



TECHNISCHE UNIVERSITÄT  
CHEMNITZ

UNORDNUNG IN PHOTONISCHEN STRUKTUREN -  
THEORIE UND ANWENDUNGEN

Professur Theoretische Physik -  
Simulation neuer Materialien

TU Chemnitz  
Masterarbeit  
SS 2021

|                        |                             |
|------------------------|-----------------------------|
| <b>vorgelegt von:</b>  | David Röhlig                |
| <b>Betreuer:</b>       | Eduard Kuhn                 |
| <b>Gutachterin:</b>    | Prof. Dr. Angela Thränhardt |
| <b>Zweitgutachter:</b> | Dr. Thomas Blaudeck         |
| <b>Abgabedatum:</b>    | 02.11. 2021                 |

# Inhaltsverzeichnis

|          |  |           |
|----------|--|-----------|
| <b>1</b> | <b>Einleitung</b>  | <b>3</b>  |
| 1.1      | Amorphe Photonische Kristalle . . . . .                            | 3         |
| 1.1.1    | Natur . . . . .  | 3         |
| 1.1.2    | Anwendungen . . . . .  | 5         |
| 1.2      | Unordnung durch Fertigungsfehler . . . . .                         | 7         |
| 1.3      | Ziel der Arbeit . . . . .  | 8         |
| <b>2</b> | <b>Grundlagen</b>  | <b>9</b>  |
| 2.1      | Mathematische Beschreibung photonischer Kristalle . . . . .        | 9         |
| 2.2      | Photonische Bandstruktur . . . . .                                 | 10        |
| 2.3      | Photonische Zustandsdichte . . . . .                               | 12        |
| 2.4      | Finite-Differenzen-Methode . . . . .                               | 12        |
| 2.4.1    | Erzeugung elektromagnetischer Wellen und Randbedingungen . . . . . | 13        |
| 2.4.2    | Berechnung von Transmissionsspektren . . . . .                     | 15        |
| 2.5      | Polarisationsrichtungen . . . . .                                  | 17        |
| <b>3</b> | <b>Ergebnisse</b>  | <b>18</b> |
| 3.1      | Transmissionsspektren für geordnete Gitter . . . . .               | 18        |
| 3.1.1    | Quadratgitter . . . . .  | 18        |
| 3.1.2    | Hexagonales Gitter . . . . .                                       | 22        |
| 3.2      | Bandstruktur, Zustandsdichte und Transmission . . . . .            | 26        |
| 3.3      | Unordnung durch Störung von Ordnung . . . . .                      | 29        |
| 3.3.1    | Veränderung der regulären Gitterposition . . . . .                 | 29        |
| 3.3.2    | Veränderung des Radius . . . . .                                   | 32        |
| 3.3.3    | Veränderung der dielektrischen Konstante . . . . .                 | 35        |
| 3.3.4    | Einbringen von Fehlstellen . . . . .                               | 38        |
| 3.4      | Wirkungsmechanismen für beide Transmissionsmaxima . . . . .        | 41        |
| 3.4.1    | Das erste Maximum . . . . .  | 42        |
| 3.4.2    | Das zweite Maximum . . . . .                                       | 44        |
| 3.5      | Amorphe Strukturen . . . . .                                       | 46        |
| 3.5.1    | Spektren unterschiedlicher Realisierungen . . . . .                | 47        |
| 3.5.2    | Spektren unterschiedlicher Packungsdichten . . . . .               | 50        |
| <b>4</b> | <b>Zusammenfassung</b>   | <b>54</b> |
| 4.0.1    | Inhalt der Arbeit . . . . .  | 54        |
| 4.0.2    | Ausblick . . . . .   | 55        |

# 1 Einleitung

„Photonische Kristalle“ – Metamaterialien mit räumlich periodisch variierendem Brechungsindex – sind in der Lage, die Ausbreitung elektromagnetischer Wellen signifikant zu beeinflussen. Analog zu Kristallgittern aus der Festkörperphysik tritt das Phänomen von erlaubten und verbotenen Energiebereichen auf – nur nicht für Elektronen, sondern für Photonen. Im kristallinen Festkörper liegt die Ursache in der periodischen Anordnung der Atome bzw. der Periodizität des Atompotentials; im photonischen Kristall ist die periodische Brechzahl ursächlich. Die Anzahl der linear unabhängigen Raumrichtungen, in welchen diese Periodizität auftritt, bestimmt im übrigen die Dimension des Kristalls.

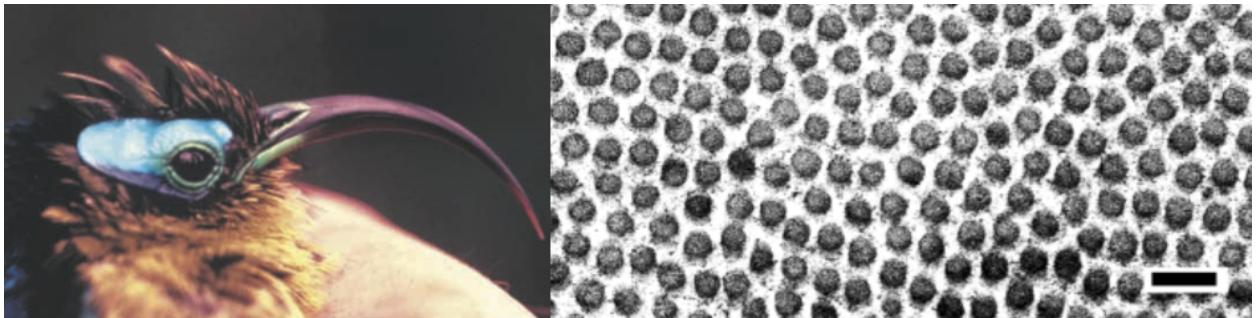
Da in der Realität allerdings Abweichungen von der Definition eines idealen photonischen Kristalls vorliegen, spielt Unordnung immer eine mehr oder weniger entscheidende Rolle, die es zu berücksichtigen gilt. Schon in der Tatsache, dass reale Kristalle von endlicher Ausdehnung sind, birgt sich eine Abweichung vom idealen Kristall, welcher als unendlich ausgedehnt behandelt wird. Genaugenommen sind die Begriffe des idealen und realen Kristalls dichotomisch, da es sich um eine ausschließende Relation handelt; es gibt keine Zwischenzustände. Demnach lässt sich Unordnung von deren Primärbegriff, Ordnung, ableiten und in Form eines Abweichungsgrades von einem selbst definierten Ordnungstyp quantifizieren. Inwieweit Unordnung eines bestimmten Grades die Eigenschaften eines photonischen Systems beeinflusst, hängt von der Art der Unordnung ab. Diese kann im Hinblick auf jegliche relevanten Parameter eines Systems auftreten, wobei sich geometrische und materialspezifische Größen unterscheiden lassen.

## 1.1 Amorphe Photonische Kristalle

### 1.1.1 Natur

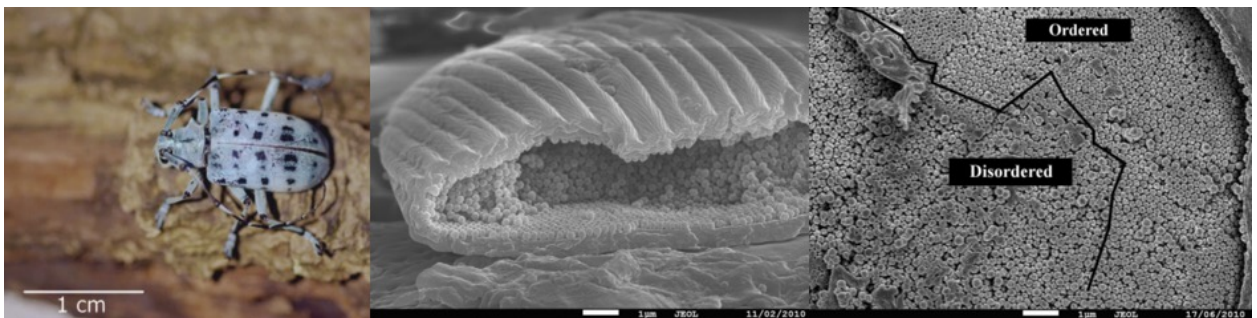
Annähernd geordnete photonische Strukturen treten in der Natur häufig und in mannigfaltiger Weise auf [1]. Eindimensionale photonische Multilagen wurden bereits auf Begonien-Arten entdeckt, wo sie die Effizienz der Photosynthese verbessern [2]. Innerhalb der Beere der Tropenpflanze *Pollia condensata* befinden sich Multilagen aus spiralförmig aneinander liegenden Mikrofibrillen aus Zellulose – diese führen zu metallisch-schillernden Farbeigenschaften [3]. Zweidimensionale photonische Kristalle treten z. B. in Form von dielektrischen Quadratgittern auf Pfauenfedern [4], rhombischen Gittern auf Rippenquallen *Beroë cucumis* [5] oder hexagonalen Gittern auf den Haaren von Seemäusen auf [6]. Als Beispiele für dreidimensionale Anordnungen sind u. a. dielektrische fcc-Strukturen (engl. face centered cubic) in Blaualgen [7], in dynamischer Form auf der Haut von Chamäleons [8] oder sogar komplexe Gyroid-Strukturen auf den Schuppen von Schmetterlingsflügeln zu nennen [9, 10]. Meist zeigt sich die Existenz geordneter photonischer Kristalle in der Natur im Auftreten irisierender Farben, bei welchen der Winkel entscheidend ist; d. h. die Farbe ändert sich je nach Betrachtungswinkel. Neben zahlreichen Entdeckungen annähernd kristalliner Anordnungen findet man jedoch auch scheinbar gänzlich ungeordneter Systeme, sog. „amorphe

photonische Kristalle“, mit einer kurzen Reichweite von Ordnung, ohne Translations- oder Rotationssymmetrie. Die blaue Farbe des Karunkel um die Augen des *Neodrepanis coruscans* entsteht durch eine zweidimensionale amorphe photonische Anordnung von Kollagenfasern [11]; dies wird in Abbildung 1.1 sichtbar. Die Federfahnen des männlichen *Cotinga maynana* aus der Familie der Schmuckvögel bestehen aus  $\beta$ -Keratin-Partikeln, umgeben von Luft. Durch diese dreidimensionale amorphe photonische Struktur entsteht die schillernde türkisblaue Gefiederfarbe [12].



**Abbildung 1.1:** TEM-Aufnahme von Kollagen-Arrays in der dunkelblauen Karunkel des *Neodrepanis coruscans*, Größenbalken entspricht 200 nm [11].

Innerhalb des transparenten Kortex der grünen Schuppen des Bockkäfers *Anoplophora graafi* fand man zufällig angeordnete Chitin-Nanopartikel mit einem Brechungsindex von 1.56 mit Durchmessern von etwa 240 nm, die für eine grüne Färbung sorgen [13]. Häufig spricht man in diesem Zusammenhang von Kolloiden, d. h. fein verteilte Nanopartikel, die in ein Dispersionsmedium eingebettet sind. Falls zwischen den beiden Medien ein hinreichender Kontrast der dielektrischen Konstante vorliegt, haben solche Anordnungen photonische Eigenschaften.



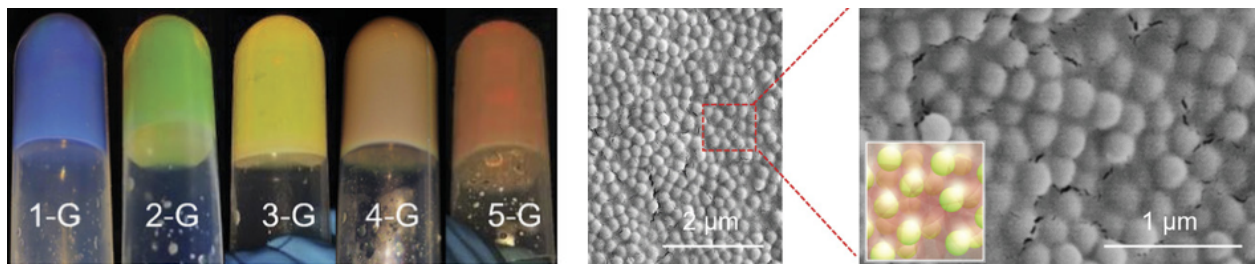
**Abbildung 1.2:** Fotografie des Bockkäfers *Pseudomyagrus waterhousei* (links), SEM-Aufnahme einer geteilten Schuppe (Mitte), mit geordnetem und ungeordnetem Bereich (rechts) [14].

Auch in den Schuppen des Bockkäfers *Pseudomyagrus waterhousei* befindet sich ein solches kolloidales Konglomerat aus monodispersen Nanopartikeln. Neben Regionen in geordneter fcc-Struktur existieren auch amorphe Bereiche. Insgesamt liefert dies eine Erklärung für die nicht-irisierende blau-violette Farbe des Käfers [14]. Auf der Schale der Napfschnecke *Patella pellucida* erstrecken sich farbige Streifen, welche auch auf photonische Eigenschaften

zurückzuführen sind. Man fand sowohl geordnete als auch amorphe kolloidale Bereiche, die eine strahlend blaue Färbung bewirken [15].

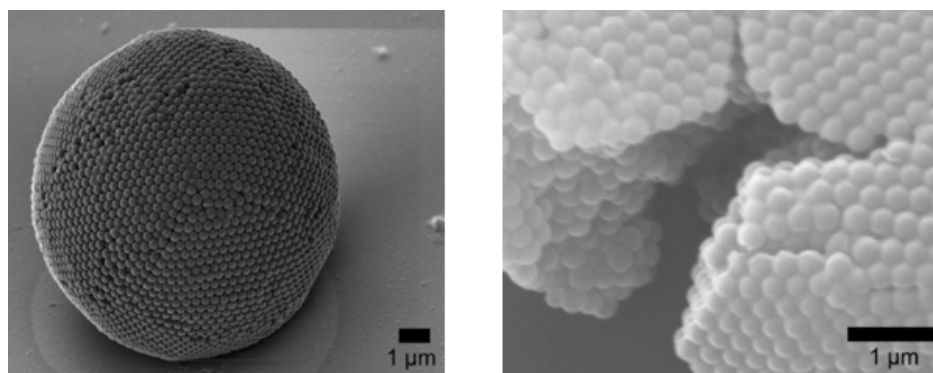
### 1.1.2 Anwendungen

Die Tatsache, dass amorphe photonische Kristalle im Gegensatz zu geordneten Strukturen in ihren Reflexionseigenschaften weniger winkelabhängig sind, macht sie vor allem für die Herstellung von Strukturfarben interessant.



**Abbildung 1.3:** Fotografien von fünf verschiedenen Arten von photonischen Plastilinen mit unterschiedlichen Silica-Partikelgrößen zwischen 182 und 263 nm (links). SEM-Aufnahme der Probe 2-G (rechts) [16].

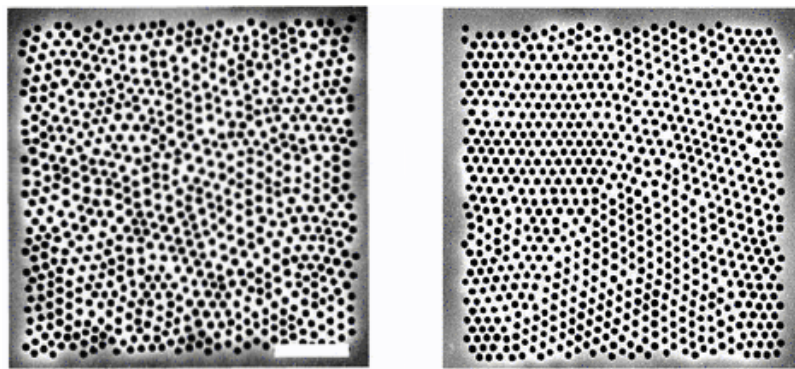
Ein Problem vieler Pigmentfarben liegt in der Tatsache, dass sie aus giftigen Stoffen bestehen. Strukturfarben können hingegen sehr einfach aus nicht-giftigen Materialien hergestellt werden und weisen nebenbei eine hohe Helligkeit und Sättigung auf. Zudem sind sie wesentlich flexibler einsetzbar; so kann man bspw. eine Farbänderung durch Austausch des Dispersionsmediums erreichen [17].



**Abbildung 1.4:** Kolloidale Kugelpackungen aus Polystyrol-Partikeln mit einem Durchmesser von 305 nm eingebettet in Luft; dargestellt sind eine vollständig erhaltene (links) und eine aufgebrochene Kugel (rechts) [18].

