen Wellen ( $N = 800, 1200, 1600, 2000$ ) bzw. für das Mehrgitter-Verfahren (übrige Zeilen) die Feinheit des feinsten Gitters an ( $N = 64 \times 64, 128 \times 128, 256 \times 256$ ). Die Anzahl der Grobgitter wurde so gewählt, daß das größte Gitter jeweils  $16 \times 16$  Gitterpunkte umfaßte. Es wurden jeweils die ersten acht Eigenfrequenzen berechnet und insgesamt 3 Mehrgitterzyklen durchgeführt. Die weiteren Parameter wurden wie folgt gewählt (s. Algorithmus 2.5, S. 31):

$$\begin{aligned} N_{\text{init}} = 200 \quad N_{\text{pre}} = N_{\text{post}} = 3 \quad N_{\text{base}} = 6 \\ n_{\text{cycles}} = 1 \quad (\text{V-Zyklus}) \end{aligned} \quad (3.6)$$

Zusätzlich zu den Eigenfrequenzen sind für das Mehrgitterverfahren die Residuen

$$r_i = \|\hat{L}u_i\| \quad (3.7)$$

der entsprechenden Eigenmoden und die „exakten“ Eigenfrequenzen angegeben, die durch Ausführen weiterer Mehrgitterzyklen (z.B. 20 Zyklen) berechnet wurden, bis das Residuum aller dargestellten Eigenfrequenzen sehr klein war ( $< 10^{-7}$ ). Diese Werte stellen Vergleichswerte für die innerhalb der Bandstrukturberechnung mit nur 3 Mehrgitterzyklen berechneten Eigenfrequenzen dar, anhand derer sich die Konvergenz ablesen läßt.

Für die unterschiedlich feinen Diskretisierungen konvergiert das Mehrgitterverfahren gegen leicht verschiedene Eigenfrequenzen. Die Unterschiede kommen dadurch zustande, daß der diskretisierte Operator jeweils nur eine Approximation des kontinuierlichen Operators der Wellengleichung darstellt, hauptsächlich auch wegen der ungenauen diskreten Darstellung der Dielektrizitätsfunktion. Dieser Fehler wird als sog. *Abschneidefehler* (engl. *truncation error*) bezeichnet.

In der rechten Spalte sind die Zeiten für eine Bandstrukturrechnung entlang der Symmetrielinien  $\Gamma$ -X-M- $\Gamma$  mit jeweils 9  $k$ -Punkten auf den Symmetrielinien zwischen

$N$	E-Polarisation: Eigenfrequenzen ( $\omega a/2\pi c$ )					CPU
	1	2	3	4	5	
800	0.167655	0.222022	0.365033	0.374691	0.505634	2m 48s
1200	0.167626	0.221973	0.365041	0.374684	0.505617	9m 35s
1600	0.167757	0.222040	0.365011	0.374682	0.505649	20m 27s
2000	0.167746	0.222279	0.365060	0.374694	0.505622	37m 58s
$64 \times 64$	0.167697	0.222095	0.365020	0.374565	0.505378	3m 47s
(exakt)	(0.167695)	(0.222092)	(0.365019)	(0.374556)	(0.505300)	
(Residuum)	(0.00005)	(0.00005)	(0.00006)	(0.00027)	(0.03107)	
$128 \times 128$	0.167705	0.222166	0.365029	0.374888	0.505938	9m 26s
(exakt)	(0.167705)	(0.222169)	(0.365031)	(0.374895)	(0.505900)	
(Residuum)	(0.00002)	(0.00007)	(0.00019)	(0.00066)	(0.02038)	
$256 \times 256$	0.167644	0.222023	0.364933	0.374754	0.505714	33m 01s
(exakt)	(0.167645)	(0.222024)	(0.364934)	(0.374756)	(0.505691)	
(Residuum)	(0.00001)	(0.00005)	(0.00022)	(0.00033)	(0.01169)	
( $512 \times 512$ exakt)	(0.167655)	(0.222012)	(0.365016)	(0.374663)	(0.505612)	

Tabelle 3.1.: Vergleich des Mehrgitter-Verfahrens mit der Ebene-Wellen-Methode für das Modellproblem bei E-Polarisation (Beschreibung s. Text).

den Hochsymmetriepunkten angegeben, wie sie auf einem Pentium 500MHz Prozessor<sup>3</sup> gemessen wurden.

**E-Polarisation:** In Tabelle 3.1 ist zu sehen, daß die angegebenen mit dem Mehrgitter-Verfahren berechneten Eigenfrequenzen im Vergleich zu den „exakten“ Werten schon sehr gut konvergiert sind (vgl. auch die Residuen). Die Unterschiede zwischen den verschiedenen feinen Diskretisierungen liegen im Promille-Bereich (vierte Nachkommastelle). Eine Tendenz (z.B. monoton steigende/fallende Eigenfrequenz hin zu feineren Gittern) ist nicht zu erkennen. Trotzdem kann man sagen, daß schon die  $64 \times 64$  und  $128 \times 128$  Diskretisierungen für die Praxis recht brauchbare Ergebnisse liefern. Die Ebene-Wellen-Methode liefert allerdings hier bessere Werte, wobei jedoch beispielsweise die zweite Eigenfrequenz bei  $N = 2000$  etwas aus dem Rahmen fällt. (vgl. die Werte des Mehrgitterverfahrens für die feinste Diskretisierung  $512 \times 512$ ).

**H-Polarisation:** Hier ist der Effekt des Abschneidefehlers in Tabelle 3.2 deutlich stärker erkennbar. Zwar konvergieren auch hier die Eigenfrequenzen sehr gut gegen den „exakten“ Wert zur jeweiligen Diskretisierung, jedoch unterscheiden sich diese „exakten“ Werte doch beträchtlich von Diskretisierung zu Diskretisierung. Der Unterschied liegt im Prozentbereich. In der H-Polarisation kommt vermutlich vor allem

---

<sup>3</sup>Compiler: g77/gcc 2.95.2 (Ebene-Wellen-Methode: g77; Mehrgitter-Verfahren: gcc/g++); Optimierung -O

$N$	H-Polarisation: Eigenfrequenzen ( $\omega a/2\pi c$ )					CPU
	1	2	3	4	5	
800	0.180428	0.285964	0.468638	0.508023	0.522324	2m 47s
1200	0.180538	0.286097	0.468856	0.508391	0.522398	9m 33s
1600	0.180465	0.286104	0.468910	0.508540	0.522406	20m 16s
2000	0.180493	0.286116	0.469023	0.508661	0.522406	38m 03s
$64 \times 64$ (exakt)	0.183671 (0.183667)	0.291700 (0.291700)	0.477967 (0.477967)	0.519390 (0.519390)	0.531692 (0.531690)	4m 13s
(Residuum)	(0.00026)	(0.00021)	(0.00074)	(0.00162)	(0.00006)	
$128 \times 128$ (exakt)	0.182267 (0.182265)	0.289092 (0.289091)	0.473736 (0.473736)	0.515291 (0.51529)	0.527106 (0.527105)	10m 46s
(Residuum)	(0.00016)	(0.00034)	(0.00040)	(0.00244)	(0.00005)	
$256 \times 256$ (exakt)	0.181382 (0.181381)	0.287667 (0.287667)	0.471446 (0.471446)	0.512477 (0.512477)	0.524592 (0.524591)	40m 03s
(Residuum)	(0.00037)	(0.00064)	(0.00039)	(0.01009)	(0.00041)	
( $512 \times 512$ exakt)	(0.180973)	(0.287210)	(0.470659)	(0.511135)	(0.523724)	

Tabelle 3.2.: Vergleich des Mehrgitter-Verfahrens mit der Ebene-Wellen-Methode für das Modellproblem bei H-Polarisation (Beschreibung s. Text).

die Ungenauigkeit der Dielektrizitätsfunktion stärker zum Tragen, da auch Ableitungen derselben im Operator auftauchen.

Letztendlich können diese Nachteile des Mehrgitterverfahrens nur durch verbesserte Diskretisierungsverfahren (adaptive Gitter, Finite Elemente, s. Abschnitt 2.6) eliminiert werden.

