1-D photonische Kristalle

Berechnung der Dispersionsrelation und der Zustandsdichte für elektromagnetische Wellen

Antonius Dorda

15.03.09

Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung

Betrachtet wird die Lichtausbreitung in einem eindimensionalen photonischen Kristall. Dieser besteht aus einer periodischen Anordnung zweier dielektrischer Schichten mit verschiedenen Lichtgeschwindigkeiten c_1 und c_2. Schematisch dargestellt ist dies in Abb.(1). Die Längen b und $a-b$ bezeichnen die Dicken der einzelnen Schichten, sodass die Lichtgeschwindigkeit mit der Periode a moduliert ist.

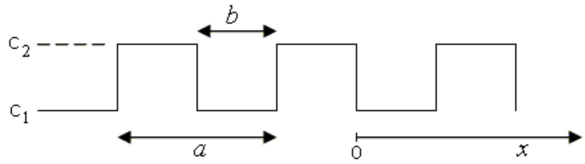

Abbildung 1: Periodischer Verlauf der Lichtgeschwindigkeit

Diese stufenartige Modulation der Lichtgeschwindigkeit ist analog zum periodischen Kristallpotential im Kronig-Penney Modell, mit ähnlichen Konsequenzen. Gleich wie es bei Elektronen in einem Festkörper zur Ausbildung einer Bandlücke kommt, weisen auch photonische Kristalle eine sogenannte photonische Bandlücke auf. Folge davon ist, dass sich keine Lichtwellen mit Frequenzen innerhalb der Bandlücke im Kristall ausbreiten können.

Der Rechenweg zur Ermittlung der Dispersionsrelation $\omega(k)$ und der Zustandsdichte $D(\omega)$ entspricht dabei weitgehend dem des Kronig-Penney Modells, bloß mit dem Unterschied, dass nicht die Schrödingergleichung sondern die Wellengleichung den Ausgangspunkt bildet.

2 Herleitung der Relationen

Gesucht werden Lösungen der eindimensionalen Wellengleichung

$$c^2(x) \cdot \frac{\partial^2}{\partial x^2} U(x,t) = \frac{\partial^2}{\partial t^2} U(x,t) \tag{1}$$

wobei $c(x)$ die Periodizität a des photonischen Kristalls aufweist. Analog zur Lösung der Schrödingergleichung für Elektronen in einem periodischen Potential muss auch $U(x,t)$ die Form einer Bloch-Funktion haben:

$$U(x,t) = u_k(x) \cdot e^{i\cdot(kx-\omega t)} \tag{2}$$

$u_k(x)$ muss wiederum invariant gegenüber Translationen um einen Gittervektor sein: $u_k(x+T) = u_k(x)$, mit $T = u \cdot a$, $u \in \mathbb{Z}$.
Fasst man die von x abhängigen Terme in Gleichung (2) zu $u(x)$ zusammen, also $U(x,t) = u(x) \cdot e^{-i\omega t}$, und setzt dies in die Wellengleichung (1) ein, so erhält man für

$u(x)$ praktisch die DGL einer harmonischen Schwingung:

$$\frac{d^2}{dx^2}u(x) + \frac{\omega^2}{c^2(x)}u(x) = 0 \tag{3}$$

Zur Ermittlung der Lösung betrachtet man nun getrennt die beiden Gebiete $0 \leq x \leq b$ und $b < x \leq a$ in denen die Lichtgeschwindigkeit die konstanten Werte c_1 bzw. c_2 hat. Die allgemeine Lösung hat die Form:

$$u(x) = \begin{cases} A_1 \cdot \cos(k_1 x) + B_1 \cdot \sin(k_1 x) & \text{für } 0 \leq x \leq b \\ A_2 \cdot \cos(k_2(x-b)) + B_2 \cdot \sin(k_2(x-b)) & \text{für } b < x \leq a \end{cases} \tag{4}$$

mit $k_j = \dfrac{\omega}{c_j}$

An der Grenzfläche $x = b$ soll die Lösungsfunktion stetig differenzierbar sein:

$$\begin{aligned} \lim_{x\to b^+} u(x) &= \lim_{x\to b^-} u(x) \\ \lim_{x\to b^+} u'(x) &= \lim_{x\to b^-} u'(x) \end{aligned} \tag{5}$$