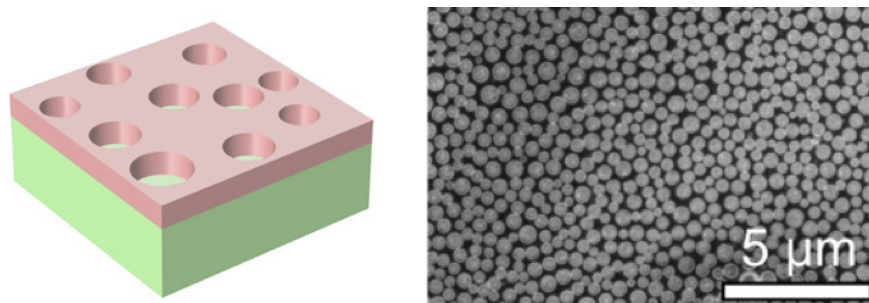
Amorphe photonische Kristalle in Form von zufällig gepackten Kolloiden werden häufig auch als photonische Gläser bezeichnet [19] und haben großes Potenzial im Bereich der

Biokodierung, für den Fälschungsschutz oder für optische Filter [20]. Als Antireflexions-Beschichtungen ermöglichen sie zudem die Effizienzsteigerung von Solarzellen [21]. Auch zur Herstellung besonders energieeffizienter elektrophoretischer Displays, bestehend aus kolloidalen Arrays, sind amorphe Anordnungen relevant [22, 23]. Was mögliche technische Anwendungen betrifft, so macht sich eine vielversprechende Herstellungsmethode den Tintenstrahl-druck zunutze. Die Strahlparameter werden dabei so manipuliert, dass statt dem klassischen Tintenstrahl eine nebelartige Ansammlung von Nano-Tröpfchen die Druckerdüse verlässt. Bei der Trocknung schrumpfen diese Tropfen durch Verdampfung und es entstehen stabile kugelförmige Ansammlungen von Partikeln, wie sie in Abbildung 1.4 dargestellt sind [18]. Wir konnten zeigen, dass die kolloidalen Kugelpackungen photonische Eigenschaften aufweisen, was sich im Auftreten von Reflexionsmaxima manifestiert [24, 25].



**Abbildung 1.5:** SEM-Aufnahmen zweier GaAs-Membranen mit Arrays aus Luftlöchern in geordnete Domänen unterschiedlicher Orientierung; der Größenbalken entspricht  $2\ \mu\text{m}$  [26].

Obwohl namentlich dreidimensionale amorphe dielektrische Systeme durch ihre einfache Herstellung häufig vorkommen, versprechen zweidimensionale Anordnungen nichtsdestoweniger progressive Anwendungen – u. a. im Hinblick auf Wellenleiter mit Liniendefekten oder, wie in Abbildung 1.5 dargestellt, als Laser-Resonator. Ein GaAs-Film – versehen mit zufällig verteilten Luftlöchern, die zum Teil Domänen ausbilden, also polykristallin sind – dient hier zur Erzeugung von Lasermoden [26].

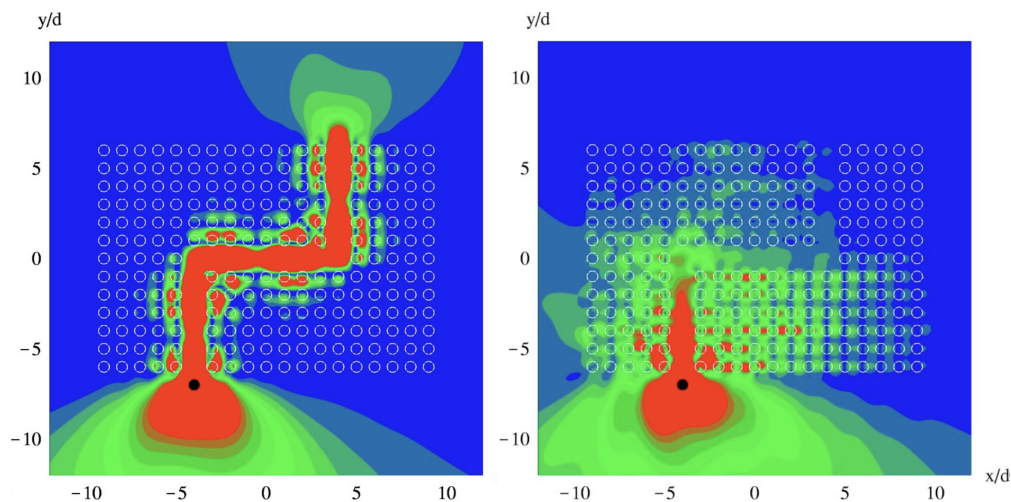


**Abbildung 1.6:** Schematische Darstellung (links) und SEM-Aufnahme (rechts) eines dünnen „a-Si:H“-Films mit Luftlöchern auf einem Glas-Substrat [27].

Inspiziert von Nanostrukturen auf den Schuppen des Schmetterlings *Pachliopta aristolochiae* dienen ungeordnete amorphe Luftlöcher mit unterschiedlichen Radien im Halbleitermaterial „a-Si:H“ (hydrogeniertes amorphes Silizium) als photovoltaische Absorptionsschicht. Je nach Einfallswinkel des Lichts kann so eine relative Absorptionssteigerung von 90 bis 200% erreicht werden, was vor allem für Dünnschicht-Solarzellen äußerst vielversprechend ist [27].

## 1.2 Unordnung durch Fertigungsfehler

Sowohl in der Natur als auch bei künstlich hergestellten photonischen Kristallen treten unweigerlich Abweichungen von der idealen Kristallinität auf. Obschon die Genauigkeit von Herstellungsprozessen im Bereich der Nanotechnologien gewachsen ist, spielen Abmessungsfehler, die häufig gaußverteilt sind, für die Leistungsfähigkeit photonischer Bauelemente noch immer eine Rolle [28]; Unregelmäßigkeiten in der Fertigung können zu unerwünschter Streuung führen. Theoretische Betrachtungen im Hinblick auf eindimensionale photonische Kristalle ergaben, dass zufällige Veränderungen der dielektrischen Konstante einzelner Schichten Auswirkungen auf die Transmission haben und diese bei starker Unordnung gegen Null strebt [29]. Innerhalb eines photonischen Wellenleiters aus Zylindern, angeordnet als zweidimensionales Quadratgitter, führen arbiträre Positionsänderungen zu einer zunehmenden Reduktion der Transmission mit steigendem Betrag der Verschiebungen; das zeigen Finite-Elemente-Rechnungen [30,31] und experimentelle Untersuchungen [32]. Berechnungen mittels Streutheorie („MST“, engl. „multiple scattering theory“) für einen Wellenleiter mit einem um  $90^\circ$  gebogenen Liniendefekt ergaben Transmissionverminderungen für Unordnung bzgl. der Zylinder-Positionen und der Radien, wobei die Oberfläche den größten Einfluss auf die Ergebnisse hat [33].



**Abbildung 1.7:** Wellenbild der Intensität des elektrischen Feldes für eine geordnete photonische Anordnung von Zylindern mit einem gebogenen Liniendefekt (links); der Radius liegt bei  $r = 0.3 a$ , ausgedrückt im Bezug auf die Gitterkonstante  $a$ . Rechts daneben ist die gleiche Struktur mit Unordnung bzgl. des Radius dargestellt; die Wellenlänge der Quelle liegt jeweils bei  $\lambda = 3.3 a$  [34].

Mittels Monte-Carlo-Methode konnten für ähnliche Strukturen zudem bereits die Einflüsse von Unordnung auf die Zylinderposition, den Radius, den Füllfaktor und den Brechungsindex studiert werden [34]. Im Wellenbild aus Abbildung 1.7 wird deutlich, wie Licht einer festen Wellenlänge den Wellenleiter ohne große Verluste durchqueren kann. Nach einer zufälligen Veränderung der einzelnen Zylinderradien treten hingegen hohe Transmissionsverluste auf. Auch für Wellenleiter aus Zylindern in hexagonaler Anordnung zeigten sich Transmissionsänderungen bei Verschiebungen der regulären Gitterpositionen [35].

### 1.3 Ziel der Arbeit

Im Vergleich zur Physik idealer photonischer Kristalle wurden reale Systeme bisher weitaus weniger theoretisch untersucht, obschon diese für den Vergleich mit dem Experiment besonders relevant sind. Rothammer et al. beschreiben jene Problematik wie folgt:

„Disorder and photonics have long been seen as natural adversaries and designers of optical systems have often driven systems to perfection by minimizing deviations from the ideal design. Especially in the field of photonic crystals and metamaterials but also for optical circuits, disorder has been avoided as a nuisance for many years. Understanding the implications of and tailoring disorder will provide quantum-optical systems which are amenable to mass fabrication as they will become as resilient against small fabrication imperfections as classical natural systems already are [36].“

Zum Erwerb eines besseren Verständnisses der Thematik widmet sich diese Arbeit der Untersuchung des Einflusses von Unordnung in zweidimensionalen photonischen Systemen. Ausgehend vom aktuellen wissenschaftlichen Kenntnisstand [29–35] sollen an einem konkreten System verschiedene Ansätze in einen neuen Kontext gestellt werden und zu einer einheitlichen Betrachtungsweise von Unordnung beitragen. Anhand von Anordnungen dielektrischer Zylinder im Quadratgitter wird getestet, inwieweit sich Unordnung bzgl. der regulären Gitterpositionen, der Radien, der dielektrischen Konstanten oder bzgl. Fehlstellen auf die Transmissionsspektren auswirkt und welche Mechanismen mögliche Veränderungen bestimmen. Von Interesse ist dabei vor allem der Übergang zwischen geordneten und amorphen photonischen Kristallen, da noch nicht klar ist, inwiefern beides ineinander übergeht. Im Hinblick auf Abweichungen von geordneten Systemen liegt der Schwerpunkt in der Literatur auf Wellenleitern, also Strukturen mit Liniendefekten, die z. T. gekrümmt sind. Die Auswirkungen von Unordnung auf zweidimensionale Wellenleiter wurde bzgl. Störungen der Zylinderpositionen [30, 34, 35] und Radien studiert [33]. Da ein entscheidender Aspekt dieser Arbeit die Erlangung eines grundsätzlichen Verständnisses von Unordnung ist, widmen wir uns allgemeineren Zylinder-Anordnungen ohne die Beschränkung auf allzu spezifische Strukturen dergleichen – ähnlich wie [31, 32]. Das zentrale Mittel der Analyse wird die Simulation von Transmissionsspektren darstellen – u. a. mit dem Ziel, spektrale Veränderungen im Bezug auf Modifikationen der Zylinder-Strukturen erklären zu können.



# 2 Grundlagen

## 2.1 Mathematische Beschreibung photonischer Kristalle

Photonische Kristalle sind räumlich periodisch angeordnete Strukturen aus mindestens zwei Materialien mit unterschiedlicher Brechzahl. Wenn die Periodizität einer solchen dielektrischen Struktur in  $i$  linear unabhängigen Raumrichtungen auftritt, spricht man von einem  $i$ -dimensionalen photonischen Kristall, welcher sich durch die Maxwellgleichungen

$$\operatorname{div} \mathbf{D} = \rho, \quad (2.1)$$

$$\operatorname{div} \mathbf{B} = 0, \quad (2.2)$$

$$\operatorname{rot} \mathbf{H} = \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} + \mathbf{j}, \quad (2.3)$$

$$\operatorname{rot} \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \quad (2.4)$$

beschreiben lässt. Die Größe  $\rho$  steht hier für die elektrische Ladungsdichte,  $c$  für die Vakuumlichtgeschwindigkeit und  $\mathbf{j}$  für die Stromdichte. Im Fall linearer isotroper Medien gilt für die elektrische und magnetische Feldstärke  $\mathbf{E}$  und  $\mathbf{H}$  der folgende Zusammenhang zur elektrischen und magnetischen Flussdichte  $\mathbf{D}$  und  $\mathbf{B}$ :

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}) = \mu(\mathbf{r}) \mathbf{H}(\mathbf{r}), \quad (2.5)$$

$$\mathbf{D}(\mathbf{r}) = \epsilon(\mathbf{r}) \mathbf{E}(\mathbf{r}). \quad (2.6)$$

Für den anisotropen Fall werden die dielektrische Funktion  $\epsilon(\mathbf{r}) = \epsilon_0 \epsilon_r(\mathbf{r})$  und die magnetische Leitfähigkeitsfunktion  $\mu(\mathbf{r}) = \mu_0 \mu_r(\mathbf{r})$  zu Tensorfeldern, was wir vernachlässigen. Da die hier betrachteten Materialien eine Bandlückenenergie haben, die weit über der Energie des sichtbaren Lichtes  $E = \hbar\omega$  liegt, vernachlässigen wir außerdem die Abhängigkeit der dielektrischen Funktion und der magnetische Leitfähigkeitsfunktion von der Frequenz  $\omega$ . Demzufolge ist auch die Absorption vernachlässigbar und der Imaginärteil der dielektrischen Funktion verschwindet. An einem festen Ort  $\mathbf{r}$  sind dann der Brechungsindex  $n = \sqrt{\epsilon_r}$  und die Permittivität  $\epsilon$  Konstanten. Die optische Brechzahl verkörpert im Übrigen das Verhältnis von Vakuumlichtgeschwindigkeit  $c$  und Lichtgeschwindigkeit  $c_M$  im Medium

$$n = \frac{c}{c_M} = \sqrt{\epsilon_r}. \quad (2.7)$$

Normiert man die Vakuumlichtgeschwindigkeit hingegen auf die Gruppengeschwindigkeit  $c_G$ , so erhält man den Gruppenbrechungsindex

$$n_G = \frac{c}{c_G}. \quad (2.8)$$

Ein wesentlicher Vorteil der Maxwellgleichungen liegt in ihrer Skaleninvarianz. Ein photonisches System lässt sich also mit einem bestimmten Faktor beliebig skalieren, ohne dass sich die photonischen Eigenschaften verändern. Natürlich ist für einen solchen Fall zu bedenken, dass auch die Wellenlänge angepasst werden muss. Für photonische Kristalle macht es deshalb allgemein Sinn, alle geometrischen Größen in Einheiten der Gitterkonstante  $a$  des Kristalls auszudrücken. Das gilt für jegliche Abmessungen einer gewählten photonischen Struktur sowie die Wellenlängen. Das Spektrum einer gewählten Struktur würde sich beispielsweise für eine beliebige Skalierung nicht verändern – natürlich unter der Voraussetzung, dass die dielektrische Konstante für den neuen Wellenlängenbereich unverändert bleibt und die Energie der Wellen weit unter der Bandlückenenergie liegt.