**Rechenzeiten:** Die verschiedenen Diskretisierungen und die Anzahl der Ebenen Wellen wurden in den Tabellen jeweils so gewählt, daß die resultierenden Zeiten der Ebene-Wellen-Methode bzw. des Mehrgitter-Verfahrens miteinander vergleichbar waren. Die Zeiten des Mehrgitter-Verfahrens hängen natürlich stark davon ab, wie schnell das Verfahren für das gewählte Problem und die jeweilige Parameterkonfiguration konvergiert. Beispielsweise sind für das inverse Problem (dielektrische Zylinder in Luft) nur 2 (statt 3) Mehrgitterzyklen pro  $k$ -Wert notwendig, was die Rechenzeit natürlich verkürzt. Verbesserungen des Verfahrens, die bestimmt beträchtliche Einsparungen von Rechenzeit bringen, sind beispielsweise die Einführung einer automatischen Konvergenzkontrolle, so daß nicht für jede Eigenmode immer die volle Anzahl an Iterationsschritten durchgeführt werden muß, bzw. daß bereits ausreichend konvergierte Eigenmoden nicht mehr weiter durch Mehrgitterzyklen verbessert werden (s. Abschnitt 2.6).

Es sei nochmals darauf hingewiesen, daß die Rechenzeiten der Ebene-Wellen-Methode lediglich für die Berechnung der Eigenfrequenzen, nicht aber der Eigenmoden gemessen wurden, während das Mehrgitterverfahren die Eigenmoden automatisch mitliefert.



# 4. Photonische Kristalle mit dispersiven Komponenten

## 4.1. Frequenzabhängige Dielektrizitätsfunktion

Bisher sind wir immer davon ausgegangen, daß die Dielektrizitätskonstante der im betrachteten Photonischen Kristall beteiligten Materialien frequenzunabhängig ist. In vielen Materialien hat diese jedoch in bestimmten Frequenzbereichen eine starke Frequenzabhängigkeit und ist im allgemeinen komplex:

$$\epsilon(\omega) = \epsilon'(\omega) + i\epsilon''(\omega) . \quad (4.1)$$

Ein nichtverschwindender Imaginärteil beschreibt Absorption<sup>1</sup> im Kristall. Real- und Imaginärteil  $\epsilon'(\omega)$  bzw.  $\epsilon''(\omega)$  sind hier nicht unabhängig voneinander, sondern über die *Kramers-Kronig-Relationen* miteinander verknüpft [23]:

$$\epsilon'(\omega) - 1 = \frac{2}{\pi} \mathcal{P} \int_0^\infty d\omega' \frac{\omega' \epsilon''(\omega')}{\omega'^2 - \omega^2} \quad (4.2)$$

$$\epsilon''(\omega) = -\frac{2\omega}{\pi} \mathcal{P} \int_0^\infty d\omega' \frac{\epsilon'(\omega') - 1}{\omega'^2 - \omega^2} . \quad (4.3)$$

Falls der dispersive Anteil  $\epsilon'(\omega)$  der Dielektrizitätsfunktion in einem beliebigen Frequenzbereich frequenzabhängig ist, folgt daraus automatisch, daß auch Absorption für gewisse Frequenzbereiche auftritt ( $\epsilon''(\omega) \neq 0$ ). Oft kann diese für die Betrachtungen aber vernachlässigt werden.

Eine frequenzabhängige Dielektrizitätsfunktion führt dazu, daß in der Wellengleichung

$$\frac{1}{\epsilon(\vec{r}, \omega)} \nabla \times \nabla \times \vec{E}(\vec{r}) - \frac{\omega^2}{c^2} \vec{E}(\vec{r}) = 0 \quad (4.4)$$

die Frequenz nicht nur im Eigenwert  $\omega^2/c^2$  vorkommt, sondern auch im Operator. Der Operator hängt also selbst vom Eigenwert ab. Aus dem Eigenwertproblem wird ein *Fixpunktproblem*. Wir müssen aus den Eigenlösungen einer Schar von Operatoren (parametrisiert durch die Frequenz) diejenigen Lösungen herausuchen, für die die Frequenz im Eigenwert übereinstimmt mit der Frequenz im Operator.

<sup>1</sup>Je nach Vorzeichen von  $\epsilon''(\omega)$  kann der Imaginärteil auch Verstärkung beschreiben.

Für ein solches Fixpunktproblem versagt die Ebene-Wellen-Methode, da diese die Wellengleichung im allgemeinen nicht mehr auf ein einfach lösbares Standard-Eigenwertproblem im  $\vec{k}$ -Raum transformiert. Nur noch in Spezialfällen [7] ist es möglich, ein Standard-Eigenwertproblem oder wenigstens ein verallgemeinertes Eigenwertproblem herzuleiten.

Im Rahmen der Mehrgittermethode (Kapitel 2) könnte man versuchen, bei den iterativen Aktualisierungen der Frequenz auch die Dielektrizitätsfunktion iterativ anzupassen. Es ist allerdings unklar, ob eine solche Erweiterung des Verfahrens ausreichend konvergiert, da mit jeder Aktualisierung der Dielektrizitätsfunktion der Operator der Wellengleichung unter Umständen stark verändert wird und sich so auch dessen Eigenwertspektrum stark verschieben kann. Außerdem verliert man durch die frequenzabhängige Dielektrizitätskonstante auch die Orthogonalität der Lösungsmoden, so daß zunächst kein festes Kriterium zur Verfügung steht, die Lösungsmoden zu trennen.

Aus diesen Gründen wird im folgenden eine andere Methode vorgestellt, welche im Kern auf der Lösung der Wellengleichung für fest gewählte Dielektrizitätskonstanten aufbaut. Hier kann beispielsweise das Mehrgitterverfahren effizient als Kernmodul eingesetzt werden.

## 4.2. Fixpunktbestimmung

Der Einfachheit halber wollen wir im folgenden Photonische Kristalle betrachten, in denen nur eine Komponente des Kristalls eine homogene, frequenzabhängige Dielektrizitätsfunktion  $\epsilon(\omega)$  besitzt. Wir beschränken uns desweiteren auf rein dispersive Materialien und vernachlässigen die (notwendigerweise immer vorhandene, aber oft über weite Frequenzbereiche kleine) Absorption, d.h. es sollen nur reelle Dielektrizitätsfunktionen  $\epsilon(\omega)$  betrachtet werden. Außerdem soll  $\epsilon(\omega)$  keine Divergenzen in dem Frequenzbereich  $\Delta\omega$  aufweisen, in dem Lösungen gesucht werden.

Wir legen zunächst den Frequenzbereich  $\Delta\omega$  fest. Dadurch wird auch der Wertebereich  $\Delta\epsilon$  für  $\epsilon(\omega)$  eingeschränkt:

$$\Delta\omega = [\omega_{\min}, \omega_{\max}] \implies \Delta\epsilon = [\epsilon_{\min}, \epsilon_{\max}] \quad (4.5)$$

Im Intervall  $\Delta\epsilon$  werden nun  $N_\epsilon$  diskrete Werte  $\epsilon_n$  ( $n = 1, \dots, N_\epsilon$ ) ausgewählt, für welche dann die zugehörige Wellengleichung gelöst und die Eigenfrequenzen  $\omega_i^n$  ( $i = 1, \dots, N_\omega$ ) bestimmt werden, welche natürlich vom gewählten  $\epsilon_n$  abhängen. Durch Interpolation zwischen den diskreten Werten  $\omega_i^n$  erhalten wir so für jedes  $i$  eine Kurve  $\omega_i(\epsilon)$ , die den Verlauf der  $i$ -ten Eigenfrequenz der Wellengleichung unter Veränderung von  $\epsilon$  im Operator darstellt. Schließlich können nun die Lösungen des Fixpunktproblems als *Schnittpunkte* der Kurven  $\omega_i(\epsilon)$  mit der Kurve  $\epsilon(\omega)$  identifiziert werden.

In Abbildung 4.1 wird dieses Lösungsverfahren graphisch veranschaulicht. Algorithmus 4.1 beschreibt die einzelnen Lösungsschritte, wie sie zuvor aufgeführt wurden, noch einmal in kompakter Form.