Um zur Dispersionsrelation $\omega(k)$ zu gelangen, ist es zweckmäßig nicht von der allgemeinen Lösung Gl.(4) auszugehen, sondern getrennt die zwei Normalmoden $u_1(x)$ und $u_2(x)$ zu betrachten. Diese lassen sich mit folgenden Bedingungen konstruieren:

$$\begin{aligned} u_1(0) &= 1 & u_2(0) &= 0 \\ u_1'(0) &= 0 & u_2'(0) &= 1 \end{aligned} \tag{6}$$

Damit und mit den Gleichungen (4) und (5) erhält man für die beiden Normalmoden:

$$\begin{aligned} u_1(x) &= \begin{cases} \cos(k_1 x) & \text{für } 0 \leq x \leq b \\ \cos(k_1 b)\cos(k_2(x-b)) - \frac{k_1}{k_2}\sin(k_1 b)\sin(k_2(x-b)) & \text{für } b < x \leq a \end{cases} \\ u_2(x) &= \begin{cases} \frac{1}{k_1}\sin(k_1 x) & \text{für } 0 \leq x \leq b \\ \frac{1}{k_1}\sin(k_1 b)\cos(k_2(x-b)) + \frac{1}{k_2}\cos(k_1 b)\sin(k_2(x-b)) & \text{für } b < x \leq a \end{cases} \end{aligned} \tag{7}$$

Aufgrund der Periodizität von $c(x)$ entspricht die Form von $u_{1/2}(x)$ für $a < x \leq 2a$ praktisch derjenigen von Gl.(7), es müssen bloß x durch $(x-a)$ ersetzt und die geänderten Randbedingungen $u_1(a)$, $u_2(a)$, $u_1'(a)$ und $u_2'(a)$ berücksichtigt werden. Dies lässt sich in Matrixschreibweise darstellen:

$$\begin{pmatrix} u_1(x+a) \\ u_2(x+a) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_1(a) & u_1'(a) \\ u_2(a) & u_2'(a) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1(x) \\ u_2(x) \end{pmatrix} \tag{8}$$

Jede beliebige Lösungsfunktion $u(x)$ lässt sich als Linearkombination der beiden Normalmoden darstellen: $u(x) = C_1 \cdot u_1(x) + C_2 \cdot u_2(x)$. Andererseits folgt aus dem Bloch-Theorem (Gl.(2)), dass $u(x + a) = u(x) \cdot e^{ika}$. Die Kombination der beiden Gleichungen liefert:

$$C_1 u_1(x + a) + C_2 u_2(x + a) = \underbrace{e^{ika}}_{\lambda}(C_1 u_1(x) + C_2 u_2(x)) \tag{9}$$

Mit Gl.(8) lässt sich die Ermittlung des Phasenfaktors λ und der Konstanten C_1 und C_2 auf ein Eigenwertproblem zurückführen:

$$\begin{pmatrix} u_1(a)-\lambda & u_2(a) \\ u_1'(a) & u_2'(a)-\lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix} = 0 \tag{10}$$

Die Lösung dessen liefert folgende zwei Eigenwerte $\lambda_\pm$:

$$\begin{aligned} \lambda_\pm &= \frac{1}{2}\left[u_1(a) + u_2'(a) \pm D\right] \\ D &= (\underbrace{(u_1(a) + u_2'(a))^2}_{\alpha^2} - 4)^{\frac{1}{2}} \end{aligned} \tag{11}$$

mit den zugehörigen Eigenvektoren $C_1^\pm$ und $C_2^\pm$:

$$\begin{aligned} C_1^\pm &= \frac{2u_2(a)}{u_2'(a) - u_1(a) \pm D} \\ C_2^\pm &= 1 \end{aligned} \tag{12}$$