## 2.2 Photonische Bandstruktur

Ein photonischer Kristall zeichnet sich durch die periodische Änderung der Brechzahl und damit der dielektrischen Funktion aus, somit gilt

$$\epsilon(\mathbf{r}) = \epsilon(\mathbf{r} + \mathbf{R}). \quad (2.9)$$

Ein solcher Ausdruck sagt uns: Wenn wir einen Gitter-Vektor  $\mathbf{R}$  zu einem Raumvektor  $\mathbf{r}$  addieren, dann muss der Wert der dielektrischen Funktion immer gleich bleiben. Im Allgemeinen sind das elektrische und magnetische Feld Funktionen von Raum und Zeit. Die Tatsache, dass die Maxwellgleichungen linear sind, erlaubt eine Aufteilung der Felder in einen ortsabhängigen und einen harmonischen komplexen Zeitanteil

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}(\mathbf{r}) e^{-i\omega t}, \quad (2.10)$$

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

mit einer festen Frequenz  $\omega$  [37]. Die physikalischen Felder entsprechen dem Realteil dieser separierten Felder. Unter der für photonische Kristalle sinnvollen Annahme, dass die Ladungs- und Stromdichte verschwinden, vereinfachen sich die Maxwellgleichungen (2.3)

und (2.4) beim Einsetzen der Entwicklung (2.10) zu

$$\operatorname{rot} \mathbf{E}(\mathbf{r}) = \frac{i\omega}{c} \mu(\mathbf{r}) \mathbf{H}(\mathbf{r}), \quad (2.11)$$

$$\operatorname{rot} \mathbf{H}(\mathbf{r}) = -\frac{i\omega}{c} \epsilon(\mathbf{r}) \mathbf{E}(\mathbf{r}).$$

Da die meisten dielektrischen Materialien eine relative Permeabilität nahe eins aufweisen, lässt sich der Einfachheit halber  $\mathbf{B} = \mu_0 \mu_r \mathbf{H} \approx \mu_0 \mathbf{H}$  schreiben. Setzt man die beiden Maxwellgleichungen ineinander ein, ergibt sich eine Eigenwertgleichung bezüglich des elektrischen Feldes

$$\operatorname{rot} \operatorname{rot} \mathbf{E}(\mathbf{r}) = \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \epsilon(\mathbf{r}) \mathbf{E}(\mathbf{r}) \quad (2.12)$$

mit dem Eigenvektor  $\mathbf{E}(\mathbf{r})$  oder eine Gleichung ausschließlich im Bezug auf das magnetische Feld

$$\operatorname{rot} \frac{1}{\epsilon(\mathbf{r})} \operatorname{rot} \mathbf{H}(\mathbf{r}) = \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \mathbf{H}(\mathbf{r}) \quad (2.13)$$

mit dem Eigenvektor  $\mathbf{H}(\mathbf{r})$ . Beide Mastergleichungen besitzen den Eigenwert  $\omega^2/c^2$  und werden häufig auch als Helmholtz-Gleichungen bezeichnet. Sie liefern gemeinsam mit den Divergenzgleichungen (2.1) eine vollständige Beschreibung des jeweiligen Eigenvektors  $\mathbf{E}(\mathbf{r})$  oder  $\mathbf{H}(\mathbf{r})$ . Die mathematische Beschreibung photonischer Kristalle ist hier analog zum festkörperphysikalischen Problem eines Elektrons im periodischen Atompotential. Anstelle des Potentials steht für eine Photon die dielektrische Funktion, welche sich, Gleichung (2.9) entsprechend, periodisch ändert. Demnach lassen sich die Lösungen des Problems gemäß des Bloch-Theorems in der Form

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \mathbf{u}_k^E(\mathbf{r}), \quad (2.14)$$

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \mathbf{u}_k^H(\mathbf{r})$$

ausdrücken, wobei  $\mathbf{k}$  für den Bloch-Wellenvektor und  $\mathbf{u}_k(\mathbf{r}) = \mathbf{u}_k(\mathbf{r} + \mathbf{R})$  für die gitterperiodische Funktion steht. Durch Einsetzen des Bloch-Ansatzes in die Eigenwertgleichung (2.13) ergibt für das Beispiel des Magnetfeldes

$$(i\mathbf{k} + \nabla) \times \left[ \frac{1}{\epsilon(\mathbf{r})} (i\mathbf{k} + \nabla) \times \mathbf{u}_k^H(\mathbf{r}) \right] = \frac{\omega^2}{c^2} \mathbf{u}_k^H(\mathbf{r}). \quad (2.15)$$

Über die Entwicklung der dielektrischen und gitterperiodischen Funktionen in Fourierreihen können wir nun vom Realraum in den reziproken Raum übergehen. Für jedes  $\mathbf{k}$  erhält man so verschiedene Frequenzeigenwerte  $\omega_n(\mathbf{k})$ ; trägt man diese über mehrere  $\mathbf{k}$ -Werte auf, so erhält man eine Bandstruktur. An dieser lässt sich wiederum die Gruppengeschwindigkeit der elektromagnetischen Wellen über den Anstieg

$$v_G = \frac{c}{n_G} = \frac{\partial \omega}{\partial k} \quad (2.16)$$

ausrechnen. Die Ausbreitungsgeschwindigkeit  $c$  wird also bei einem hohen Gruppenbrechungsindex  $n_G$  abgeschwächt, was gleichbedeutend mit flachen Bändern ist.

## 2.3 Photonische Zustandsdichte

Die photonische Zustandsdichte beschreibt, wie viele Zustände Photonen pro Frequenz  $d\omega$  zur Verfügung stehen und lässt sich wie folgt definieren:

$$D(\omega) = \sum_n \int \delta(\omega - \omega_n(\mathbf{k})) d\mathbf{k}. \quad (2.17)$$

Nutzt man die Eigenschaft der Hintereinanderausführung der Delta-Distribution

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Phi(x) \delta(g(x)) dx = \sum_{i=1}^n \int_{-\infty}^{\infty} \Phi(x) \frac{\delta(x - x_i)}{|g'(x_i)|} dx = \sum_{i=1}^n \frac{\Phi(x_i)}{|g'(x_i)|}, \quad (2.18)$$

wobei  $x_i$  für die endliche Anzahl der Nullstellen der Funktion steht, so ergibt sich:

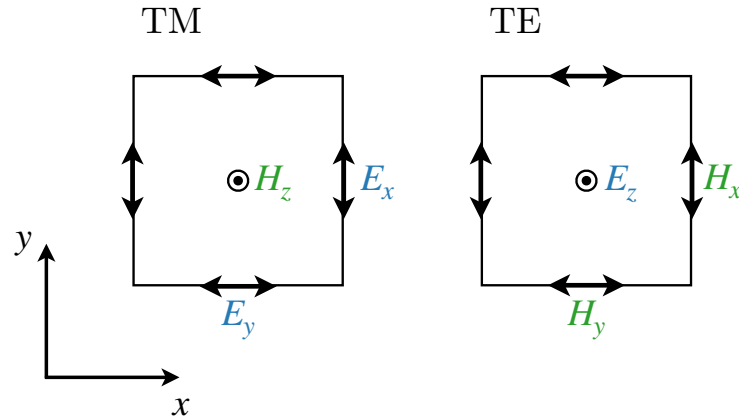
$$D(\omega) = \sum_n \left| \frac{d\omega}{dk_x} \right|_{\omega_n(k_x)=\omega}^{-1} = \frac{1}{v_G}. \quad (2.19)$$

Die Zustandsdichte erlaubt es also, auf die Geschwindigkeit der Photonen zu schließen. Photonen breiten sich nicht aus, wenn die Zustandsdichte unendlich oder stark verarmt bzw. Null ist. Oder anders ausgedrückt: wenn ein Photon viele Zustände zur Verfügung hat, wird es langsamer. Es sei erwähnt, dass diese Eigenschaft ausschließlich für eine Dimension gilt – also nur für einzelne Richtungen und nicht für den gesamten reziproken Raum.

## 2.4 Finite-Differenzen-Methode

Die zeitliche Finite-Differenzen-Methode (kurz: FDTD) bezeichnet ein Verfahren zur Lösung zeitabhängiger Differentialgleichungen durch Diskretisierung von Raum und Zeit; es wird hauptsächlich für die Maxwellgleichungen eingesetzt. Über das sogenannte Yee-Gitter erfolgt die Unterteilung der einzelnen Raumrichtungen in diskrete Punkte  $\mathbb{Y} \subset \mathbb{R}$  [38], sodass zu

jedem Zeitschritt die elektrische und magnetische Feldstärke in allen Punkten bekannt sind. Dieser Sachverhalt ist in Abbildung 2.1 gezeigt. Die spezielle Platzierung der Felder auf dem Gitter hat den Vorteil, dass man die numerische Rotation besonders effektiv berechnen kann.



**Abbildung 2.1:** Darstellung des zweidimensionalen Yee-Gitters mit der typischen Anordnung der elektrischen und magnetischen Vektorkomponenten [38].

Wie fein das Gitter ist, hängt von der Auflösung ab, die in Pixel pro Längeneinheit angegeben wird. Da die Raum- und Zeitdiskretisierung miteinander verknüpft sind, ändert sich die Rechenzeit bei einer Verdopplung näherungsweise mit  $2^{d+1}$ , was für eine zweidimensionale Zelle ( $d = 2$ ) einer Verachtfachung entspricht. Mit den einzelnen Zeitschritten werden schließlich die neuen  $\mathbf{E}$ - und  $\mathbf{H}$ -Feldwerte über die Rotation gemäß der Maxwellgleichungen (2.3) und (2.4) numerisch berechnet. Für die Simulationen in dieser Arbeit fand das FDTD-Paket MEEP Verwendung [39]. Einen detaillierteren Überblick zum eben beschriebenen Verfahren liefern beispielsweise die Quellen [40] und [41].

### 2.4.1 Erzeugung elektromagnetischer Wellen und Randbedingungen

Elektromagnetische Wellen werden in FDTD-Simulationen häufig über zeit- und ortsabhängige Ströme  $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$  erzeugt und lassen sich so in die Maxwellgleichungen einbeziehen. Üblicherweise vereinfacht man die Rechnungen durch die Separation der Stromdichte in einen Orts- und einen Zeitanteil. Neben elektrischen Strömen finden zur Wellenerzeugung auch fiktive magnetische Monopolströme Verwendung. Die Art und Richtung der Stromdichte wird für gewöhnlich über eine bestimmte Feldkomponente angegeben; in den Abbildungen 2.2 und 2.3 handelt es sich bspw. jeweils um eine  $E_y$ -Quelle, was bedeutet, dass die Wellen über einen infinitesimalen elektrischen Strom in  $y$ -Richtung erzeugt werden. So erhält man eine Punktquelle, die theoretisch keine Ausdehnung hat, während sich eine Linienquelle als Überlagerung von Punktquellen beschreiben lässt. Bei hinreichend vielen Punktquellen führt die Interferenz der resultierenden Wellen dazu, dass näherungsweise ebene Wellen entstehen. Eine solche Art von Welle mit der Amplitude  $A$ , die sich in Richtung des Wellenvektors  $\mathbf{k}$

mit der Frequenz  $\omega$  ausbreitet, kann wie folgt beschrieben werden:

$$\psi(\mathbf{r}, t) = A e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)}. \quad (2.20)$$

In den bevorstehenden Transmissionsrechnungen werden wir dielektrische Strukturen ausschließlich in  $x$ -Richtung untersuchen; eine Quelle mit einer Feldkomponente in dieser Richtung zu verwenden, ist aufgrund der geringen Intensität wenig zielführend, weshalb diese Quellkomponente auch in anderen Auseinandersetzungen nicht berücksichtigt wurde [42]. Dass die Intensität entlang der Richtung des Stroms am geringsten ausfällt, macht das Modell des Hertz'schen Dipols als Quelle elektromagnetischer Strahlung deutlich. Die Strahlungsinintensität  $I(\theta)$  kann in Fernfeldnäherung folgendermaßen berechnet werden [43]:

$$I(\theta) = \frac{\pi^2 \omega^4 p^2}{4\epsilon c^3} \sin^2 \theta. \quad (2.21)$$

Die mit der Frequenz  $\omega$  oszillierenden Ladungsträger verursachen das zum Strom parallele Dipolmoment  $\mathbf{p}$ . Im Fall eines Stromes in  $x$ -Richtung wäre nun der relativ zum Dipolmoment gemessene Winkel  $\theta$  Null und die Intensität somit minimal.

Für alle Rechnungen in dieser Arbeit wurde eine Gauß-Quelle verwendet, die sich über die Frequenzbreite  $\Delta f$  spezifizieren lässt. Diese Art der Quelle wird eigentlich über die Ableitung einer Gauß-Funktion definiert [44]:

$$\frac{\partial}{\partial t} g(t) = -\frac{1}{i\omega} \frac{\partial}{\partial t} e^{-i\omega t - \frac{(t-t_0)^2}{2\sigma^2}} = \left[ 1 + \frac{t-t_0}{i\omega\sigma^2} \right] e^{-i\omega t - \frac{(t-t_0)^2}{2\sigma^2}}, \quad (2.22)$$

wobei die verwendete Ableitung, dem Yee-Gitter entsprechend, diskret ist. Da aber die Standardabweichung  $\sigma$  umgekehrt proportional zur Frequenzbreite  $\Delta f$  des Pulses ist, kann der  $1/\sigma^2$ -Term aus der Ableitung für ausreichend große  $\Delta f$  vernachlässigt werden und es bleibt

$$\frac{\partial}{\partial t} g(t) \approx e^{-i\omega t - \frac{(t-t_0)^2}{2\sigma^2}}. \quad (2.23)$$

Laut dieser Gleichung steigt die Intensität der Quelle mit der Zeit an und klingt später langsam wieder ab. Die Fouriertransformation der Gauß-Funktion in den Frequenzraum ist bekannterweise ebenfalls gaußförmig, d. h. die Frequenzen eines zu berechnenden Spektrums haben unterschiedliche Amplituden; es existiert somit eine zentrale Frequenz, für welche die Amplitude am größten ist. Die beschriebene Näherung gemäß Gleichung (2.23) führt allerdings zu einer Verschiebung dieser zentralen Frequenz des Pulses: je größer die Frequenz ist, desto stärker wird auch der Fehler. Dass sich die zentrale Frequenz durch die Frequenzbreite somit nicht exakt festlegen lässt, spielt für die Berechnung von Transmissionspektren aufgrund der hohen Frequenzbreite allerdings keine allzu große Rolle. Der Vorteil einer Gauß-Quelle gegenüber einer monochromatischen Quelle mit nur einer Frequenz liegt im wesentlichen

geringeren Rechenaufwand, der für die Berechnung eines Spektrums anfällt. Nachteilig sind allerdings die numerischen Fehler an den Rändern des Pulses, welche durch die geringen Amplituden entstehen. Um diese zu verringern, wurde für alle Transmissionsspektren ein etwas größerer Frequenzbereich gewählt, als wir ihn in den Spektren sehen.

Nachdem wir uns nunmehr mit der Wellen-Erzeugung beschäftigt haben, bleibt noch die Frage nach den Randbedingungen. Eine sehr verbreitete Lösung für FDTD-Rechnungen offener Systeme bietet die Platzierung nicht-reflektierender Schichten an den Rändern der Simulationszelle [45]. Ein sog. „PML“ (Abkürzung für engl. „perfectly matched layer“) absorbiert in unserem Fall die von der Quelle ausgehenden elektromagnetischen Wellen – und das ohne nennenswerte Reflexionen bei hinreichend hoher Auflösung. Dies wird über eine Transformation der Ortsableitungen in den Differentialoperatoren der Maxwellgleichungen erreicht.

## 2.4.2 Berechnung von Transmissionsspektren

Eine beliebte Anwendung der FDTD-Methode stellt die Berechnung von Transmissionsspektren dar, welche die photonischen Eigenschaften eines Systems charakterisieren. Sie eignen sich zudem besonders gut für den Vergleich zwischen Theorie und Experiment. Die hierfür entscheidende Größe, der Transmissionsgrad  $T$ , wird wie folgt definiert:

$$T = \frac{\mathcal{P}_T}{\mathcal{P}_0}. \quad (2.24)$$

Wir können also einiges über eine photonische Struktur lernen, wenn wir den Anteil des Lichtes  $\mathcal{P}_T$  kennen, der durch sie transmittiert wird – zusammen mit der von der Quelle ausgehende Eingangsleistung  $\mathcal{P}_0$ . Mit Hilfe des Integrals über den Poynting-Vektor

$$\mathbf{S} = \mathbf{E} \times \mathbf{H} \quad (2.25)$$

multipliziert mit dem Normalenvektor  $\boldsymbol{\nu}$  der betrachteten Fläche, erhält man schließlich die Leistung  $\mathcal{P}(t)$ . Da man für Reflexions- und Transmissionsspektren jedoch die Leistungsverhältnisse über der Frequenz benötigt, werden  $\mathbf{E}$  und  $\mathbf{H}$  fouriertransformiert [46]:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_\omega(\omega) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \mathbf{E}(t) e^{i\omega t} dt, \\ \mathbf{H}_\omega(\omega) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \mathbf{H}(t) e^{i\omega t} dt. \end{aligned} \quad (2.26)$$

Für die numerische Berechnung müssen die Fourier-Integrale diskretisiert werden, sodass über  $n$  Zeitschritte summiert wird:

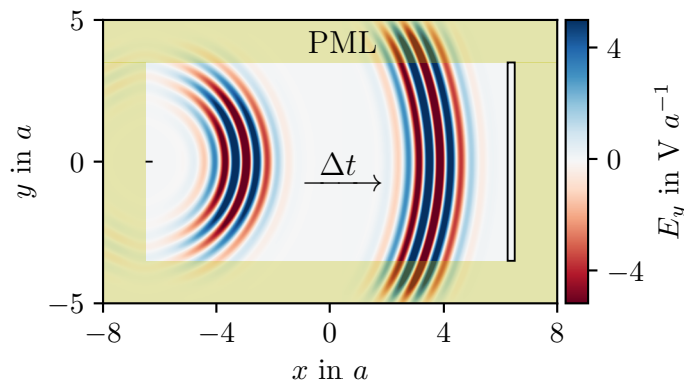
$$\mathbf{E}_\omega(\omega) \approx \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_n \mathbf{E}(n\Delta t) e^{i\omega n\Delta t} \Delta t, \quad (2.27)$$

$$\mathbf{H}_\omega(\omega) \approx \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_n \mathbf{H}(n\Delta t) e^{i\omega n\Delta t} \Delta t.$$

So kann schließlich die Leistung berechnet werden:

$$\mathcal{P}(\omega) = \text{Re} \left( \boldsymbol{\nu} \cdot \int \mathbf{E}_\omega(\mathbf{r})^* \times \mathbf{H}_\omega(\mathbf{r}) d^2\mathbf{r} \right). \quad (2.28)$$

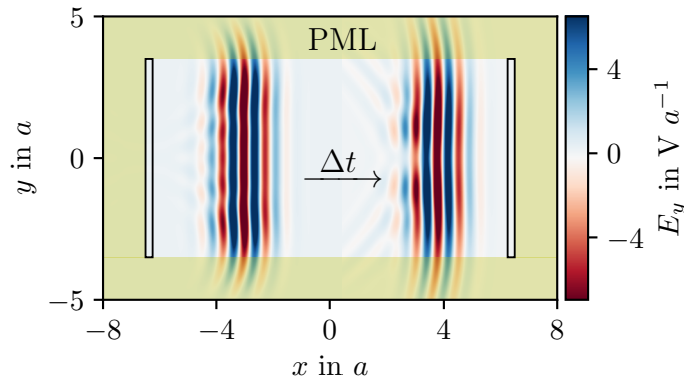
Da für die Berechnung des Transmissionsgrades die transmittierte Leistung laut Gleichung (2.24) auf die Eingangsleistung normiert werden muss, sind zwei getrennte Simulationen erforderlich: eine mit und eine ohne Struktur. Abbildung 2.2 zeigt die von PML's umgebene Zelle einer Simulation mit Punktquelle bei  $x = -7.2a$ . Wellen breiten sich hier von links nach rechts zum Transmissionsgebiet hin aus, welches direkt vor der PML-Schicht bei  $x = 7.2a$  liegt. In diesem Bereich wird die Leistung gemäß Gleichung (2.28) ermittelt. Es handelt sich hier um die Berechnung der Eingangsleistung  $P_0$ , weil keine photonische Anordnung vorhanden ist. Die allseitige Ausbreitung der Wellen wurde für zwei feste Zeitpunkte  $t = 6.8a/c$  und  $t = 13.6a/c$  dargestellt; dazwischen verging die Zeit  $\Delta t$ .