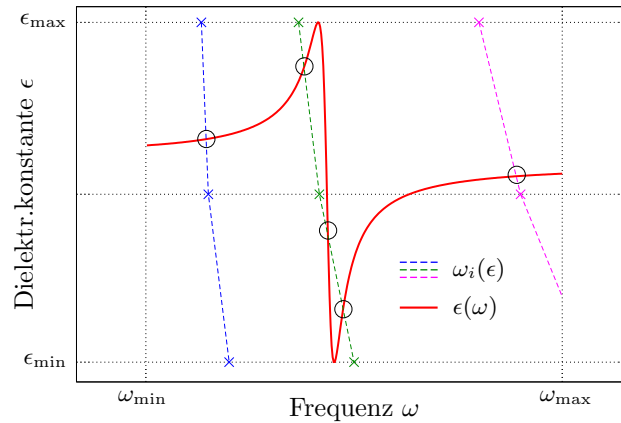


Abbildung 4.1.: Fixpunktbestimmung: Die Schnittpunkte der Eigenfrequenzkurven  $\omega_i(\epsilon)$  mit der Dielektrizitätsfunktion  $\epsilon(\omega)$  sind die gesuchten Lösungen des Fixpunktproblems.

Zur vorgestellten Methode gibt es folgendes anzumerken:

- für die Berechnung der Eigenfrequenzen zu festem  $\epsilon_n$  (Kernmodul, Zeilen 4 und 5 in Alg. 4.1) können verschiedene Methoden (wie z.B. die Ebene-Wellen-Methode oder die Mehrgitter-Methode) verwendet werden. Mehr noch als in der Bandstrukturrechnung für frequenzunabhängiges  $\epsilon$  ist die Effizienz der gewählten Methode wichtig, da das Kernmodul  $N_\epsilon$ -fach ausgeführt wird.
- der Parameter  $N_\omega$ , der die Anzahl der vom Kernmodul für jedes diskrete  $\epsilon_n$  zu berechnenden Eigenfrequenzen angibt, muß geeignet gewählt werden, so daß alle Eigenfrequenzen im Intervall  $\Delta\omega$  gefunden werden können.
- in Frequenzbereichen wo  $\epsilon$  stark variiert können mehrere Schnittpunkte einer Kurve  $\omega_i(\epsilon)$  mit  $\epsilon(\omega)$  auftreten. Dies führt dann oft zu spektral sehr eng beieinander liegenden Lösungen. Ein Beispiel hierfür sind die drei Schnittpunkte der Kurve  $\omega_2(\epsilon)$  mit  $\epsilon(\omega)$  in Abbildung 4.1. Dadurch kann die Anzahl der gefundenen Lösungsfrequenzen  $N_\Omega$  größer sein als die Anzahl der im Kernmodul berechneten Eigenfrequenzen  $N_\omega$ .
- die Anzahl  $N_\epsilon$  der für die Interpolation der  $\omega_i(\epsilon)$ -Kurven nötigen diskreten Werte  $\omega_i(\epsilon_n)$  hängt davon ab, wie gutartig die  $\omega_i(\epsilon)$ -Kurven sind. Im Normalfall sind die  $\omega_i(\epsilon)$  mit steigendem  $\epsilon$  monoton abfallende Kurven. Oft genügt daher eine sehr geringe Anzahl  $N_\epsilon$  (beispielsweise  $N_\epsilon = 3$ , siehe Abb. 4.1). Statt linearer Interpolation kann im Bedarfsfall auch Interpolation höherer Ordnung verwendet werden.

Algorithmus 4.1: Fixpunktbestimmung:

**IN:** Frequenzbereich  $\Delta\omega = [\omega_{\min}, \omega_{\max}]$   
**OUT:** Lösungen  $\Omega_j$  ( $j = 1, \dots, N_\Omega$ ) der Wellengleichung in  $\Delta\omega$   
**PARAM:**  $N_\epsilon, N_\omega$ , Kernmodul

- 1: suche maximales + minimales  $\epsilon$  in  $\Delta\omega \rightarrow \Delta\epsilon = [\epsilon_{\min}, \epsilon_{\max}]$
- 2: diskretisiere  $\Delta\epsilon$  in  $N_\epsilon$  Punkten  $\rightarrow \epsilon_n = \epsilon_{\min} + (\epsilon_{\max} - \epsilon_{\min}) \frac{n-1}{N_\epsilon-1}$
- 3: **for each**  $\epsilon_n$  ( $n = 1, \dots, N_\epsilon$ )
- 4: finde  $N_\omega$  Eigenfrequenzen  $\omega_i^n$  der Wellengleichung // Kernmodul
- 5: zu fester Dielektrizitätskonstante  $\epsilon_n$
- 6: **next**  $\epsilon_n$
- 7: setze  $j = 1$
- 8: **for**  $i = 1, \dots, N_\omega$
- 9: interpoliere zwischen Punkten  $\omega_i(\epsilon_n) \rightarrow \omega_i(\epsilon)$
- 10: finde Schnittpunkte von  $\omega_i(\epsilon)$  und  $\epsilon(\omega) \rightarrow \Omega_j, \Omega_{j+1}, \dots$
- 11:  $j = j + \text{Anzahl der Schnittpunkte von } \omega_i(\epsilon) \text{ mit } \epsilon(\omega)$
- 12: **next**  $i$
- 13:  $N_\Omega = j$

---

### 4.3. Modellsystem: Zwei-Niveau-Atome in dielektrischer Matrix

Zur Illustration der im vorigen Abschnitt beschriebenen Methode wollen wir diese nun auf ein konkretes Modellsystem mit frequenzabhängiger Dielektrizitätsfunktion anwenden. Wir betrachten einen 2D-Kristall aus Zylindern aus einem dielektrischen Material (*Matrix* mit Dielektrizitätskonstante  $\epsilon_m$ ), in dem Anteile eines Materials aus *Zwei-Niveau-Atomen* mit der komplexen frequenzabhängigen Dielektrizitätsfunktion

$$\epsilon_{\text{zn}}(\omega) = 1 + \frac{\omega_p^2}{\omega_a^2 - \omega^2 - i\gamma\omega} \quad (4.6)$$

eingearbeitet sind ( $\omega_p$ : Plasmafrequenz,  $\omega_a$ : atomare Resonanzfrequenz,  $\gamma$ : Dämpfungskonstante). Die effektive Dielektrizitätsfunktion einer solchen Mischung kann im Rahmen der *Maxwell-Garnett-Theorie* (s. [24, 25] wie folgt beschrieben werden:<sup>2</sup>

$$\epsilon_{\text{eff}}(\omega) = \epsilon_m \left[ 1 + \frac{3f\alpha}{1 - f\alpha} \right] \quad \alpha = \frac{\epsilon_{\text{zn}}(\omega) - \epsilon_m}{\epsilon_{\text{zn}}(\omega) + 2\epsilon_m} . \quad (4.7)$$

---

<sup>2</sup>Die Maxwell-Garnett-Formel wurde in der Original-Publikation [25] für Medien mit kugelförmigen metallischen Einschließungen hergeleitet. In der Herleitung wird keine Einschränkung bezüglich des komplexen Charakters der Dielektrizitätsfunktionen der einzelnen Komponenten gemacht, daher ist sie auch anwendbar für absorptive Komponenten. Die resultierende effektive Dielektrizitätsfunktion erfüllt auch die Kramers-Kronig-Relation (4.3), was explizit durch numerische Integration überprüft wurde.