Dispersionsrelation

Um zur Dispersionsrelation zu kommen ersetzt man in Gl.(11) λ durch e^{ika}. Es ist offensichtlich, dass k nur für komplexe Werte von λ eine reelle Größe wird. Bedingung dafür ist, dass $|\alpha| < 2$. In diesem Fall existieren wellenartige Lösungen. In Bereichen in denen $|\alpha| > 2$ ist, können sich keine Wellen innerhalb des photonischen Kristalls ausbreiten. Es tritt also eine Bandlücke auf. Strahlt man Licht mit einer Frequenz innerhalb der Bandlücke von außen in den Kristall ein, so verursacht der Imaginärteil von k einen exponentiellen Abfall der Amplitude.
Die übliche Form der Dispersionsrelation $\omega(k)$ lässt sich nicht explizit anschreiben, stattdessen wird $k(\omega)$ angegeben:

$$\begin{aligned} k &= \pm\frac{1}{a}\arctan\sqrt{\left(\frac{2}{\alpha}\right)^2 - 1} \\ \alpha &= 2\cos\left(\omega\frac{b}{c_1}\right)\cos\left(\omega\frac{(a-b)}{c_2}\right) - \left(\frac{c_1^2 + c_2^2}{c_1 c_2}\right)\sin\left(\omega\frac{b}{c_1}\right)\sin\left(\omega\frac{(a-b)}{c_2}\right) \end{aligned} \tag{13}$$

Die hergeleitete Dispersionsrelation muss natürlich auch für den Fall eines homogenen Mediums $c_1 = c_2 = c$ gültig sein. Durch trigonometrische Umformungen erhält man: $|\alpha| = |2\cos(\omega\frac{a}{c})| \leq 2$. D.h. die Dispersionsrelation ist kontinuierlich und hat die Form $\omega = c|k|$. Der Grenzfall eines homogenen Mediums wird auch in den Abbildungen des nächsten Kapitels veranschaulicht.

Zustandsdichte

Um zur Zustandsdichte $D(\omega)$ zu kommen benötigt man die Ableitung von $k(\omega)$:

$$D(\omega) = D(k)\frac{dk}{d\omega} \tag{14}$$

Die Zustandsdichte in Abhängigkeit von k ist im Eindimensionalen konstant: $D(k) = \frac{2}{\pi}$
Für $D(\omega)$ kann schließlich folgender Ausdruck ermittelt werden:

$$\begin{aligned} D(\omega)d\omega &= \frac{2}{a\pi}\frac{1}{\sqrt{4-\alpha^2}}\left|\frac{d\alpha}{d\omega}\right| d\omega \\ \frac{d\alpha}{d\omega} &= -\frac{1}{c_1}\left((a+b)+(a-b)\left(\frac{c_1}{c_2}\right)^2\right)\sin\left(\omega\frac{b}{c_1}\right)\cos\left(\omega\frac{(a-b)}{c_2}\right) \\ &\quad -\frac{1}{c_2}\left(2a+b\left(\left(\frac{c_2}{c_1}\right)^2-1\right)\right)\cos\left(\omega\frac{b}{c_1}\right)\sin\left(\omega\frac{(a-b)}{c_2}\right) \end{aligned} \tag{15}$$

3 Abbildungen

Auf den folgenden Seiten sind die Relationen für $\alpha(\omega)$, $k(\omega)$ und $D(\omega)$ graphisch dargestellt (Abb.(2), Abb.(3) und Abb.(4)). In jeder Abbildung sind drei Graphen zu sehen, die sich durch das Verhältnis von $\frac{c_2}{c_1}$ unterscheiden. Für den jeweils obersten gilt $\frac{c_2}{c_1} = 1$, für den mittleren $\frac{c_2}{c_1} = 1,5$ und für den untersten $\frac{c_2}{c_1} = 3,5$. Die weiteren Parameter wurden folgendermaßen gewählt:

$$\begin{aligned} c_2 &= 2,9979 \cdot 10^8\,\frac{\mathrm{m}}{\mathrm{s}} \\ a &= 600 \cdot 10^{-9}\,\mathrm{m} \\ b &= 270 \cdot 10^{-9}\,\mathrm{m} \end{aligned}$$

4 Anhang

4.1 Quellen

- http://lamp.tu-graz.ac.at/ hadley/ss1/KronigPenney/KronigPenney.php
- http://www.pi5.uni-stuttgart.de/lehre/hauptseminar2004/vogel.pdf
- Charles Kittel, Einführung in die Festkörperphysik