**Abbildung 2.2:** Simulationszelle ohne photonische Struktur mit einer Punktquelle (links) und dem Transmissionsgebiet (rechts). Innerhalb der Zelle ist die Komponente der Quelle,  $E_y$ , dargestellt.

Abbildung 2.3 zeigt noch den analogen Fall – diesmal für eine Linienquelle. Die Wellenausbreitung ist wieder zu den gleichen zwei festen Zeitpunkten innerhalb der Simulationszelle gezeigt. Die Wellenfronten entsprechen, wie bereits erwähnt, näherungsweise ebene Wellen, wobei es zu leichten Abweichungen durch Randeffekte an den PML's kommt.





**Abbildung 2.3:** Simulationszelle ohne photonische Struktur mit einer Linienquelle (links) und dem Transmissionsgebiet (rechts). Innerhalb der Zelle ist die Komponente der Quelle,  $E_y$ , dargestellt.

## 2.5 Polarisationsrichtungen

Weil wir uns in dieser Arbeit auf zweidimensionale Strukturen beschränken, verkörpert die  $xy$ -Ebene gerade die Periodizitätsebene. Unter Ausschluss von Feldkomponenten in  $x$ -Richtung bleiben für die Definition von Moden nur zwei Polarisationsrichtungen übrig und man spricht typischerweise von transversal-elektrischen (TE) und transversal-magnetischen (TM) Moden, wobei sich deren Definition in der Literatur unterscheidet. Für diese Arbeit soll folgendes gelten:

Ist das elektrische Feld parallel zur  $z$ -Richtung, so handelt es sich um TE-Moden. Die Rotation des  $E$ -Feld-Vektors im Induktionsgesetz (2.4) bewirkt, dass das Magnetfeld in der  $xy$ -Ebene liegt:

$$\mathbf{E}_{\text{TE}} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ E_z \end{pmatrix}, \quad \mathbf{H}_{\text{TE}} = \begin{pmatrix} H_x \\ H_y \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (2.29)$$

Aus diesem Grund kommen ausschließlich  $E_z$  oder  $H_y$  als Komponenten der Quelle infrage. Ist jedoch das magnetische Feld parallel zur  $z$ -Richtung, so handelt es sich um TM-Moden. Solche sind in den Abbildungen 2.2 und 2.3 zu sehen. Durch das Kreuzprodukt im Durchflutungsgesetz (2.3) koppeln nun die  $x$ - und  $y$ -Komponenten des elektrischen Feldes:

$$\mathbf{E}_{\text{TM}} = \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{H}_{\text{TM}} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ H_z \end{pmatrix}, \quad (2.30)$$

und es kommen nur noch  $E_y$  oder  $H_z$  als Quell-Komponenten für diese Art von Moden infrage.

# 3 Ergebnisse

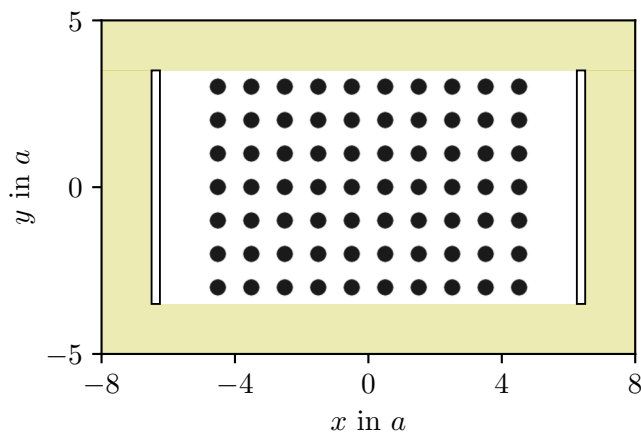
## 3.1 Transmissionsspektren für geordnete Gitter

### 3.1.1 Quadratgitter

Für die noch folgenden Untersuchungen soll eine Anordnung von dielektrischen Zylindern im Quadratgitter als Referenzstruktur dienen. Ausgehend von dieser geordneten Struktur wollen wir später Unordnung definieren und die Auswirkungen auf die photonischen Eigenschaften studieren. Abbildung 3.1 zeigt die dielektrische Funktion innerhalb der Simulationszelle, welche alle Punkte des numerischen Yee-Gitters  $\mathbb{Y}$  auf dielektrische Konstanten  $\epsilon_r$  abbildet. Ihr Wert in  $x$ - und  $y$ -Richtung schwankt periodisch zwischen  $\epsilon_Z = 12$  für die Zylinder und  $\epsilon_D = 1$  für die Menge der Punkte  $\mathbb{D}$  des Dispersionsmediums, es gilt:

$$\epsilon : \mathbb{Y}^2 \subset \mathbb{R}^2 \rightarrow \{\epsilon_D, \epsilon_Z\}, \quad (x, y) \mapsto \begin{cases} \epsilon_D = 1 : & x, y \in \mathbb{D} \\ \epsilon_Z = 12 : & x, y \notin \mathbb{D} \end{cases} . \quad (3.1)$$

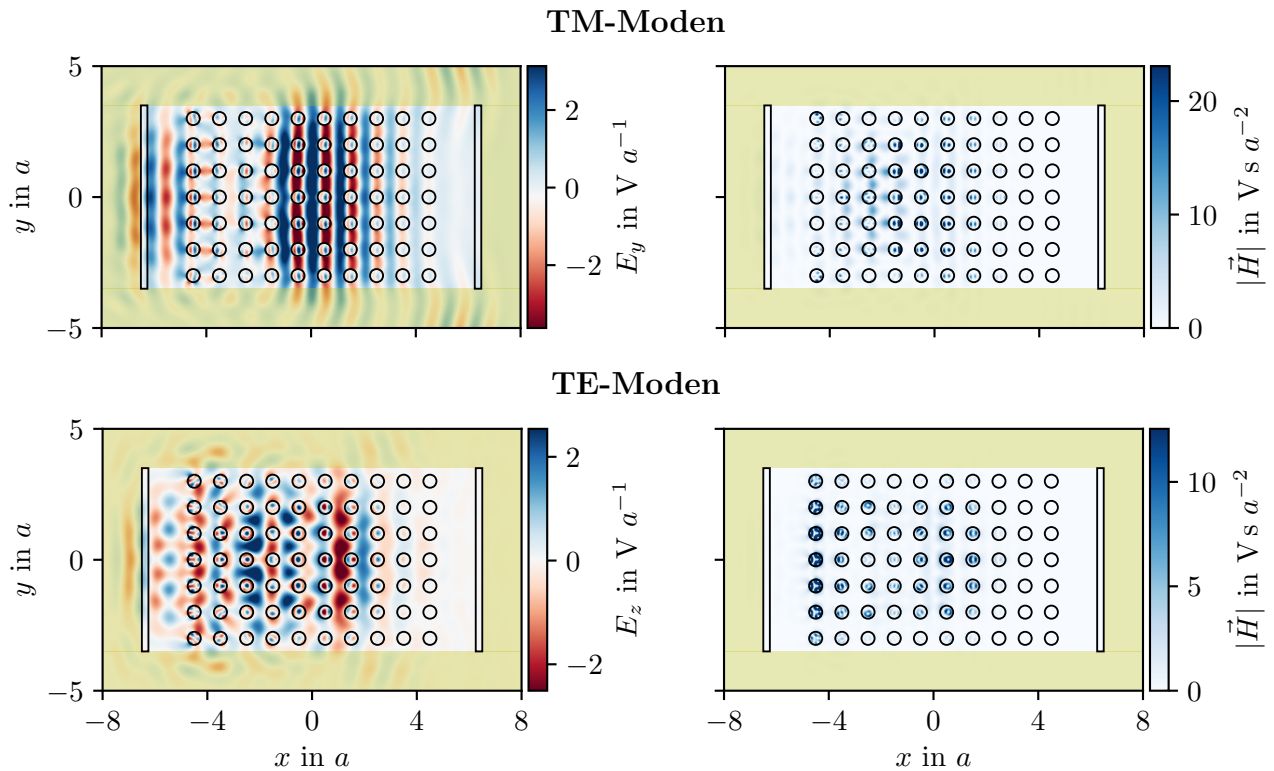
In  $z$ -Richtung wird die Zelle als unendlich ausgedehnt behandelt, weshalb die für die Simulation relevanten Parameter nicht von  $z$  abhängen und demnach alle partiellen Ableitungen  $\partial/\partial z$  verschwinden. Links neben bzw. vor der Struktur befindet sich die zwischen den PML's ausgedehnte Linienquelle, welche einen zeitlichen Gauß-Puls gemäß Gleichung (2.23) mit einem Wellenlängenbereich von  $(a - r)$  bis  $(2a + r)$  erzeugt. Die Erweiterung des Wellenlängenbereiches um  $2r$  hat allerdings keine Auswirkungen auf den Spektralbereich der Transmission, welcher unabhängig davon zwischen  $a$  und  $2a$  liegt. Hingegen werden auf diese Weise, wie bereits erwähnt, Fehler an den Rändern der Spektren verringert.



**Abbildung 3.1:** Anordnung von Zylindern im Quadratgitter mit der Gitterkonstante  $a$  und einem Zylinderradius von  $r = a/4$ ; die Zelle ist zudem vom nicht-reflektierenden Absorptionsschichten (kurz: PML's) umgeben.

So wird schließlich die Wellenausbreitung durch die Struktur simuliert und die am Ende übrige Leistung im gekennzeichneten Bereich hinter der Struktur berechnet. Für die späteren FDTD-Rechnungen erfolgt stets die Einteilung der Zelle in ein Yee-Gitter mit einer Auflösung von 250 Pixeln/ $a$ .

Wie sich die erzeugten Wellen in der Simulationszelle verhalten, wird besonders durch Wellenbilder – also die Darstellung bestimmter Feldkomponenten bzw. Kombinationen dieser – anschaulich. Es handelt sich dabei um den festgelegten Zeitpunkt  $t = 60 a/c$ , in welchem die elektrischen und magnetischen Felder gespeichert werden. In Abbildung 3.2 sind solche Darstellungen innerhalb der Simulationszelle für TM-Moden abgebildet; zudem ist die betrachtete Struktur eingezeichnet. Das linke Wellenbild enthält stets die Komponente, welche für die Quelle gewählt wurde (hier  $E_y$ ), derweil das rechte Bild den Betrag des magnetischen Feldes zeigt.



**Abbildung 3.2:** Anordnung von Zylindern mit dem Radius  $r = a/4$  im Quadratgitter. Innerhalb der Simulationszelle ist die Komponente der Quelle (links) und der Betrag des Magnetfeldes (rechts) für den Fall von TM- und TE-Moden dargestellt.

Wählt man  $E_z$  als Komponente der Quelle – was laut Definition TE-Moden ergibt – so gilt gemäß Gleichung (2.29) der Zusammenhang  $|\mathbf{E}|^2 = E_z^2$ . Abgesehen von der Farbskala mit negativen Feldwerten sind das elektrische und magnetische Feld in Abbildung 3.2 gut vergleichbar.

Allein aus den Wellenbildern aus Abbildung 3.2 der elektrischen Feldkomponenten lässt sich bereits einiges schlussfolgern. Es fällt auf, dass die Wellenfronten der elektrischen Feldkomponente für TM-Moden Ähnlichkeiten zu ebenen Wellen aufweisen. Vor allem Wellenberge und Wellentäler im Bereich des Zylinderdurchmessers scheinen die Struktur ohne große Interferenz-Verluste zu durchqueren. Es handelt sich dabei um Wellen, deren Wellenlängen bei etwas über  $\lambda \approx 4r = a$  liegen; für diese können wir aus Sicht der Wellenbilder eine hohe Transmission durch die Struktur erwarten. Für die TE-Moden sind die Wellenfronten wesentlich weniger eben – hingegen sind Interferenzmuster zu sehen, was besonders schön zwischen Quelle und Anordnung identifizierbar ist und letztlich auf Bragg-Reflexionen hindeutet. Aus dem Grund darf für die TM-Moden insgesamt ein wesentlich glatteres Transmissionsspektrum erwartet werden als für die TE-Moden, da es zu weniger Bragg-Reflexionen an den Zylindern kommt.