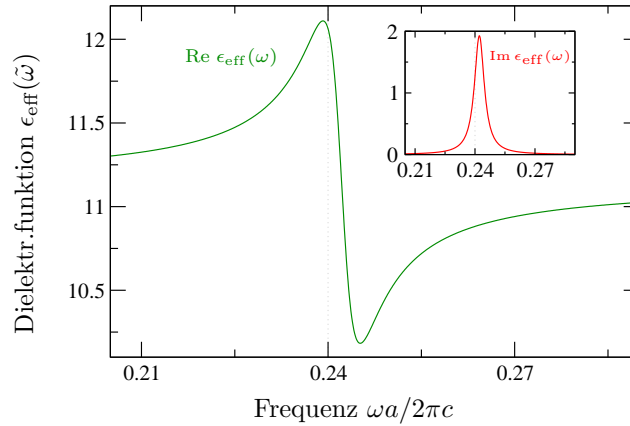


Abbildung 4.2.: Effektive Dielektrizitätsfunktion  $\epsilon_{\text{eff}}(\omega)$  einer Mischung aus Silizium ( $\epsilon_m = 11.9$ ) und Zwei-Niveau-Atomen mit einer durch Gl. (4.6) gegebenen frequenzabhängigen Dielektrizitätsfunktion.  $\epsilon_{\text{eff}}(\omega)$  wurde nach Gl. (4.7) mit den weiteren Parametern  $\tilde{\omega}_a = 0.24$ ,  $\tilde{\omega}_p = 0.7\tilde{\omega}_a$ ,  $\gamma = 0.025\tilde{\omega}_a$  und  $f = 0.05$  berechnet.

Hierbei ist  $f$  das Verhältnis des Volumens der Zwei-Niveau-Atom-Anteile zum Volumen der Matrixkomponente. Wir betrachten den Fall, daß der Anteil der Zwei-Niveau-Atome sehr klein ist,  $f \ll 1$ . In Abbildung 4.2 ist  $\epsilon_{\text{eff}}(\omega)$  für die folgenden Parameter graphisch dargestellt:

$$\begin{aligned}
 \tilde{\omega}_a &= 0.24 & \epsilon_m &= 11.9 \quad (\text{Matrix aus Silizium}) \\
 \tilde{\omega}_p &= 0.7\tilde{\omega}_a & f &= 0.05 \\
 \gamma &= 0.025\tilde{\omega}_a
 \end{aligned} \tag{4.8}$$

Der Verlauf entspricht qualitativ der Dielektrizitätsfunktion (4.6) der Zwei-Niveau-Atome, wobei jedoch der Realteil hin zur Dielektrizitätskonstanten des Matrixmaterials Silizium ( $\epsilon_m = 11.9$ ) verschoben ist. Der Imaginärteil ist praktisch nur im engen Bereich um die Resonanz von null verschieden und dort für die gewählten Parameter um den Faktor 5 kleiner als der Realteil.

Über die Bandstruktur können wir schon im voraus einige Aussagen treffen:

- Weit weg von der Resonanz ist die Dielektrizitätsfunktion nahezu konstant, d.h. die Bänder, die nicht im Resonanzbereich liegen werden sich im wesentlichen nicht stark von Bändern einer Bandstruktur mit entsprechender frequenzunabhängiger Dielektrizitätskonstante unterscheiden.
- Interessante Phänomene können auftreten, wenn Bänder die Resonanzfrequenz kreuzen oder wenn die Resonanzfrequenz in einer Bandlücke, aber ganz in der Nähe einer Bandkante liegt, weil dann Mehrfachschnittpunkte einzelner Eigenfrequenzlinien möglich werden (siehe Abb. 4.1).

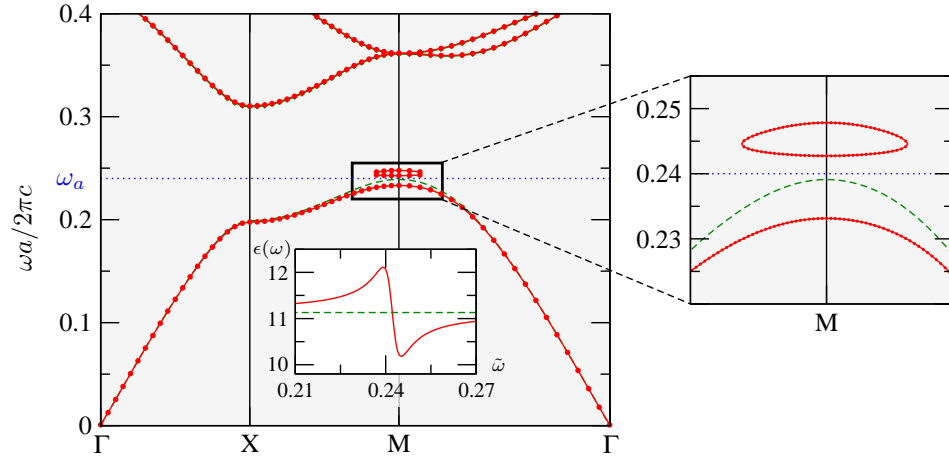


Abbildung 4.3.: Bandstruktur für eine frequenzabhängige Dielektrizitätsfunktion gegeben durch den Realteil von (4.7) mit den Parametern aus (4.8). Rechts ist der interessante Bereich um den M-Punkt in Vergrößerung zu sehen. Zum Vergleich ist in grün (gestrichelt) eine Bandstruktur für eine frequenzunabhängige Dielektrizitätskonstante  $\epsilon = 11.13$  dargestellt.

Im folgenden wollen wir daher einen Fall betrachten, in dem eine Bandlücke auftritt und wählen eine Resonanzfrequenz in der Nähe der Bandlücke. Wir betrachten dann das Verhalten, wenn die Resonanzfrequenz in das Band hinein verschoben wird.

Für die in unserem Modell verwendete Geometrie (Quadratgitter aus dielektrischen Zylindern in Luft) kann beispielsweise eine Bandlücke durch folgende Parameterwahl erreicht werden:

$$\begin{aligned}
 \text{Zylinder (Silizium + Zwei-Niveau-Atome): } \quad \epsilon_a &= \epsilon_{\text{eff}}(\omega) \\
 \text{Umgebung (Luft): } \quad \epsilon_b &= 1.0 \\
 \text{Radius-Gitterabstand-Verhältnis: } \quad R/a &= 0.3
 \end{aligned} \tag{4.9}$$

Die Bandlücke tritt hier in der  $E$ -Polarisation zwischen dem ersten und zweiten Band auf. Wir wählen als Dielektrizitätsfunktion den Realteil von  $\epsilon_{\text{eff}}(\omega)$  mit den in (4.8) angegebenen Parametern. Die Resonanzfrequenz  $\tilde{\omega}_a = 0.24$  liegt knapp oberhalb der Bandkante des ersten Bandes.

Die mit diesen Parametern mit Algorithmus 4.1 berechnete Bandstruktur ist in Abbildung 4.3 gezeigt. Die wesentlichen Merkmale im Vergleich zu einer Bandstruktur für eine frequenzunabhängige Dielektrizitätskonstante (ebenfalls in Abb. 4.3 eingezeichnet) sind:

- Die beiden Bandstrukturen sind weit weg von der Resonanz wie erwartet nahezu identisch.

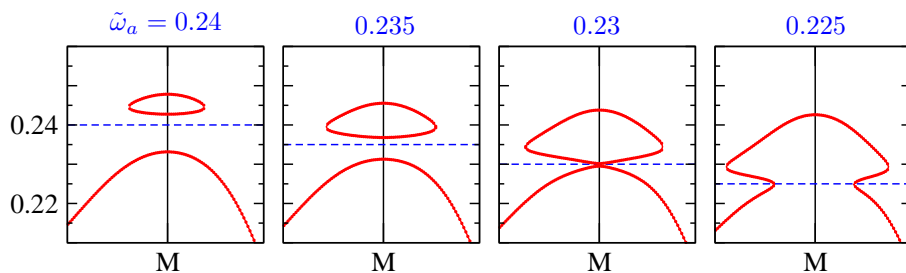


Abbildung 4.4.: Entwicklung der Blase bei Variation der Resonanzfrequenz  $\omega_a$ . Die Blase verschmilzt mit dem Band, wenn die Resonanzfrequenz ins Band verschoben wird.

- Im interessanten Bereich um den M-Punkt, wo das erste Band in die Nähe der Resonanz kommt, bildet sich über dem Band eine geschlossene „Blase“ aus. Das Band selbst wird zu kleineren Frequenzen hin abgestoßen.