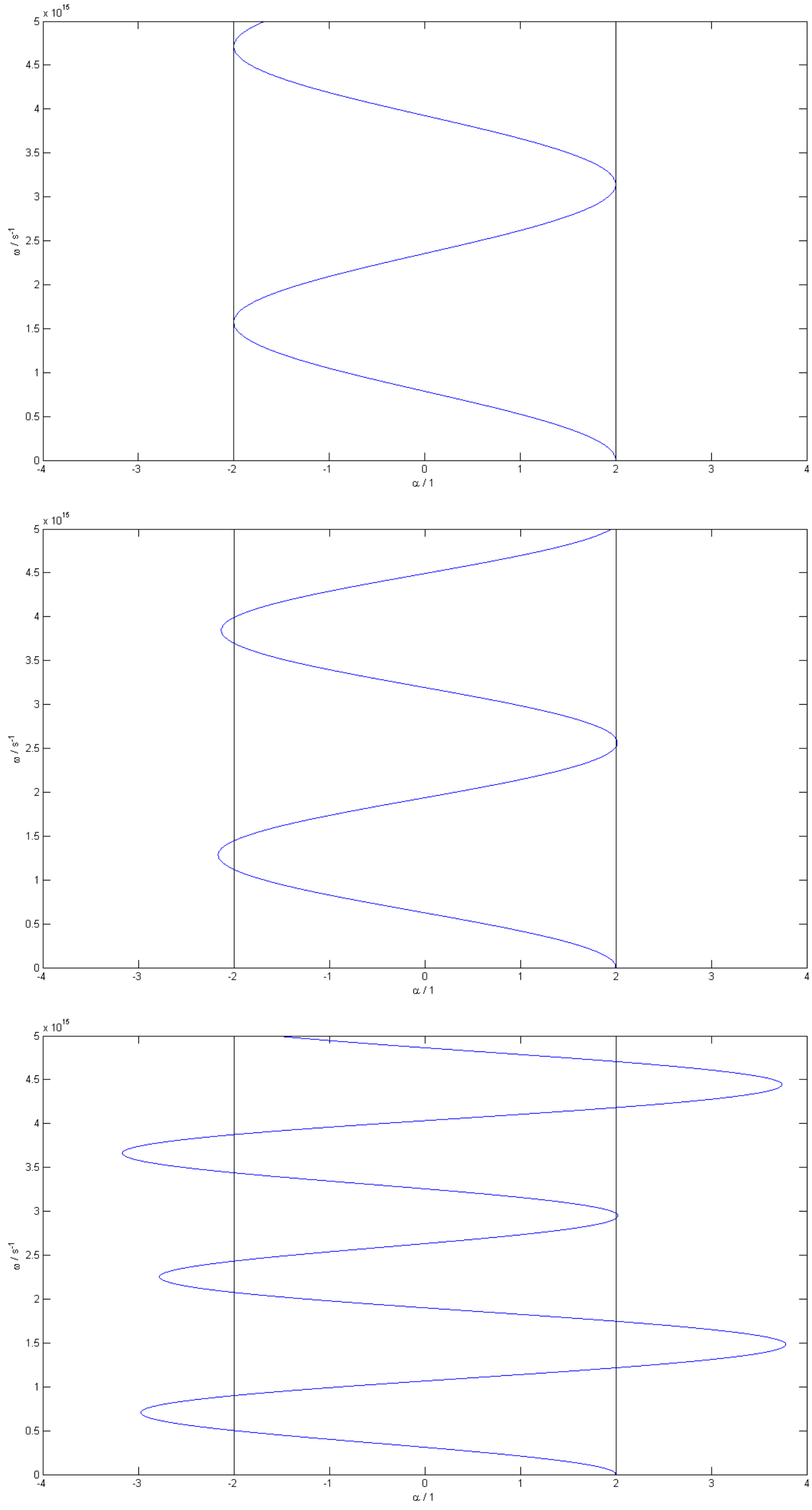

Abbildung 2: Darstellung von $\alpha(\omega)$ (Gl.(13)) für $\frac{c_2}{c_1}$ gleich 1, 1.5 und 3.5 (von oben nach unten). Die beiden Senkrechten markieren den Bereich reeller k-Werte.