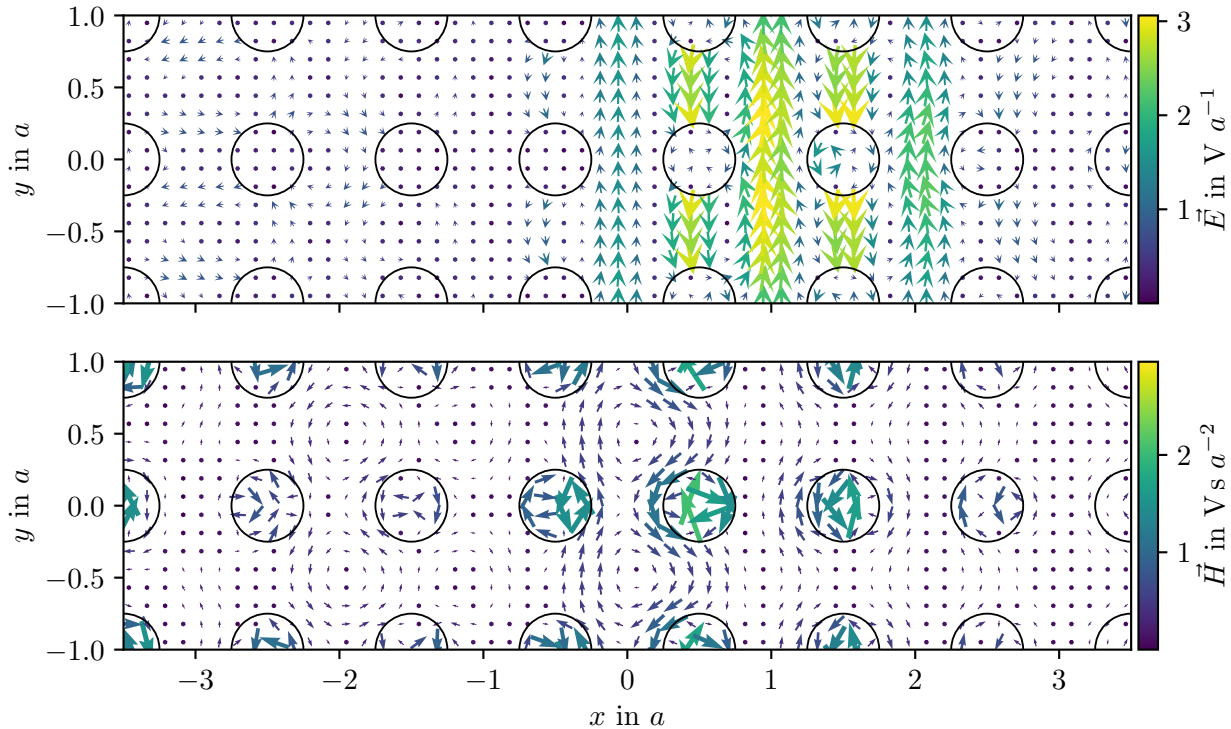
Neben einer elektrischen Feldkomponente sind in Abbildung 3.2 noch die magnetischen Feldbeträge aufgeführt. Offenkundig ist, dass das Magnetfeld für beide Moden die höchsten Amplituden in den Zylindern aufweist; außerhalb der Zylinder ist faktisch kaum Feld vorhanden – ganz anders als bei den elektrischen Feldkomponenten. Es stellt sich also die Frage, warum die beiden Felder strukturell derart verschieden sind. Eine Antwort bietet das Durchflutungsgesetz (2.3) für Dielektrika mit näherungsweise  $\mathbf{j} = 0$ :

$$\operatorname{rot} \mathbf{H} = \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} = \epsilon(x, y) \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}, \quad (3.2)$$

Da das magnetische Feld innerhalb eines Zeitschrittes in der FDTD-Simulation aus dem elektrischen Feld berechnet wird, gewinnt der Beitrag der dielektrischen Funktion  $\epsilon(x, y)$  an Bedeutung: die Rotation des  $\mathbf{H}$ -Feldes wird in den Zylindern um einen Faktor zwölf höher, da in diesen  $\epsilon_z = 12$  gilt; das erklärt die strukturellen Unterschiede zwischen dem elektrischen und magnetischen Feld.

Weil die  $z$ -Komponente des Magnetfeldes für TE-Moden den Wert Null hat, eröffnet sich die Möglichkeit, das Feld in der  $xy$ -Ebene in Form eines Vektorbildes darzustellen; Abbildung 3.3 zeigt dabei einen Ausschnitt in der Mitte der Simulationszelle. Im Gegensatz zur Darstellung des Feldbetrages aus Abbildung 3.2 ist die Struktur des Magnetfeldes nun besser erkennbar und das bisher Erläuterte bestätigt sich: es bilden sich, wie erwartet, Wirbel aus. Besonders gut ist das Genannte zwischen den Zylindern zu sehen, wenngleich sich auch in den Zylindern solche Wirbel befinden, die gemäß Gleichung (3.2) aus der zeitlichen Änderung des elektrischen Feldes entspringen. Der Einfluss der dielektrischen Funktion  $\epsilon(x, y)$  macht sich durch die hohe magnetische Wirbeldichte  $\operatorname{rot} \mathbf{H}$  in den Zylindern im Gegensatz zu jenen im Dispersionsmedium bemerkbar.

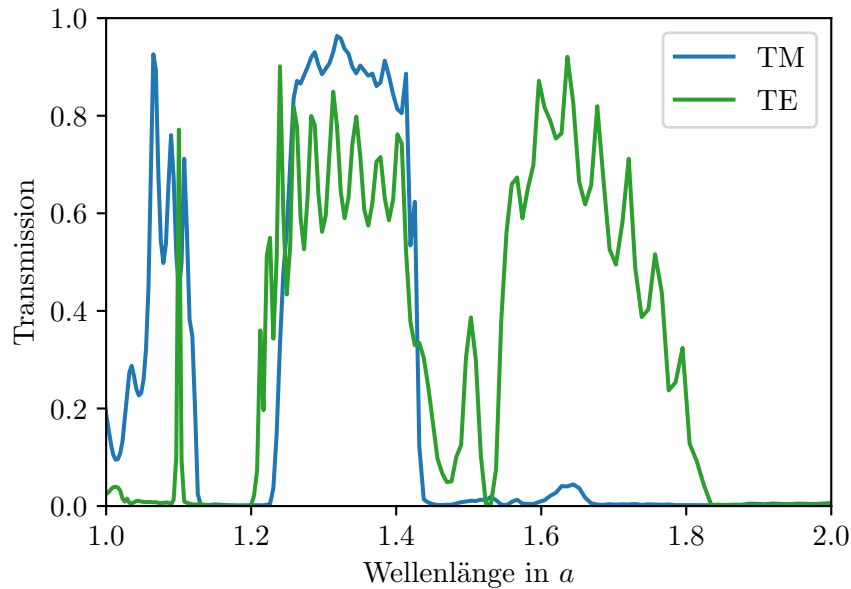
Des weiteren befindet sich in Abbildung 3.3 auch das elektrische Feld für den Fall von TM-Moden mit  $E_z = 0$ . Anders als beim Magnetfeld für TE-Moden sind die Beträge in den Zylindern nun viel geringer als im Dispersionsmedium. Die Ursache hierfür lässt sich diesmal allerdings nicht wie für das  $\mathbf{H}$ -Feld bei TE-Moden auf die jeweilige Maxwellgleichung



**Abbildung 3.3:** Zwei Ausschnitte aus der Simulationszelle für eine Anordnung von Zylindern mit dem Radius  $r = a/4$  im Quadratgitter. Eingezeichnet sind die Feldvektoren einmal für TM-Moden mit  $E_z = 0$  (oben) und einmal mit  $H_z = 0$  für TE-Moden (unten).

zurückführen, da die Permeabilitätsfunktion als Konstante genähert wurde und somit das Induktionsgesetz (2.4) mit  $\text{rot } \mathbf{E} = -\partial \mathbf{H} / \partial t$  gilt. Das besagte Phänomen entsteht durch eine gänzlich andere Ursache und hat nichts mit den magnetischen Materialeigenschaften zu tun – stattdessen abermals mit den dielektrischen: Wenn ein  $\mathbf{E}$ -Feld auf ein anderes Medium trifft, so gehen die Feldvektoren parallel zur Grenzfläche stetig mit  $\mathbf{E}_{1\parallel} = \mathbf{E}_{2\parallel}$  ineinander über. Bei senkrechtem Eintritt gilt hingegen  $\mathbf{D}_{1\perp} = \mathbf{D}_{2\perp}$  und die dielektrische Funktion spielt eine Rolle. Für den hier relevanten Fall der Zylinder-Anordnung heiße das  $\epsilon_D \mathbf{E}_{D\perp} = \epsilon_Z \mathbf{E}_{Z\perp}$ . Der Betrag der Feldvektoren im Dispersionsmedium muss deshalb für den hier betrachteten Fall gerade zwölfmal größer sein als in den Zylindern. Da die Feldvektoren im Fall der TM-Moden im Dispersionsmedium auffällig konsistent parallel zur  $y$ -Richtung mit der Zeit oszillieren, zeigt sich schnell, dass die Vektoren in guter Näherung senkrecht auf die Grenzfläche zwischen Dispersionsmedium und Zylindern treffen.

Und noch ein weiterer Erkenntnis kann aus den Vektor-Darstellungen gezogen werden: beim Vergleich zwischen beiden Moden zeigt sich, dass die Ausbreitungsgeschwindigkeit der TM-Moden größer sein muss als die der TE-Moden. Da die Wellenbilder zum gleichen Zeitpunkt aufgenommen wurden, müssten die Wellenfronten bei gleicher Geschwindigkeit auf gleicher Höhe bzgl.  $x$  liegen, was in der Tat nicht der Fall ist.



**Abbildung 3.4:** Transmission für TM- und TE- Moden für eine Anordnung von Zylindern mit dem Radius  $r = a/4$  im Quadratgitter.

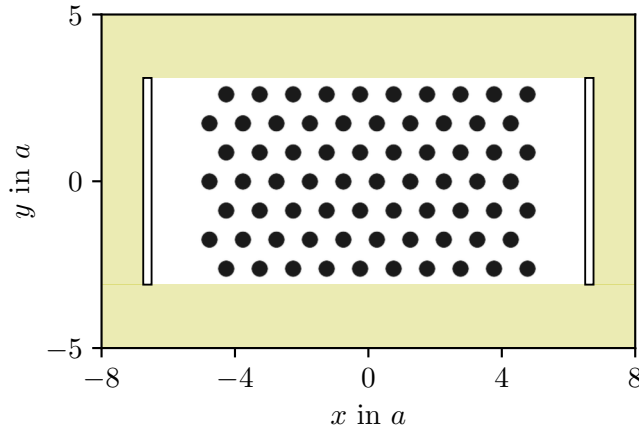
Die beiden resultierenden Transmissionen sind nun in Abbildung 3.4 über der Wellenlänge dargestellt, die zwecks Betonung der Skalierbarkeit des Systems in Einheiten der Gitterkonstante angegeben ist. Wollte man die Quadratgitter-Struktur im festgelegten Spektralbereich experimentell mit sichtbarem Licht untersuchen, so könnte man die Gitterkonstante bspw. auf  $a = 4r = 400$  nm setzen, was in einen Wellenlängenbereich zwischen 400 und 800 nm resultieren würde. Bei einer Skalierung der Struktur auf  $a = 4r = 1$  m läge das Spektrum im Bereich der UKW-Strahlung.

Um Wellenlängen von etwas unter 1.2 Gitterkonstanten finden wir sowohl für TM- als auch TE-Moden eine Bandlücke vor; im zugehörigen Wellenlängenbereich kann die Struktur nicht durchquert werden, da die Ausbreitung gemäß der Bandstruktur verboten ist und die Transmission somit Null wird. Ähnliches tritt oberhalb von  $1.45a$  auf, allerdings nur für TM-Moden. Für diese liegt außerdem ein Transmissionsmaximum für Wellenlängen mit  $\lambda \approx 4r = a$  vor, welcher sich durch das Wellenbild der elektrischen Feldkomponente aus Abbildung 3.2 erklären lässt. Erwartungsgemäß weist das Spektrum der TM-Moden zudem wesentlich geringere strukturelle Schwankungen der Transmission auf – es kommt also zu weniger Bragg-Reflexionen an den Konstituenten.

### 3.1.2 Hexagonales Gitter

Im Vergleich zur Quadratgitter-Anordnung sehen wir in Abbildung 3.5 noch die dielektrische Funktion (3.1) einer hexagonalen Struktur aus dielektrischen Zylindern. Ausgehend vom Quadratgitter erfolgte eine Verschiebung von drei Reihen um  $a/2$  in  $x$ -Richtung, während der Abstand zwischen den Reihen in  $y$ -Richtung auf  $\sqrt{3}a/2$  reduziert wurde. Abgesehen davon

bleiben alle restlichen Parameter, d.h. der Radius  $r$ , die Gitterkonstante  $a$ , die dielektrische Konstante der Zylinder  $\epsilon_Z$  und die des Dispersionsmediums  $\epsilon_D$  unverändert.

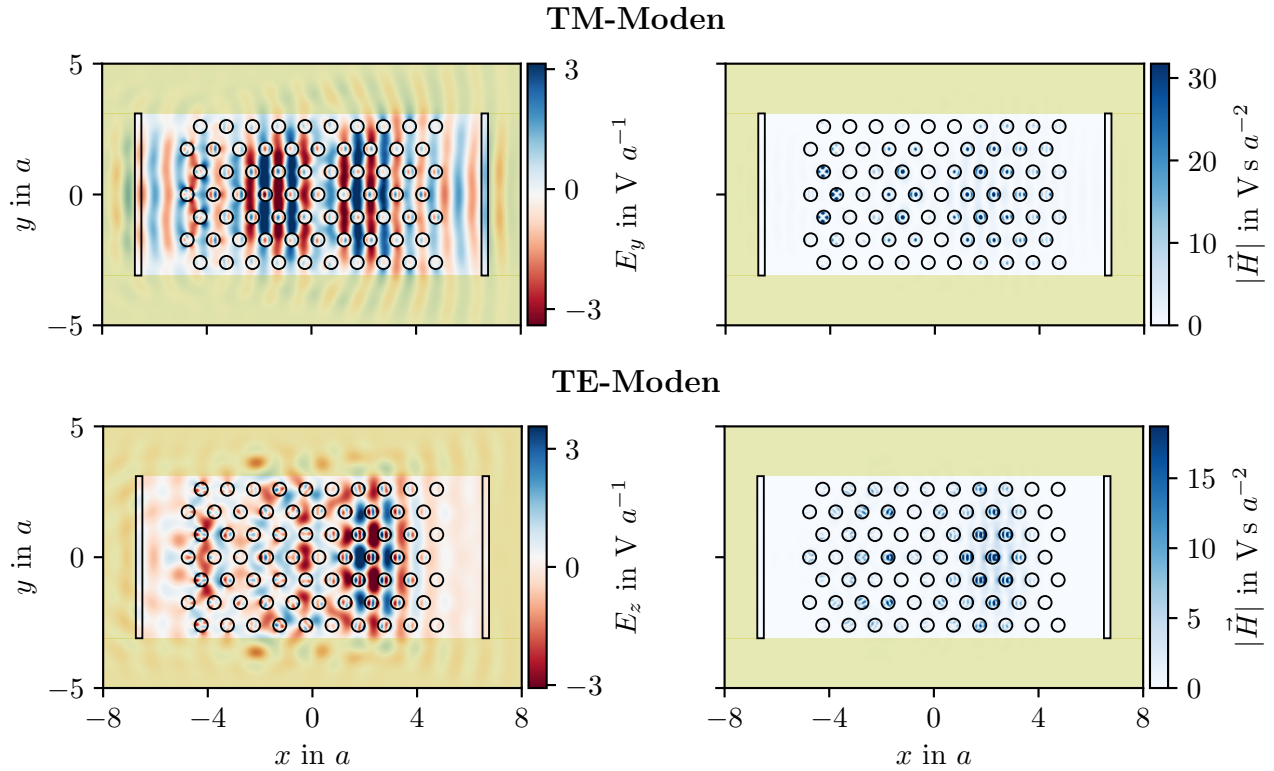


**Abbildung 3.5:** Anordnung von Zylindern im hexagonalen Gitter mit der Gitterkonstante  $a$  und dem Zylinderradius  $r = a/4$ ; die Zelle ist zudem vom nicht-reflektierenden Absorptionsschichten (kurz: PML's) umgeben.

Genau wie in den bisherigen Rechnungen gehen elektromagnetische Wellen auch hier aus einer Linienquelle hervor, die sich links vor der Struktur befindet, während die Transmission im gekennzeichneten Bereich hinter der Zylinder-Anordnung berechnet wird. Dabei ist allerdings zu beachten, dass jene Bereiche keine nennenswerte Ausdehnung in  $x$ -Richtung aufweisen; die Ausdehnung in  $y$  liegt auch hier zwischen den PML's und in  $z$ -Richtung wird zumindest im theoretischen Sinn eine unendliche Länge angenommen.

Vergleicht man die Wellenbilder in Abbildung 3.6 mit denen für die Quadratgitter-Anordnung, so fällt auf, dass die grundsätzlichen Unterschiede zwischen den beiden Moden bestehen bleiben. Genau wie beim Quadratgitter finden wir einen wesentlichen Gegensatz zwischen den Wellenbildern der elektrischen Feldkomponente vor: Während für TM-Moden Wellenfronten erkennbar sind, kommen für TE-Moden Interferenzeffekte wesentlich stärker zum Tragen. Wenig überraschend gibt es natürlich auch Unterschiede zum Quadratgitter. Im Wellenbild für TM-Moden sind die Wellenfronten im hexagonalen Gitter in  $y$ -Richtung weniger und obendrein entlang der Struktur unterschiedlich stark ausgedehnt. Somit wird der verlustarme Transport der bereits beschriebenen Wellenfronten mit  $\lambda \approx 4r$  abgeschwächt, was sich in der Transmission widerspiegeln dürfte. Für TE-Moden gilt ähnliches; ferner laufen die Fronten teilweise diagonal durch die Struktur.