Für frequenzabhängige Dielektrizitätsfunktion („energieabhängiges Potential“) versagt zunächst die Intuition aus der elektronischen Bandstrukturechnung. Das Auftreten der Blase und die „Abstoßung“ des Bandes weg von der Resonanzfrequenz können jedoch anhand der Abbildung 4.1 einfach erklärt werden: Die Frequenzkurve  $\omega_1(\epsilon)$  des ersten Bandes verschiebt sich bei Annäherung an den M-Punkt in Richtung der Resonanz. Hierbei wird der Schnittpunkt von  $\omega_1(\epsilon)$  mit der Dielektrizitätsfunktion  $\epsilon(\omega)$  hin zu größerem  $\epsilon$  verschoben, was gleichbedeutend ist mit einer Verschiebung des Schnittpunkts zu kleinerer Frequenz, da  $\omega_1(\epsilon)$  für größer werdendes  $\epsilon$  monoton abfällt. Dies erklärt die „Abstoßung“ des Bandes.

Kommt die Frequenzkurve  $\omega_1(\epsilon)$  noch näher an die Resonanz heran, so treten zusätzlich zwei Schnittpunkte im Bereich des Minimums von  $\epsilon(\omega)$  auf, die zunächst frequenzmäßig sehr nahe beieinander liegen, sich aber voneinander entfernen, je weiter  $\omega_1(\epsilon)$  in den Bereich der Resonanz kommt. So bildet sich die Blase, welche ihre maximale Ausdehnung direkt am M-Punkt hat, wo das Band der Resonanz am nächsten kommt.

### 4.3.1. Parameterstudie

#### Variation der Resonanzfrequenz

Im folgenden soll zunächst untersucht werden, wie sich die Blase verändert, wenn die Parameter der Dielektrizitätsfunktion (Resonanzfrequenz, Plasmafrequenz und Dämpfungskonstante) variiert werden. Die Entwicklung der Blase für verschiedene Resonanzfrequenzen ist in Abbildung 4.4 dargestellt.  $\omega_a$  wird von knapp überhalb des Bandes ( $\tilde{\omega}_a = 0.24$ ) bis in das Band hinein ( $\tilde{\omega}_a = 0.225$ ) durchgefahen. Zu sehen ist, daß die Blase mit dem Band verschmilzt. Liegt die Resonanzfrequenz innerhalb des Bandes, so bewirkt die Frequenzabhängigkeit der Dielektrizitätsfunktion das Entstehen einer „Einschnürung“ an der Stelle, wo das Band die Dielektrizitätsfunktion schneidet. In die entgegengesetzte Richtung, also bei Verschiebung der Re-

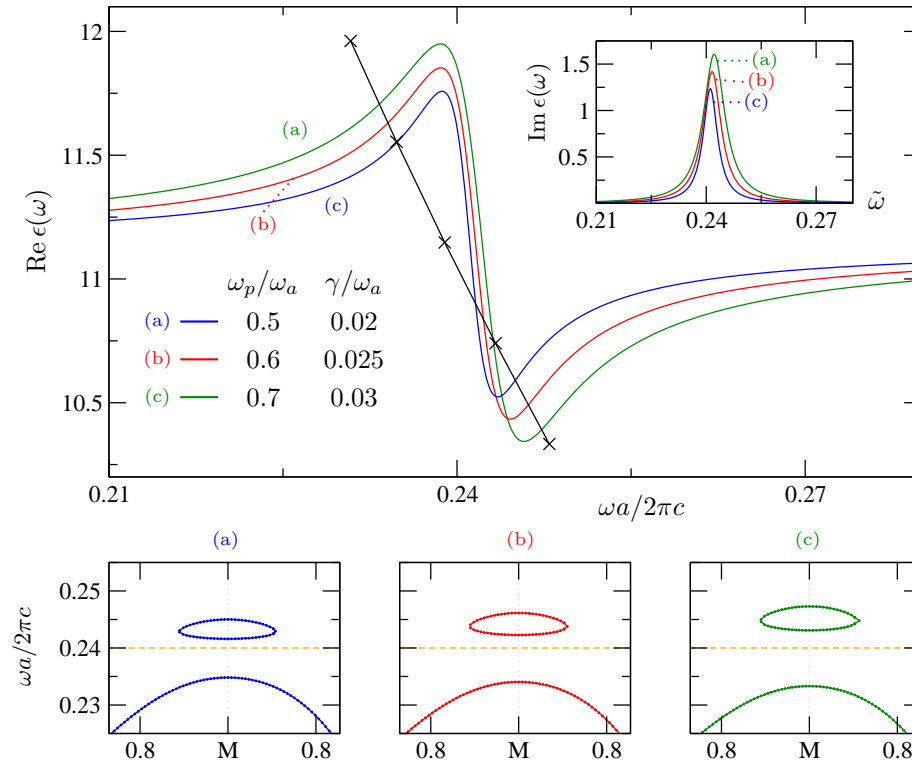


Abbildung 4.5.: Entwicklung der Blase für eine spezielle Variation der Plasmafrequenz ( $\omega_p / \omega_a = 0.5 \rightarrow 0.7$ ) und der Dämpfungskonstanten ( $\gamma / \omega_a = 0.02 \rightarrow 0.03$ ). Die Blasenausdehnung im  $k$ -Raum bleibt praktisch konstant, während sich die Abstände des Bandes und der Blase von der Resonanzfrequenz und die Dicke der Blase leicht verändern. Zusätzlich eingezeichnet ist die Frequenzkurve  $\omega_1(\epsilon)$  am M-Punkt.

sonanzfrequenz weiter in die Bandlücke, wird dagegen die Blase immer kleiner und verschwindet schließlich ganz.

#### Variation der Plasmafrequenz und der Dämpfungskonstanten

Wir untersuchen nun die Entwicklung der Blase bei Veränderung der Plasmafrequenz  $\omega_p$  und der Dämpfungskonstanten  $\gamma$ . Die Abbildungen 4.5 und 4.6 zeigen die Dielektrizitätsfunktion für jeweils drei unterschiedliche Kombinationen von  $\omega_p$  ( $\omega_p / \omega_a = 0.5 \rightarrow 0.7$ ) und  $\gamma$  ( $\gamma / \omega_a = 0.02 \rightarrow 0.03$ ) und darunter die entsprechenden Bandstrukturen (Ausschnitte wie in Abbildung 4.3). Zusätzlich eingezeichnet ist die Frequenzkurve  $\omega_1(\epsilon)$  am M-Punkt, deren Schnittpunkte mit  $\epsilon(\omega)$  die Lösungsfrequenzen am M-Punkt ergeben.

In Abbildung 4.5 ist zunächst eine Situation dargestellt, in der die Minima der Dielektrizitätsfunktionen für die drei Fälle fast auf einer Linie liegen, die parallel



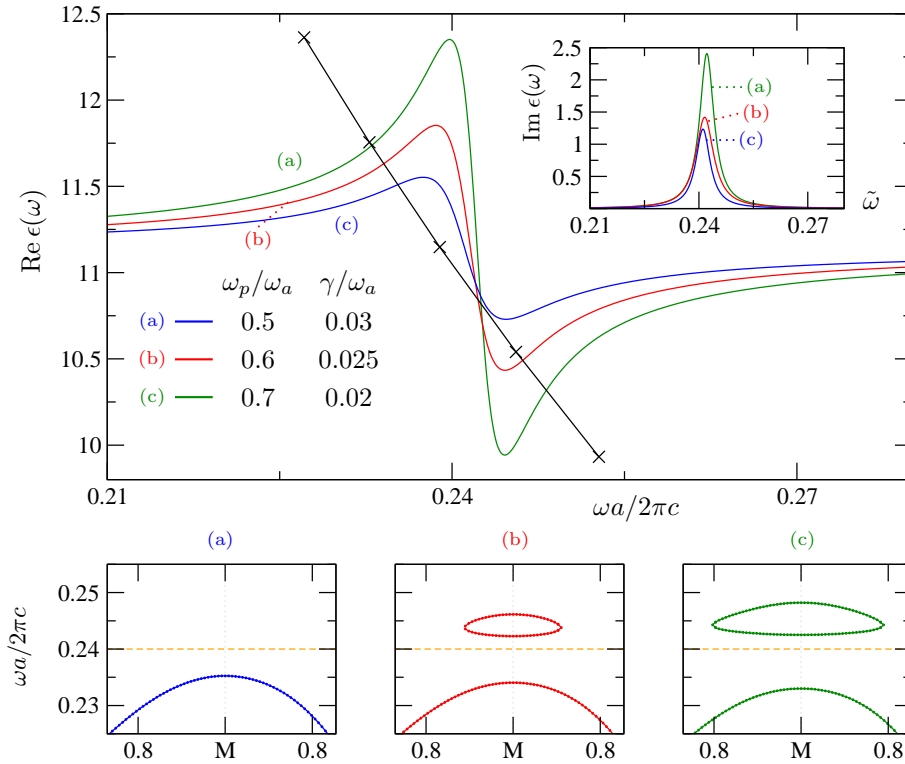


Abbildung 4.6.: Entwicklung der Blase für eine spezielle Variation der Plasmafrequenz ( $\omega_p = 0.5 \rightarrow 0.7$ ) und der Dämpfungskonstanten ( $\gamma = 0.03 \rightarrow 0.02$ ). Die Blasengeometrie im  $k$ -Raum und der Abstand des Bandes zur Resonanzfrequenz verändern sich stark. Zusätzlich eingezeichnet ist die Frequenzkurve  $\omega_1(\epsilon)$  am M-Punkt.