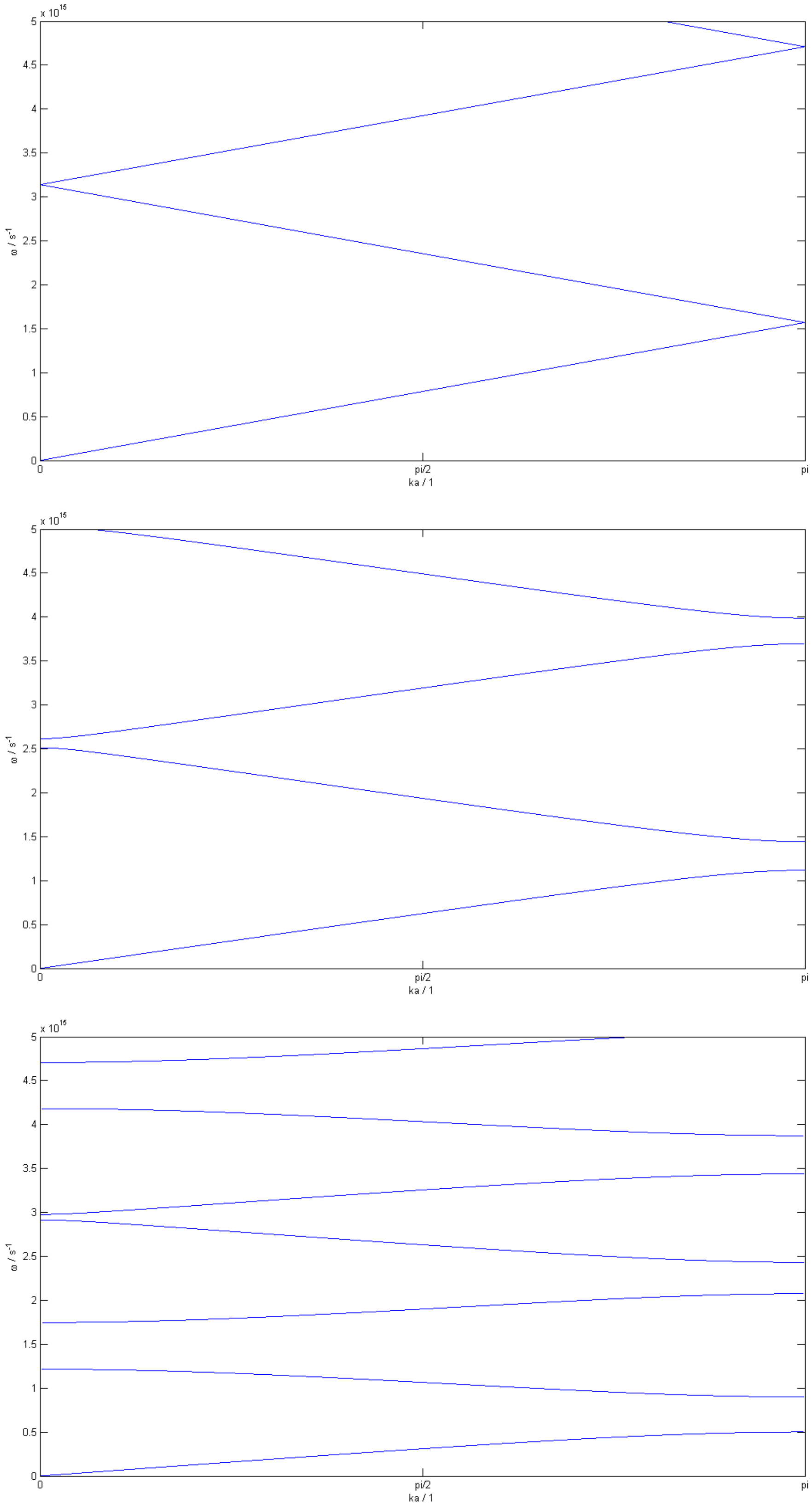

Abbildung 3: Dispersionsrelation $\omega(k)$ (Gl.(13)) für drei verschieden Werte von $\frac{c_2}{c_1}$: 1, 1.5 und 3.5 (von oben nach unten).