Wie sich in Abbildung 3.7 zeigt, stimmen die Transmissionen der Moden besser überein als im Fall des Quadratgitters. So existiert um die Wellenlänge  $\lambda = 1.6a$  nun keine Bandlücke mehr für TM-Moden und die Abweichungen zwischen beiden Moden fallen in beschriebenen Bereich gering aus. Neben zahlreichen Unterschieden im Vergleich zu den Transmissionsspektren des Quadratgitters findet sich eine erstaunliche Gemeinsamkeit: das



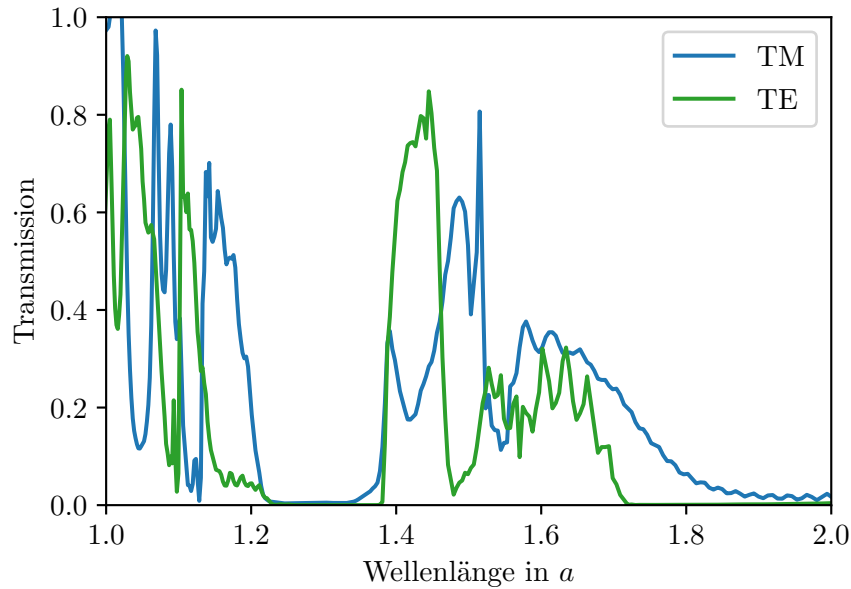
**Abbildung 3.6:** Anordnung von Zylindern mit dem Radius  $r = a/4$  im Quadratgitter. Innerhalb der Simulationszelle ist die Komponente der Quelle (links) und der Betrag des Magnetfeldes (rechts) für den Fall von TM-Moden dargestellt.

Maximum bei etwa  $1.0655 a$  für TM-Moden stimmt für beide Zylinder-Anordnungen gut überein. Abbildung 3.8 zeigt jenes Maximum in einem engeren Wellenlängenbereich für beide Strukturen; es wird so die frappierende Übereinstimmung deutlich. Die bereits diskutierten Wellen mit  $\lambda \approx 4r = a$  können die photonische Anordnung verlustarm durchqueren und sind vermutlich für das dreigeteilte Maximum verantwortlich. So liegt die Vermutung nahe, dass der Zylinderradius für das besagte Maximum eine wesentliche Rolle spielt, weil diese geometrische Größe sowohl für das Quadratgitter als auch für das hexagonale Gitter identisch ist. Der Zylinder-Abstand unterscheidet sich hingegen in  $y$ -Richtung zwischen beiden Strukturen und kommt deshalb eher nicht infrage. Vermutlich hängt der Transport von Wellenlängen bei etwas über  $a \approx 4r$  nur geringfügig von der Position der Zylinder ab, während die Maße der Zylinder einen entscheidenderen Einfluss haben.

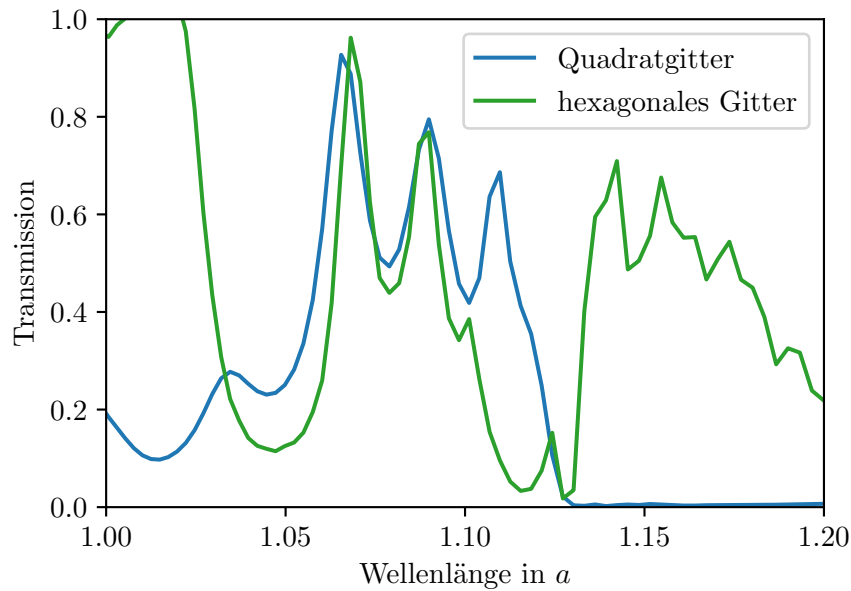
Bei genauerer Betrachtung des Spektrums für TM-Moden können wir ein Problem identifizieren: am linken Rand liegt die Transmission über Eins. Aus physikalischer Sicht stellt das kein sinnvolles Ergebnis dar, da es voraussetzt, dass die transmittierte Leistung  $\mathcal{P}_T$  die einfallende Leistung  $\mathcal{P}_0$  übertrifft – was indes gegen die Energieerhaltung verstößt! Derartige Artefakte sind auf numerische Fehler zurückzuführen, die gerade an den Rändern der Spektren am signifikantesten sind, da die Intensität der Quelle gemäß der Gauß-Kurve dort am geringsten



ausfällt. Für den weiteren Verlauf der Arbeit werde ich mich u. a. deshalb ausschließlich auf Quadratgitter beschränken.



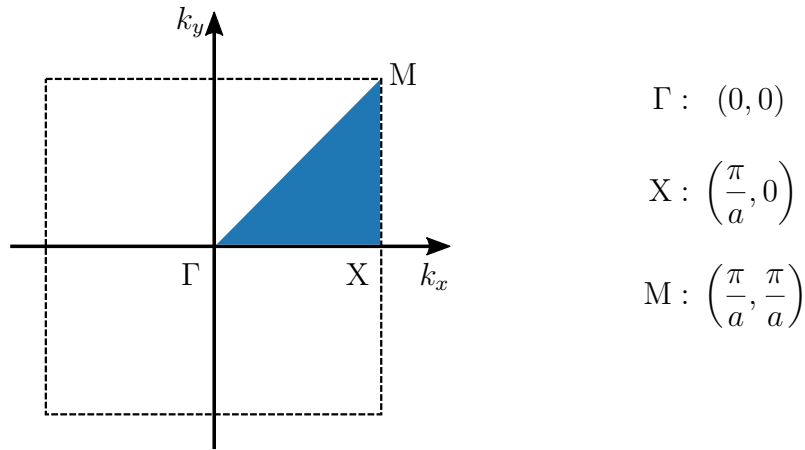
**Abbildung 3.7:** Transmission für TM- und TE- Moden an einem hexagonalen Gitter mit der Gitterkonstante  $a$  und einem Zylinderradius von  $r = a/4$ .



**Abbildung 3.8:** Vergleich der Transmission für TM-Moden in einem Ausschnitt des eigentlichen Wellenlängenbereichs am Quadratgitter und an einem hexagonalen Gitter – jeweils mit der Gitterkonstante  $a$  und dem Zylinderradius  $r = a/4$ .

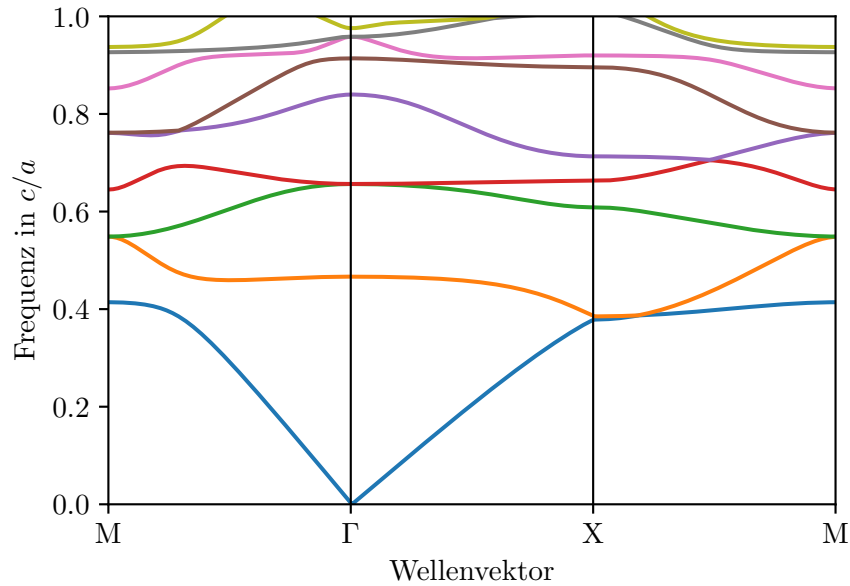
## 3.2 Bandstruktur, Zustandsdichte und Transmission

Wir kommen nun zum Grenzfall des unendlichen Gitters. Bis jetzt haben wir nicht getestet, inwiefern die Finitheit der gewählten Struktur das Ergebnis beeinflusst. Optimal wäre eine gute Übereinstimmung der Transmissionsspektren mit der Theorie unendlich ausgedehnter Kristalle [47]. Für ein ideales zweidimensionales Quadratgitter aus Kreisen mit dem Abstand  $a$  und dem Radius  $r = a/4$  erhält man durch Lösung der Eigenwertgleichung (2.13) die in Abbildung 3.10 dargestellte Bandstruktur. Hierfür wurden die Frequenzen von Null bis  $c/a$  über einem Pfad zwischen den drei Symmetriepunkten, die in Abbildung 3.9 zu sehen sind, aufgetragen. So wird deutlich, welche Frequenzen die periodische Struktur für einen festgelegten Wellenvektor  $\mathbf{k}$  bzw. einen bestimmten Winkel durchqueren dürfen.



**Abbildung 3.9:** Pfad im reziproken Raum zwischen drei Symmetriepunkten, welcher für die Bandstruktur gewählt wurde; farbig gekennzeichnet ist die reduzierte Brillouin-Zone.

Es sei darauf hingewiesen, dass der in dieser Arbeit spektral untersuchte Wellenlängenbereich in der Bandstruktur inbegriffen ist und dem Frequenzbereich zwischen 1.0 und 0.5  $c/a$  entspricht. Die  $\mathbf{k}$ -Vektoren werden auf Frequenzen und nicht auf Wellenlängen abgebildet, da dadurch der lineare Verlauf des ersten Energiebandes nahe des  $\Gamma$ -Punktes deutlich wird. Denn bis ca.  $0.4 c/a$  gilt in guter Näherung  $|\mathbf{k}| = \omega/c_{\text{eff}}$ , sodass der effektive Brechungsindex  $n_{\text{eff}}$  bzw. die effektive dielektrische Konstante  $\epsilon_{\text{eff}}$  über Gleichung (2.7) ermittelt werden können; im besagten Bereich sind also Gruppen- und Phasengeschwindigkeit der Wellen identisch. In der berechneten Bandstruktur gibt es im vorgegebenen Bereich keine vollständige Bandlücke mit verbotenen Energien, die sich über den gesamten Pfad aus Abbildung 3.9 erstrecken würden. Der Winkel zwischen Quelle und Struktur wäre in der Periodizitätsebene somit für jede der Frequenzen und für beide Polarisationsrichtungen entscheidend. Auch wenn ebendies für das gewählte Quadratgitter nicht gilt, treten zumindest zwischen jedem der einzelnen Symmetriepunkte partielle Bandlücken auf; und zwar drei von  $\Gamma$  bis  $X$ , zwei von  $\Gamma$  bis  $M$  und nochmals zwei für die Wellenvektoren von  $X$  bis  $M$ .

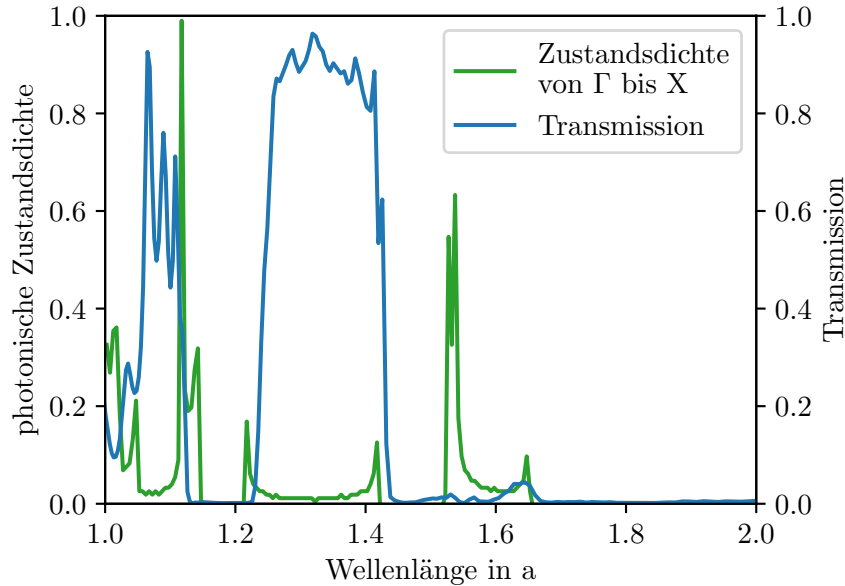


**Abbildung 3.10:** Photonische Bandstruktur für das Quadratgitter mit der Gitterkonstante  $a$  und dem Radius  $r = a/4$ .

Es stellt sich nun die Frage, welche Wellenvektoren für den Vergleich mit den Transmissionspektren benötigt werden. Da die erzeugten Wellen in der FDTD-Simulation ausgehend von der Quelle hin zum Transmissionsgebiet propagieren, entscheidet letztlich nur die  $x$ -Komponente. Oder anders ausgedrückt: Wellen, die das Quadratgitter durchqueren, haben stets einen Ausbreitungsvektor mit einer von Null verschiedenen  $x$ -Komponente und einer  $y$ -Komponente, welche entweder marginal oder gleich Null ist. Für eine Punktquelle trifft das Genannte nicht zu; für eine Linienquelle kann es aber als gute Näherung angesehen werden, da durch eine solche Überlagerung von Punktquellen näherungsweise ebene Wellen gemäß Gleichung (2.20) entstehen und sich mit einem Wellenvektor senkrecht zum Quadratgitter ausbreiten. Dieser Umstand schließt alle Vektoren zwischen dem Symmetriepunkt X bis einschließlich M aus, weil jene eine  $y$ -Komponente ungleich Null aufweisen. Wollte man die Bandstruktur zwischen jenen Symmetriepunkten mit einem Spektrum vergleichen, so müsste man die Struktur relativ zur Quelle und zum Transmissionsgebiet um  $45^\circ$  drehen. Für den Vergleich zwischen den Spektren und der Bandstruktur bietet es sich an, die Transmission mit der Zustandsdichte zu vergleichen; beide korrespondieren nämlich miteinander: dort wo photonische Zustände verfügbar sind, findet Transmission durch die Struktur statt, und im Bereich der Bandlücke, wo keine Zustände vorhanden sind, geht die Transmission gegen Null.

Wir können die photonische Zustandsdichte aus der Bandstruktur gemäß Gleichung (2.17) ermitteln, was durch Projektion der Bänder auf die Frequenzen geschieht. Das Resultat einer solchen Vorgehensweise zeigt Abbildung 3.11. Es wird deutlich, dass sich das Transmissionspektrum für das Quadratgitter gut durch die Bandstruktur erklären lässt. Entscheidend sind hierfür vor allem die Positionen der Minima nahe Null; umgekehrt kann von einem Maximum

in der Zustandsdichte allerdings nicht auf ein Transmissionsmaximum geschlossen werden. Auch wenn die Differenzen bei kleinen Wellenlängen zwischen  $1.0a$  und  $1.2a$  eine scheinbar mangelhafte Übereinstimmung suggerieren, sind im Bereich des Transmissionsmaximums dennoch Zustände vorhanden und das Maximum ist somit im Sinne der Bandstruktur zulässig.



**Abbildung 3.11:** Vergleich des Transmissionsspektrums mit der photonischen Zustandsdichte zwischen den Punkten  $\Gamma$  und  $X$  für das Quadratgitter mit dem Kreisradius  $r = a/4$ .