zur Frequenzkurve  $\omega_1(\epsilon)$  verläuft. Dadurch erhalten wir in diesem Fall Blasen mit ungefähr gleicher Ausdehnung im  $k$ -Raum, denn  $\omega_1(\epsilon)$  berührt den Bereich um das Minimum von  $\epsilon(\omega)$  für alle drei Fälle etwa ab demselben  $k$ , wenn wir uns dem M-Punkt schrittweise nähern. Wir können auch die Veränderung der Abstände des Bandes und der Blase von der Resonanzfrequenz und die Veränderung der Dicke der Blase durch die Betrachtung der Schnittpunkte von  $\epsilon(\omega)$  mit  $\omega_1(\epsilon)$  leicht deuten.

In Abbildung 4.6 wurden nun die Parameter so gewählt, daß sich drei recht unterschiedliche Dielektrizitätsfunktionen ergaben. Man sieht, daß jetzt die Minima von  $\epsilon(\omega)$  nicht mehr auf einer Linie parallel zur Frequenzkurve liegen. Dadurch variiert die Blasenausdehnung im  $k$ -Raum wie auch die Blasendicke beträchtlich. Für den ersten Fall ( $\omega_p = 0.5 \omega_a$ ,  $\gamma = 0.03 \omega_a$ ) sehen wir, daß offensichtlich die Blase gerade nicht mehr auftritt, weil die Frequenzkurve  $\omega_1(\epsilon)$  am Maximumpunkt M ganz knapp an der  $\epsilon(\omega)$ -Kurve vorbeigeht.

## 4.4. Ausblick: beliebige Dielektrizitätsfunktionen

Die hier vorgestellte Methode läßt sich im Prinzip für beliebige reelle Dielektrizitätsfunktionen anwenden, beispielsweise auch für gemessene Dielektrizitätsfunktionen. Da der vorgestellte Algorithmus sehr gut geometrisch veranschaulicht werden kann, lassen sich die Ergebnisse meist schon grob voraussagen. Man könnte sich z.B. vorstellen, daß für Dielektrizitätsfunktionen mit mehreren, dicht gedrängten Resonanzen mehrere Blasen auftreten, oder daß die Struktur der Blasen selbst komplizierter wird. Für metallische Dielektrizitätsfunktionen vom Drude-Typ erwartet man Effekte vor allem im Bereich unterhalb der Plasmafrequenz, wo die Dielektrizitätsfunktion negativ ist.

### 4.4.1. Verallgemeinerung auf absorptive Materialien

Für eine rein dispersive Dielektrizitätsfunktion sind die Lösungen des Fixpunktproblems wie oben beschrieben die Schnittpunkte der Eigenfrequenzlinien  $\omega_i(\epsilon)$  mit der Dielektrizitätsfunktion  $\epsilon(\omega)$ . Wenn wir aber auch absorptive Materialien betrachten wollen, dann wird nicht nur die Dielektrizitätsfunktion komplex ( $\epsilon''(\omega) \neq 0$ ), sondern wir erhalten auch komplexe Eigenwerte der Wellengleichung für konstantes aber komplexes  $\epsilon$ , d.h. auch komplexe Frequenzen.<sup>3</sup> Der Algorithmus 4.1 muß daher verallgemeinert werden.

Das Hauptproblem dabei ist nun, daß zunächst  $\epsilon(\omega)$  nur für reelles Argument  $\omega$  gegeben ist. Es ist nicht klar, ob der Realteil von  $\omega$  die richtige Größe als Argument für  $\epsilon(\omega)$  ist. Wir haben also eine reelle Frequenz  $\bar{\omega}$  als Funktion von  $\text{Re } \omega$  und  $\text{Im } \omega$  zu finden. Findet man eine solche Zuordnung, so kann der Algorithmus wie folgt verallgemeinert werden:

- In einem dreidimensionalen Koordinatensystem bilden  $\epsilon'$  und  $\epsilon''$  die  $x$ - bzw.  $y$ -Achse. Auf der  $z$ -Achse wird  $\bar{\omega}$  aufgetragen.
- Die Dielektrizitätsfunktion  $\epsilon(\bar{\omega})$  wird in diesem Koordinatensystem durch eine Raumkurve dargestellt, während  $\bar{\omega}_i(\epsilon', \epsilon'')$  (die „effektiv reellen“ Eigenfrequenzen des frequenzunabhängigen Problems zu festem  $\epsilon = \epsilon' + i\epsilon''$ ) Flächen im Raum bilden.
- Lösungen des Fixpunktproblems sind alle Punkte, in denen  $\epsilon(\bar{\omega})$  eine der Flächen  $\omega_i(\epsilon', \epsilon'')$  durchstößt oder berührt.

Diese Methode ist in Abbildung 4.7 veranschaulicht. Der Algorithmus 4.1 (mit Abbildung 4.1) für rein dispersive Dielektrizitätsfunktionen ist ein Spezialfall dieses Verfahrens, wobei  $\bar{\omega} = \omega$  und die Raumkurve  $\epsilon(\bar{\omega})$  allein in der  $\epsilon'$ - $\bar{\omega}$ -Ebene liegt. Die Kurven  $\omega_i(\epsilon)$  in Abb. 4.1 sind gerade die Schnittkurven der Flächen  $\omega_i(\epsilon)$  mit dieser Ebene.

---

<sup>3</sup>Die Lösungen zu komplexen Eigenfrequenzen lassen sich als zeitlich abklingende Blochmoden interpretieren.

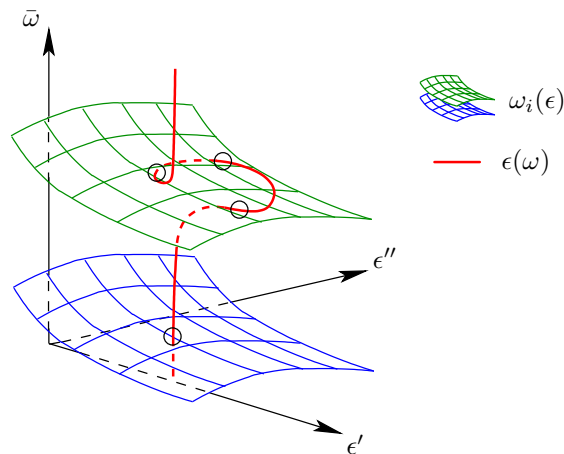


Abbildung 4.7.: Schema zur Fixpunktbestimmung für absorptive Dielektrizitätsfunktionen. Es ist eine zu Abbildung 4.1 analoge Situation dargestellt, wobei nur im Bereich der Resonanz die Absorption  $\epsilon''$  von null verschieden ist.

#### 4.4.2. Einschränkungen

Die Hauptvoraussetzung zur Behandlung beliebiger Dielektrizitätsfunktionen ist die Möglichkeit, für ein beliebiges (auch negatives oder komplexes), aber konstantes  $\epsilon$  die Wellengleichung lösen zu können, um die  $\omega_i(\epsilon)$  zu erhalten. Es ist mir aber bisher nicht gelungen, das Mehrgitterverfahren beispielsweise auf negatives oder komplexes  $\epsilon$  anzuwenden.