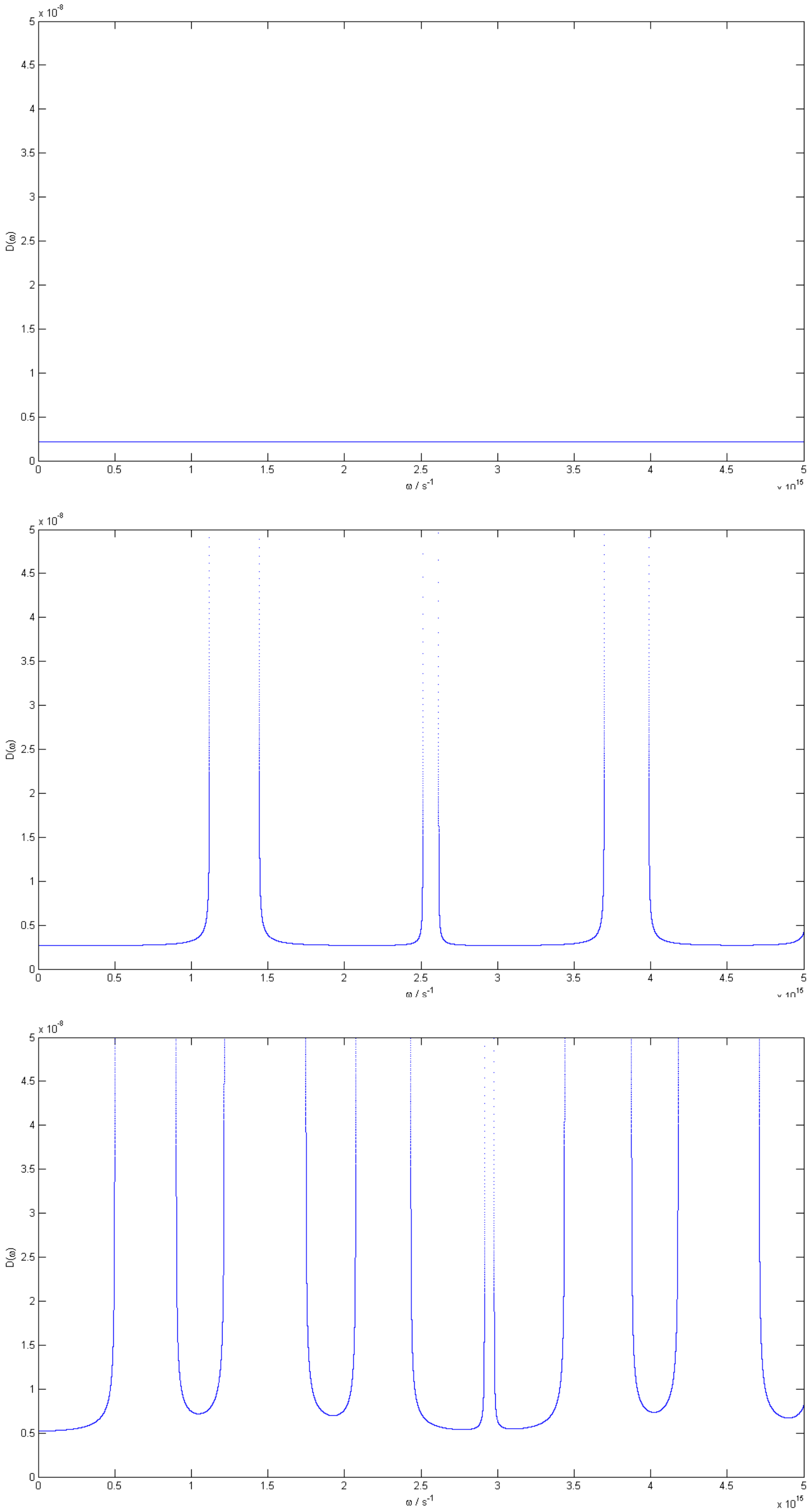

Abbildung 4: Zustandsdichte $D(\omega)$ (Gl.(15)) für $\frac{c_2}{c_1}$ gleich 1, 1.5 und 3.5 (von oben nach unten).