Man kann hier also von einer guten Übereinstimmung zwischen beiden Ansätzen sprechen, da alle Bereiche mit einer Transmission von Null mit den partiellen Bandlücken übereinstimmen. Angesichts der Tatsache, dass für die FDTD-Simulation eine endliche Struktur und für Bandstruktur-Berechnung ein unendlich ausgedehnter Kristall vorausgesetzt wurde, sind auch gewisse Abweichungen gerechtfertigt. An den Bandkanten – also an den Rändern eines Bereiches mit einer verarmten Zustandsdichte von etwa Null – liegt erst eine hohe Anzahl von Zuständen vor, die anschließend schnell wieder sinkt.

Das liegt daran, dass die Frequenzbänder nahe der Bandlücke im Intervall  $\omega + d\omega$  stets flach sind. Das bedeutet wiederum, dass die Ausbreitungsgeschwindigkeit  $v_G$ , definiert durch Gleichung (2.16), nahe den Bandlücken sehr gering ist und anschließend wieder ansteigt.

### 3.3 Unordnung durch Störung von Ordnung

Ausgehend von der geordneten Zylinder-Anordnung im Quadratgitter aus Abbildung 3.1 wollen wir nun den Einfluss von Unordnung auf die Transmissionsspektren untersuchen. Ziel ist es vor allem, den Übergang von geordneten hin zu ungeordneten Strukturen besser zu verstehen. Dabei kann Unordnung auf verschiedene Weise ins System eingebracht werden: Abweichung in der Position, im Radius und im Brechungsindex einzelner Zylinder sind hierbei etwaige Ansätze.

#### 3.3.1 Veränderung der regulären Gitterposition

Die erste Möglichkeit einer Störung des geordneten Systems bietet uns die Verschiebung einzelner Zylinder. Mit dem in [42] beschriebenen Ansatz

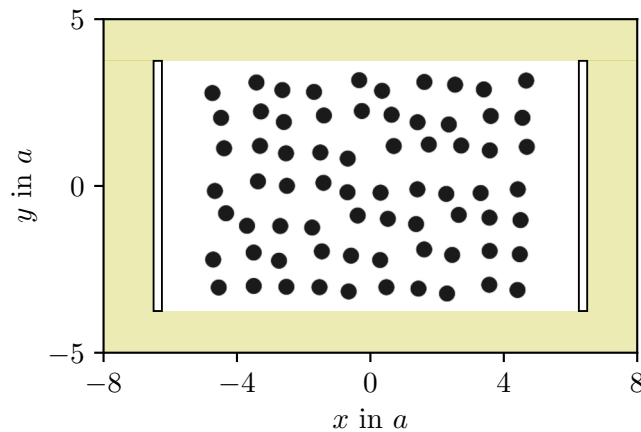
$$\tilde{x} = x + \Omega_{xy}(1 - 2\xi_x), \quad \xi_x \in [0, 1] \in \mathbb{R},$$

$$\tilde{y} = y + \Omega_{xy}(1 - 2\xi_y), \quad \xi_y \in [0, 1] \in \mathbb{R}$$

wird die reguläre Gitterposition  $(x, y)$  mit Hilfe von gleichverteilten Zufallszahlen  $(\xi_x, \xi_y)$  im Intervall  $[0, 1]$  gestört. Der Grad der Unordnung

$$\Omega_{xy} = Ga$$

gibt das Ausmaß der Verschiebung im Bezug auf die Gitterkonstante  $a$  an, welche als charakteristische Größe des Systems festgelegt wurde. Über den Anteil  $G$  an der Gitterkonstante lässt sich die Unordnung somit anschalten.



**Abbildung 3.12:** Zylinder-Anordnung im Quadratgitter mit der regulären Gitterkonstante  $a$  und dem Zylinderradius  $r = a/4$ . Die einzelnen Zylinder wurden mit einem Unordnungsgrad von  $\Omega_{xy} = 0.25 a$  verschoben.

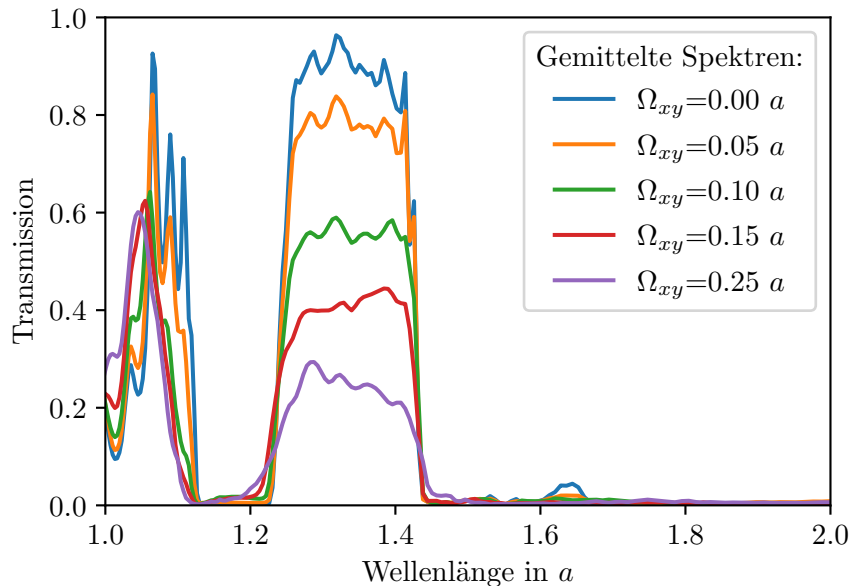
Zwecks eines Vergleiches zu anderen Ansätzen für die Realisierung von Unordnung erscheint vorerst das Ausschließen von Überlappungen, d. h. Verschmelzungen von Zylindern, sinnvoll. Für ein geordnetes zweidimensionales Quadratgitter entspricht der minimale Abstand  $d_{\min}$  zwischen zwei Zylindern gerade der Gitterkonstante, für ein hexagonales Gitter liegt der Abstand bei  $\sqrt{2}a/2 + 2r$ . Bei einer Störung der regulären Gitterposition können sich zwei Zylinder hingegen um maximal  $2(r + \Omega)$  annähern, sodass sich für den Minimalabstand des Quadratgitters  $d_{\min}^q$  und des hexagonalen Gitters  $d_{\min}^h$  folgendes ergibt:

$$d_{\min}^q = a - 2(r + Ga), \quad (3.3)$$

$$d_{\min}^h = \frac{\sqrt{2}}{2}a - 2(r + Ga).$$

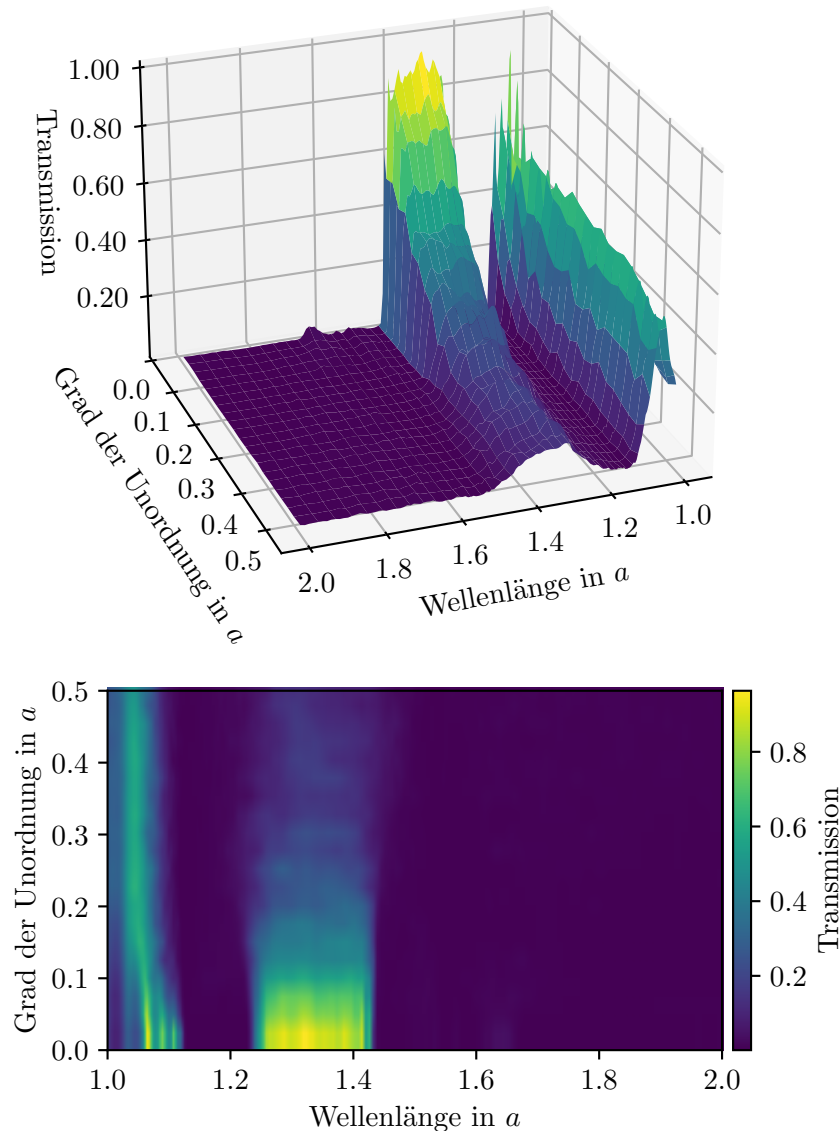
Setzt man nun die minimalen Abstände auf Null, so erhält man schließlich die maximalen Anteile  $G_{\max}$  der Gitterkonstante, für welche die Überlappung von Zylindern ausgeschlossen ist; ebendiese liegt bei 0.25. Auch wenn sich die Zylinder bei jenem Unordnungsgrad berühren können, tritt der beschriebene Fall in der Realisierung aus Abbildung 3.12 nicht auf.

Welche Auswirkungen hat die erläuterte Manipulation des Quadratgitters auf die Transmissionsspektren? Zur Beantwortung dieser Frage wurden verschiedene Spektren für unterschiedliche Grade von Unordnung berechnet und in Abbildung 3.13 gemeinsam dargestellt. Es sei erwähnt, dass jedes Spektrum mit  $\Omega_{xy} > 0$  einer Mittelung aus Spektren zehn verschiedener Realisierungen entspricht, was angesichts der Schwankungen zwischen den Spektren unterschiedlicher Realisierungen Sinn ergibt.



**Abbildung 3.13:** Spektren für gestörte Quadratgitter-Anordnungen von Zylindern. Die Zylinderpositionen wurden für unterschiedliche Unordnungsgrade  $\Omega_{xy}$  verschoben.

Die simulierten Spektren zeigen, dass sich die Transmissionsmaxima bei einer Erhöhung des Unordnungsgrades grundsätzlich verringern, was für beide Extrema im festgelegten Spektralbereich gilt. Vergleicht man allerdings das erste Maximum bei rund  $1.0655 a$  mit dem zweiten bei etwa  $1.3184 a$ , so wird eine unterschiedliche Reaktion der beiden Maxima auf Unordnung deutlich.



**Abbildung 3.14:** 20 Transmissionsspektren für *TM*-Moden, dargestellt über dem Unordnungsgrad  $\Omega_{xy}$ ; einmal als dreidimensionale (oben) und einmal als zweidimensionale Darstellung (unten) mit gemeinsamer Farbskala.

Für das erste Maximum sinkt die Transmission bereits ab  $\Omega_{xy} = 0.15 a$  nicht mehr weiter, derweil sich das zweite Maximum stets verringert. Zudem verhalten sich beide Maxima hinsichtlich eines anderen Aspektes gegenteilig: die Aufteilung zwischen  $1.0 a$  und  $1.2 a$  in

drei Teil-Maxima hebt sich mit höherer Unordnung auf, indessen bleibt die Aufspaltung zwischen  $1.2a$  und  $1.4a$  in mehrere Maximalwerte tendenziell eher unverändert. Selbst beim gemittelten Spektrum für  $\Omega = 0.10a$  ist der strukturelle spektrale Verlauf des ungestörten Systems noch deutlich erkennbar. Am Rande der Transmissionsminima kann zusätzlich eine Aufweichung der Bandkanten beobachtet werden. Die Übergänge zwischen den verbotenen und erlaubten Wellenlängenbereichen sind weniger scharf, d. h. die Beträge der Anstiege verringern sich an den Rändern der Minima.

In Abbildung 3.14 sind einige Spektren für verschiedene Unordnungsgrade in Form eines 3D-Diagramms und zusätzlich als Farbdigramm dargestellt, wobei Zylinder-Überlappungen ab über  $\Omega_{xy} = 0.25a$  diesmal auftreten können. Neben einigen bereits erläuterten Charakteristika wird hier besonders gut deutlich, wie das zweite Maximum bei  $1.3184a$  wesentlich stärker abgeschwächt wird, als das Erste bei  $1.0655a$ . Ferner scheinen beide Maxima gegen einen Wert größer Null zu konvergieren.

### 3.3.2 Veränderung des Radius

Nach diesen Betrachtungen wechseln wir nun zu einem neuen Ansatz für Unordnung, indem wir im jetzigen Kapitel Abweichungen der Zylinderradien herbeiführen. So lässt sich ein manipulierter Radius

$$\tilde{r} = r + \Omega_r(1 - 2\xi), \quad \xi \in [0, 1] \in \mathbb{R}$$

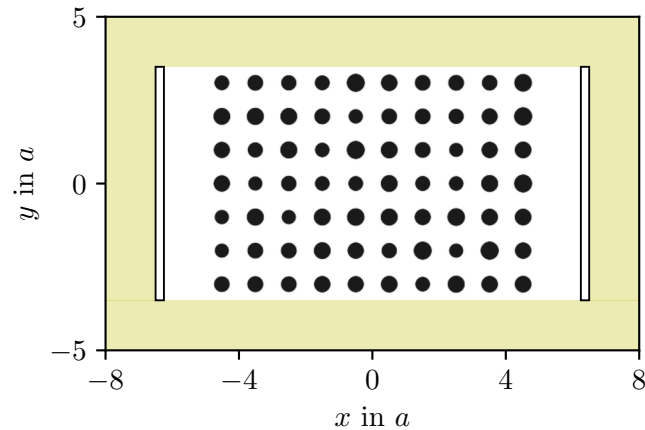
ausgehend vom festgelegten Radius  $r_0$  analog zu Gleichung (3.3) definieren. In dem Zusammenhang ergibt es allerdings Sinn, den Grad der Unordnung

$$\Omega_r = Gr$$

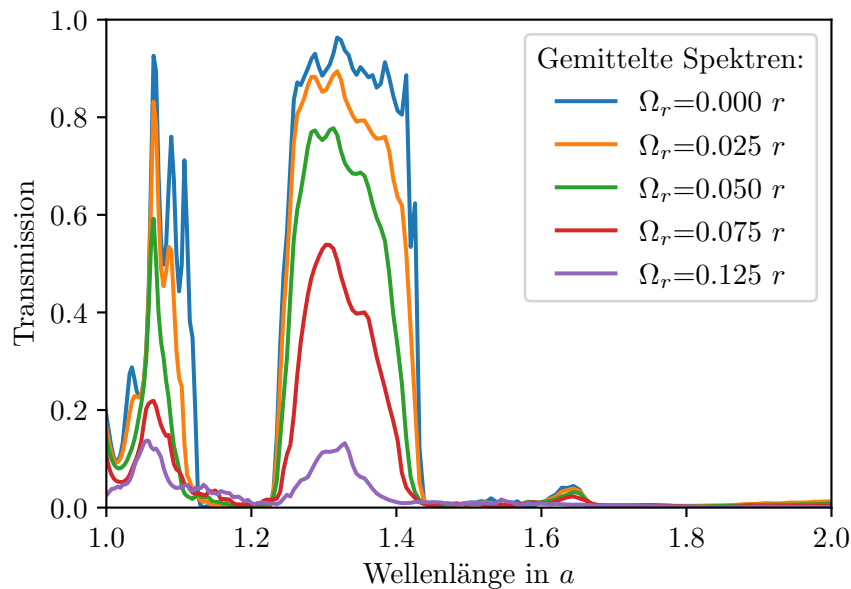
auf den Radius  $r = a/4$  zu beziehen. Abbildung 3.15 zeigt die dielektrische Funktion einer Beispiel-Realisierung für den Unordnungsgrad  $\Omega_r = 0.125r$ .