Ein Problem dabei ist wohl die Sortierung der Eigenmoden nach ihrer Glätte, die wichtig ist, da das Mehrgitter-Verfahren immer gegen die glätteste Mode konvergiert. Für negative  $\epsilon$  konvergiert das Verfahren bei der Berechnung nur eines Eigenwerts bereits, und die Sortierung sollte einfach zu verallgemeinern sein. Für komplexe  $\epsilon$  konvergiert das Verfahren momentan jedoch noch nicht, auch nicht für nur einen Eigenwert.

Dies mag zum einen an prinzipiellen Schwierigkeiten aufgrund anderer Eigenschaften des Operators in der Wellengleichung liegen,<sup>4</sup> wodurch eventuell die Diskretisierungsfehler zu groß werden, oder wodurch andere Anforderungen an das verwendete iterative Lösungsverfahren entstehen. Das gibt also wiederum Anlaß zur Verbesserung des Diskretisierungsverfahrens (z.B. durch *Finite Elemente*, die der Problemgeometrie besser angepasst werden können) und auf bessere iterative Lösungsverfahren, z.B. *unvollständige LU Zerlegung* (ILU) (s. Abschnitt 2.6).

---

<sup>4</sup>auch die Ebene-Wellen-Methode scheint beispielsweise für komplexes  $\epsilon$  Probleme zu haben, was tatsächlich auf prinzipielle Schwierigkeiten hindeutet.



# Zusammenfassung

Thema dieser Arbeit war die *Bandstrukturrechnung* für Photonische Kristalle. Es wurde in *Kapitel 2* ein neues Verfahren zur Berechnung von Bandstrukturen vorgestellt, die *Mehrgitter-Methode*. Diese basiert auf der iterativen Lösung des Eigenwertproblems der Wellengleichung im Ortsraum. Dabei wird hauptsächlich die Glättungseigenschaft (s. Abschnitt 2.2.2) iterativer Lösungsverfahren (z.B. Gauß-Seidel-Relaxation) geschickt ausgenutzt und Relaxationen auf unterschiedlich feinen Gittern so kombiniert, daß alle Fehleranteile (sowohl oszillierende als auch glatte) gleichsam eliminiert werden.

In *Kapitel 3* wurden dann Ergebnisse für einen 2D Modellkristall präsentiert, die mit dem Mehrgitter-Verfahren berechnet wurden. Die resultierende Band- und vor allem die Modenstruktur wurden detailliert anhand von Plots der Feldverteilungen für *E*- und *H*-Polarisation analysiert. Es wurde auf *ungekoppelte Moden* [20] eingegangen und diese anhand der Modenstruktur identifiziert. Desweiteren wurden einige *interessante Abschnitte* der Bandstruktur näher beleuchtet, wo sich Bänder kreuzen oder abstoßen. Das unterschiedliche Verhalten konnte mittels Symmetrieüberlegungen erklärt werden. Die sich kreuzenden Bänder hatten jeweils entgegengesetzte Symmetrie bezüglich der relevanten Spiegelebene, während die Bänder an Abstoßungspunkten die gleiche Symmetrie bezüglich der Spiegelebene besaßen.

In Abschnitt 3.4 wurde das Mehrgitter-Verfahren bezüglich Genauigkeit und Rechenzeit mit der Ebene-Wellen-Methode (PWM) verglichen. Die Resultate für *E*-Polarisation zeigten, daß die Genauigkeit des Mehrgitter-Verfahrens aufgrund des *Abschneidefehlers* bei vergleichbarem Rechenaufwand etwas schlechter war. Bei der *H*-Polarisation wirkte sich der Abschneidefehler noch stärker aus. Im Vergleich der Rechenzeiten muß allerdings beachtet werden, daß bei der PWM nur die Eigenfrequenzen, nicht aber die Eigenmoden berechnet wurden. Bei zusätzlicher Berechnung der Eigenmoden in der PWM ist das Mehrgitter-Verfahren deutlich schneller.

Im letzten Teil der Arbeit (*Kapitel 4*) wurde dann eine Methode vorgestellt, wie prinzipiell auch Bandstrukturen für Photonische Kristalle mit *dispersiven* Komponenten, d.h. Komponenten mit *frequenzabhängiger*, reeller Dielektrizitätsfunktion, berechnet werden können. Die Methode benutzt als Kernmodul bestehende Methoden zur Bandstrukturrechnung bei konstanten Dielektrizitätsfunktionen, z.B. kann hier das Mehrgitter-Verfahren verwendet werden. Die Idee hinter der Methode ist die direkte „geometrische“ Lösung des Fixpunktproblems als solches, indem man Schnittpunkte der „Frequenzentwicklungen“  $\omega_i(\epsilon)$  (Entwicklung des Eigenfrequenzspektrums der Wellengleichung für verschiedene Dielektrizitätskonstanten  $\epsilon$ ) mit der

Dielektrizitätsfunktion  $\epsilon(\omega)$  als Lösungsfrequenzen identifiziert (Details in Kapitel 4).

Zur Illustration der möglichen neuen Phänomene, die für dispersive Komponenten auftreten können wurde dann als Modellproblem ein Photonischer Kristall betrachtet, in welchem *Zwei-Niveau-Atome* eingebracht waren. Es traten, wenn die Resonanzfrequenz der Zwei-Niveau-Atome in der Nähe einer Bandkante lag, *blasenartige Erweiterungen* der Bandstruktur in der Nähe der Resonanz auf, die sich durch Variation der Resonanzfrequenz, Plasmafrequenz und/oder Dämpfungskonstanten verformen ließen. Diese Erscheinungen haben keine direkten Entsprechungen in der elektronischen Bandstruktur, da sie allein aufgrund der frequenzabhängigen Dielektrizitätsfunktion („energieabhängiges Potential“) zustandekommen.

Am Ende von Kapitel 4 wurde schließlich noch eine mögliche Erweiterung der Methode auf absorptive Materialien diskutiert, in denen die Dielektrizitätsfunktion nicht mehr reell ist. Die Hauptschwierigkeit, die dabei auftritt, ist das Auftauchen komplexer Eigenfrequenzen. Es ist nicht klar, welche (reelle) Frequenz als Argument der Dielektrizitätsfunktion  $\epsilon(\omega)$  zu nehmen ist. Hier bleiben noch einige Fragen offen.

**Ausblick:** Sowohl im Bereich des Mehrgitter-Verfahrens als auch für den Algorithmus zur Behandlung Photonischer Kristalle mit dispersiven/absorptiven Komponenten gibt es eine ganze Reihe von Erweiterungsmöglichkeiten. In Abschnitt 2.6 wurden schon einige Verbesserungen für das Mehrgitter-Verfahren erwähnt, die wichtigsten waren dabei die Implementierung von *Finiten Elementen* statt Finiten Differenzen zur Dezimierung des Abschneidefehlers, der vor allem in der *H*-Polarisation in Abschnitt 3.4 deutlich hervortrat, und die Einbindung von Techniken aus *algebraischen* Mehrgitter-Methoden, wodurch die Konvergenz und Robustheit des Mehrgitter-Verfahrens in der Anwendung auf die Wellengleichung mit diskontinuierlicher Dielektrizitätsfunktion verbessert werden kann.

Im Zusammenhang mit dem Algorithmus für frequenzabhängige Dielektrizitätsfunktionen wäre es zukünftig mit Sicherheit sehr interessant, metallische Komponenten zu betrachten und die Ergebnisse mit den bisher dazu beispielsweise in [7, 8] veröffentlichten Resultaten zu vergleichen. Möglicherweise ist die hier vorgestellte Methode wesentlich effizienter als die in [8] verwendete FDTD-Variante.

# A. Details zum Mehrgitter-Verfahren

## A.1. Schablonen-Notation

Um Operatoren zu charakterisieren, sowohl Operatoren der Differentialgleichung als auch Transfer-Operatoren, ist die *Schablonen-Notation* nützlich. Ein Operator  $A$  läßt sich schreiben als

$$(\hat{A}u)_{i,j} = \sum_{m,n} \underbrace{A(i,j;m,n)}_{[\hat{A}]_{m,n}} u_{i+m,j+n} \quad (m,n) \in \mathbb{Z}^2. \quad (\text{A.1})$$

Die Schablone  $[\hat{A}]$  beschreibt die Anwendung des Operators an einem Gitterpunkt  $(i,j)$  in Bezug auf die Nachbarn  $(m,n)$  dieses Gitterpunktes. Bei lokal wirkenden Operatoren ist somit die Schablone von nur kleiner Dimension, da nur nächste Nachbarn eingebunden werden (z.B.  $A(i,j;m,n) = 0$  für  $|m|, |n| > 1$ ). Die graphische Schreibweise

$$[\hat{A}] = \begin{bmatrix} A(-1,-1) & A(-1,0) & A(-1,1) \\ A(0,-1) & A(0,0) & A(0,1) \\ A(1,-1) & A(1,0) & A(1,1) \end{bmatrix} \quad (\text{nur Indizes } m,n \text{ berücksichtigt}) \quad (\text{A.2})$$

zeigt den direkten Zusammenhang mit den benachbarten Gitterpunkten. Die Schablonen vieler Operatoren sind von den Indizes  $i,j$  unabhängig und man verwendet nur die Indizes  $m,n$ , wie hier gezeigt. Oft ergeben sich aber Modifikationen an den Rändern des Gebietes.

*Beispiel.* Der Laplace-Operator in 2D läßt sich in Schablonen-Notation schreiben als

$$[\Delta_2] = \frac{1}{h^2} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & -4 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \quad (\text{A.3})$$

Wir wollen auch Transfer-Operatoren, die zwischen Gittern unterschiedlicher Feinheit wirken, in Schablonen-Notation ausdrücken. Restriktionen können beschrieben werden durch

$$u_{i,j}^{k-1} = (\hat{R}^k u^k)_{i,j} = \sum_{m,n} R^k(2i, 2j; m, n) u_{2i+m, 2j+n}^k \quad (\text{A.4})$$

Die Funktion  $u^{k-1}$  wird am Gitterpunkt  $(i, j)$  (des groben Gitters) zusammengesetzt aus den Funktionswerten von  $u^k$  bei den Nachbarn des Gitterpunktes  $(2i, 2j)$  (des feinen Gitters), der sich am selben Ort befindet.

Prolongationen  $\hat{P}$  lassen sich auf diese Weise nicht so einfach ausdrücken. Deshalb verwendet man zur Darstellung stattdessen die Schablone des adjungierten Operators  $\hat{P}^\dagger$ , definiert durch

$$(\hat{P}u^k, v^{k+1}) = (u^k, \hat{P}^\dagger v^{k+1}) , \quad (\text{A.5})$$

der einer Restriktion entspricht.

Die Schablone einer Prolongation hat eine interessante Eigenschaft: Wenden wir die Prolongation auf eine Gitterfunktion  $u^k = \delta^k$  an, die nur an einer Stelle  $(i, j)$  eins ist, sonst auf allen Gitterpunkten null, so sehen wir, daß die entstehende Gitterfunktion  $u^{k+1}$  gerade um den Punkt  $(2i, 2j)$  die durch die Schablone gegebenen Werte hat.



# Literaturverzeichnis

- [1] [http://science.nasa.gov/headlines/y2000/ast28apr\\_1m.htm](http://science.nasa.gov/headlines/y2000/ast28apr_1m.htm) (2000).
- [2] C. M. Soukoulis, ed. *Photonic Band Gap Materials*, vol. 315. NATO ASI Series E (Kluwer Academic Publishers, 1995).
- [3] E. Yablonovitch. *Inhibited spontaneous emission in solid-state physics and electronics*. Phys. Rev. Lett. **58**, 2059 (1987).
- [4] S. John. *Strong localization of photons in certain disordered dielectric superlattices*. Phys. Rev. Lett. **58**, 2486 (1987).
- [5] D. Hermann, M. Frank, K. Busch, and P. Wölflé. *Photonic band structure computations*. Opt. Express **8**, 167 (2001).
- [6] M. Sigalas, C. M. Soukoulis, E. N. Economou, C. T. Chan, and K. M. Ho. *Photonic band gaps and defects in two dimensions: Studies of the transmission coefficient*. Phys. Rev. B **48**, 14121 (1993).
- [7] V. Kuzmiak, A. A. Maradudin, and F. Pincemin. *Photonic band structures of two-dimensional systems containing metallic components*. Phys. Rev. B **50**, 16835 (1994).
- [8] K. Sakoda, N. Kawai, T. Ito, A. Chutinan, S. Noda, T. Mitsuyu, and K. Hirao. *Photonic bands of metallic systems. i. principle of calculation and accuracy*. Phys. Rev. B **64**, 045116 (2001).
- [9] J. D. Jackson. *Classical Electrodynamics*. 3rd ed. (John Wiley & Sons, Inc., 1999).
- [10] K. M. Ho, C. T. Chan, and C. M. Soukoulis. *Existence of a photonic gap in periodic dielectric structures*. Phys. Rev. Lett. **65**, 3152 (1990).
- [11] K. Sakoda and J. Kawamata. *Novel approach to photonic bands with frequency-dependent dielectric constants*. Optics Express **3**, 12 (1998).
- [12] W. L. Briggs. *A Multigrid Tutorial* (SIAM, 1987).
- [13] P. Wesseling. *An Introduction To Multigrid Methods* (John Wiley & Sons, 1992).
- [14] Hackbusch. *Multigrid Methods* (Springer Verlag, Berlin, 1982).

- [15] A. Brandt, S. McCormick, and J. Ruge. *Multigrid methods for differential eigenproblems*. SIAM J. Sci. Stat. Comput. **4** (2), 244 (1983).
- [16] J. Stoer and R. Bulirsch. *Einführung in die Numerische Mathematik II*. 2nd ed. (Springer Verlag, Berlin, 1978).
- [17] H. R. Schwarz. *Methode der finiten Elemente*. 3rd ed. (B.G. Teubner, Stuttgart, 1991).
- [18] C. Wagner. *Ein algebraisches Mehrgitterverfahren - Entwicklung und Anwendung auf einen Sanierungsfall*. Habilitationsschrift, Universität Heidelberg (2000).
- [19] A. Birner, R. B. Wehrspohn, U. M. Gösele, and K. Busch. *Silicon-based photonic crystals*. Advanced Materials **13** (6), 377 (2001). Übersichtsartikel.
- [20] K. Sakoda. *Symmetry, degeneracy, and uncoupled modes in two-dimensional photonic lattices*. Phys. Rev. B **52**, 7982 (1995).
- [21] W. M. Robertson and G. Arjavalingam. *Measurement of photonic band structure in a two-dimensional periodic dielectric array*. Phys. Rev. Lett. **68**, 2023 (1992).
- [22] K. Sakoda. *Optical Properties of Photonic Crystals* (Springer Verlag, Berlin, 2001).
- [23] W. Kowalsky. *Dielektrische Werkstoffe der Elektronik und Photonik* (B.G. Teubner, Stuttgart, 1994).
- [24] C. F. Bohren and D. R. Huffman. *Absorption and Scattering of Light by Small Particles*, chap. 8.5, pp. 213–219 (John Wiley & Sons, 1983).
- [25] J. C. Maxwell Garnett. *Colours in metal glasses and in metallic films*. Philos. Trans. R. Soc. **A203**, 385 (1904).

# Danksagung

An dieser Stelle möchte ich mich bei allen bedanken, die zum Entstehen 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 Wölflé, der es mir ermöglicht hat, am Institut für Theorie der Kondensierten Materie meine Diplomarbeit anzufertigen,
- Prof. Dr. Ralph von Baltz für die Übernahme des Korreferates,
- Lasha Tkeshelashvili, Dr. Antonio Garcia-Martin und Dieter Walther für die vielen fruchtbaren Diskussionen und die angenehme Atmosphäre nicht nur innerhalb der Photonische-Kristalle-Gruppe,
- meinen Mitdiplomanden Matthias Schillinger und Meikel Frank für das Korrekturlesen dieser Arbeit.

Ganz besonders danken möchte ich meinen Eltern, die mir mein Studium der Physik an der Universität Karlsruhe ermöglichten.

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

Karlsruhe, 12. Oktober 2001

---