In Abbildung 3.16 wurden auch hier – analog zu den vorigen Betrachtungen – gemittelte Spektren für unterschiedliche  $\Omega_r$  mit dem Spektrum des geordneten Quadratgitters verglichen. Das Phänomen der Transmissionsverminderung bei steigendem Unordnungsgrad kommt ebenda noch stärker zum Tragen, da nun auch das erste Maximum bei  $1.0655a$  gegen Null strebt. Ein großer Unterschied zu den Spektren des vorigen Ansatzes, nämlich der Zylinder-Verschiebung, liegt in der „Verengung“ des zweiten Maximums bei  $1.3184a$ : wir können eine deutliche „Zuspitzung“ mit steigendem Unordnungsgrad verzeichnen, während die Bandkanten nach wie vor an „Schärfe“ verlieren. Die Wellenlängenbereiche, in welchen Transmission durch die Struktur stattfindet, werden also bei stärkerer Veränderung der Radien kleiner.



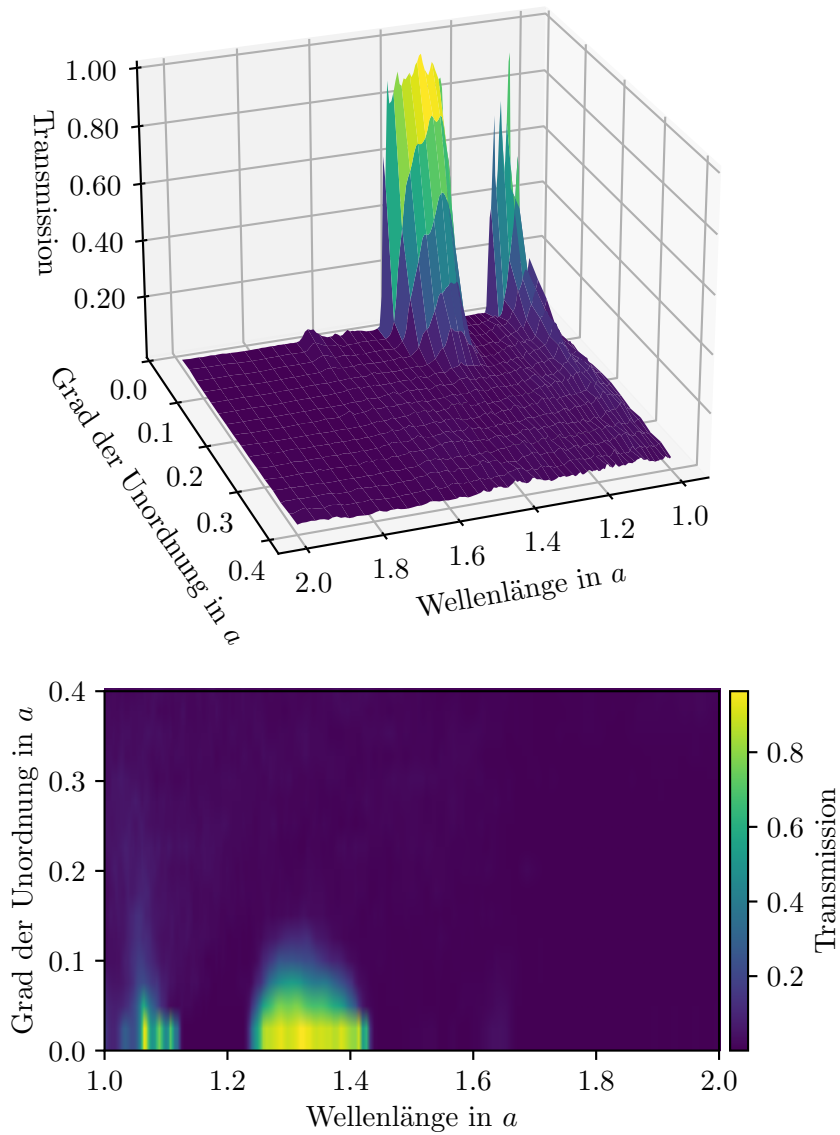


**Abbildung 3.15:** Zylinder-Anordnung im Quadratgitter mit der Gitterkonstante  $a$  und dem regulären Zylinderradius  $r = a/4$ . Die einzelnen Zylinder wurden für einen Unordnungsgrad von  $\Omega_r = 0.125 r$  verschoben.



**Abbildung 3.16:** Spektren für gestörte Quadratgitter-Anordnungen von Zylindern. Die Zylinder-radien wurden mit unterschiedlichen Unordnungsgraden  $\Omega_r$  manipuliert.

In Abbildung 3.17 sind wieder einige Spektren für verschiedene Unordnungsgrade in Form eines 3D- und eines Farbdiagramms dargestellt. Es bestätigt sich, dass die beiden Maxima im Vergleich zueinander ähnlich schnell gegen Null konvergieren; obwohl das zweite Maximum anfangs, bei kleinen Unordnungsgraden, eine stärkere Abschwächung erfährt.



**Abbildung 3.17:** 17 Transmissionsspektren für TM-Moden, dargestellt über dem Unordnungsgrad  $\Omega_r$ ; einmal als dreidimensionale (oben) und einmal als zweidimensionale Darstellung (unten) mit gemeinsamer Farbskala.

### 3.3.3 Veränderung der dielektrischen Konstante

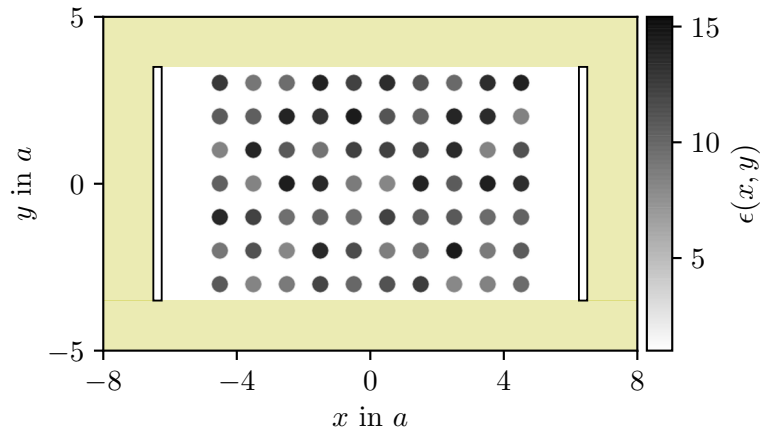
Nachdem wir Unordnung durch Zylinder-Verschiebung und Radius-Manipulation in das geordnete dielektrische Quadratgitter eingebracht haben, erfolgt nun noch das Einbeziehen von Schwankungen der dielektrischen Konstanten der Zylinder. Das kann genau wie in den beiden anderen Ansätzen über Störung mittels gleichverteilter Zufallszahlen  $\xi$  gemäß

$$\tilde{\epsilon}_Z = \epsilon_Z + \Omega_\epsilon(1 - 2\xi), \quad \xi \in [0, 1] \in \mathbb{R} \quad (3.4)$$

erreicht werden. Es sei darauf hingewiesen, dass es sich hier ausschließlich um den Bereich der dielektrischen Funktion in den Zylindern handelt.  $\epsilon_Z$  steht für den regulären Wert in den Zylindern, welcher in dieser Arbeit stets bei 12 liegt. Der Grad der Unordnung

$$\Omega_\epsilon = G \epsilon_Z \quad (3.5)$$

wird wieder über die charakteristische Größe  $\epsilon_Z$  des geordneten Systems definiert. Die resultierende dielektrische Funktion einer Beispiel-Realisierung ist in Abbildung 3.18 dargestellt, wobei die Funktionswerte durch eine Farbskala gekennzeichnet sind.



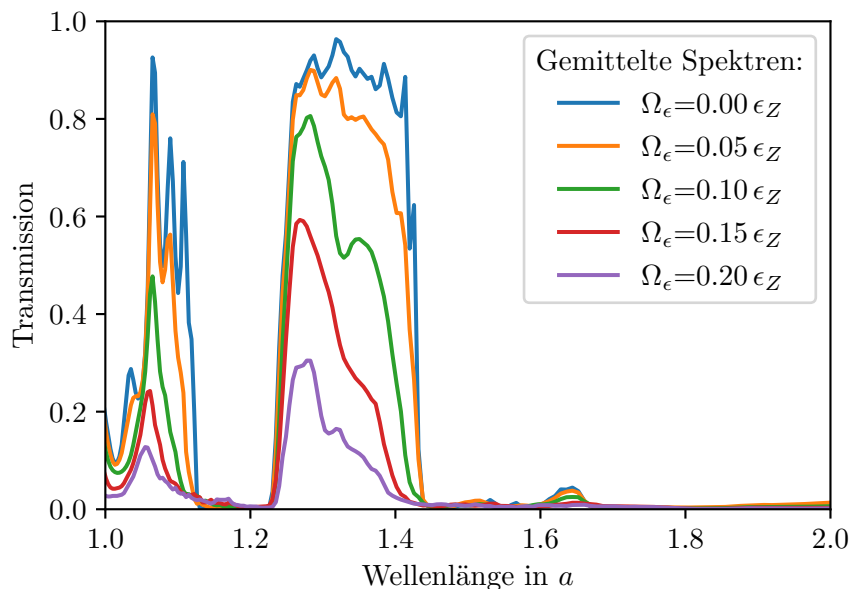
**Abbildung 3.18:** Zylinder-Anordnung im Quadratgitter mit der Gitterkonstante  $a$  und dem Zylinderradius  $r = a/4$ . Die Änderung der Dielektrizitätskonstante  $\epsilon_Z$  einzelner Zylinder erfolgte für einen Unordnungsgrad von  $\Omega_\epsilon = 0.25 \epsilon_Z$ .

Der sog. „dielektrische Kontrast“  $K = \epsilon_Z/\epsilon_D = 12$  des ungestörten Systems kann nun, der Manipulation gemäß Gleichung (3.4) Rechnung tragend, durch den effektiven dielektrischen Kontrast

$$K_{eff} = \frac{1}{70 \epsilon_D} \sum_{i=1}^{70} \tilde{\epsilon}_{Z,i} \quad (3.6)$$

unserer aus 70 Zylindern bestehenden Struktur ersetzt werden, während  $\tilde{\epsilon}_{Z,i}$  die veränderte Dielektrizitätskonstante des  $i$ -ten Zylinders bezeichnet. Wennschon die individuellen gestörten Systeme in ihren Transmissionsspektren nur geringfügig variieren, erfolgte hier wieder eine Mittelung über jeweils zehn Realisierungen. Die Auswirkungen des steigenden Unordnungsgrades auf die Transmissionen sind in Abbildung 3.19 zu sehen. Prinzipiell ähnelt die Reaktion der Spektren auf Unordnung eher den Ergebnissen bei der Veränderung des Radius, als jenen bei Positionsveränderungen.

Wie für die Radiusänderung geht das erste Maximum bei  $1.0655a$  mit steigender Unordnung gegen Null; das Zweite bei  $1.3184a$  wird spitzer und die Bandkanten weichen auf. Diese Ähnlichkeit im Verhalten können wir wohl auf die Gemeinsamkeit zurückführen, dass sowohl die Manipulation des Radius als auch die Änderung der dielektrischen Konstante die Fläche betrifft, derweil die Positionsveränderung die Flächen nicht beeinflussen – d. h. das Verhältnis zwischen den Flächen der Konstituenten und jener des Dispersionsmediums bleibt unverändert.

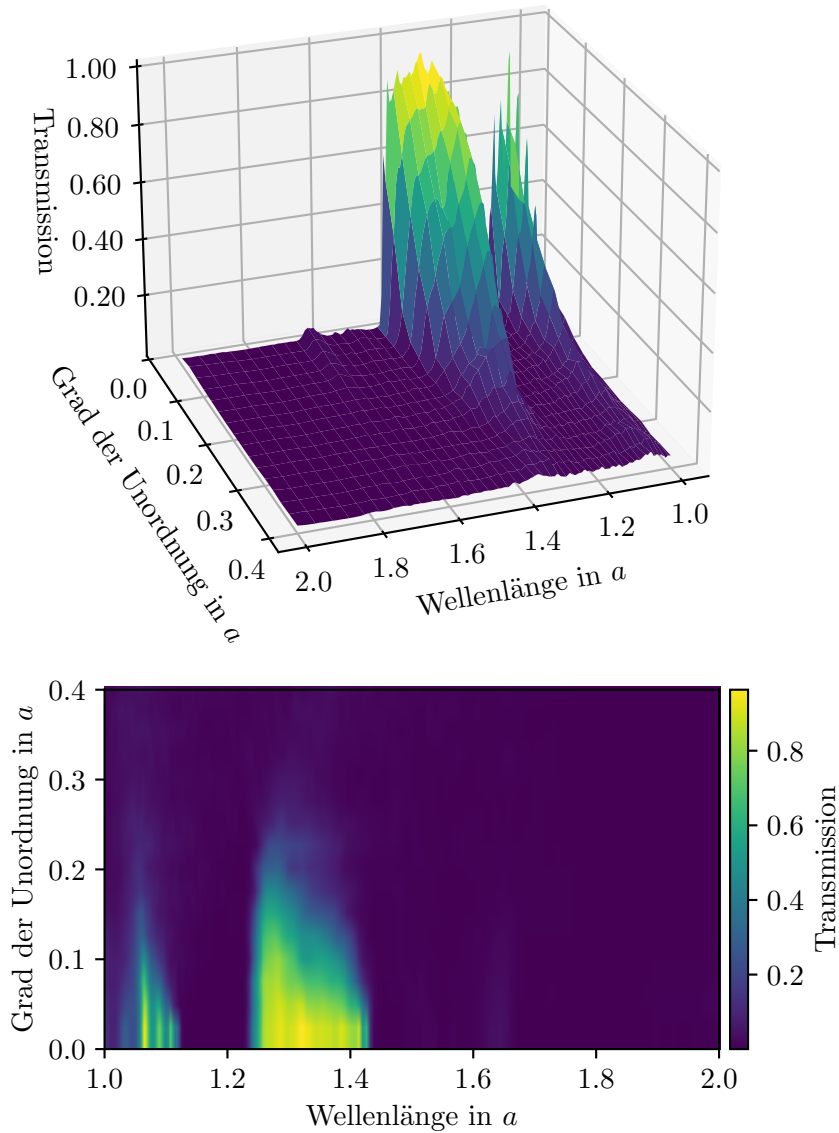


**Abbildung 3.19:** Spektren für gestörte Quadratgitter-Anordnungen von Zylindern. Die Dielektrizitätskonstanten der Zylinder wurden für unterschiedliche Unordnungsgrade  $\Omega_\epsilon$  verändert.

Das zweite Maximum zeigt ein merkwürdiges Verhalten, welches sich von allen bisherigen Ergebnissen unterscheidet: für Wellenlängen im linken Bereich des ursprünglichen Maximums sinkt die Transmission nicht so stark wie im rechten Bereich. Das Maximum scheint sich also für höhere  $G_{max}$  hypsochrom, d. h. nach links, zu verschieben.

Abbildung 3.20 zeigt eine entsprechende 3D-Darstellung der Spektren über unterschiedliche Unordnungsgrade und ein Farbdiagramm. Anders als in Abbildung 3.14 für die Manipulation

der Zylinder-Positionen, aber ähnlich wie in Abbildung 3.17 konvergieren die Spektren für starke Unordnung gegen Null. Hier wird ebenfalls deutlich, dass das erste Maximum schneller abnimmt als das Zweite.



**Abbildung 3.20:** 17 Transmissionsspektren für *TM*-Moden, dargestellt über dem Unordnungsgrad  $\Omega_\epsilon$ ; einmal als dreidimensionale (oben) und einmal als zweidimensionale Darstellung (unten) mit gemeinsamer Farbskala.

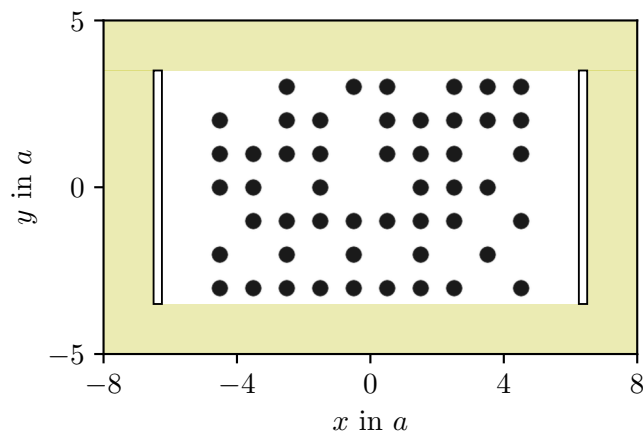
### 3.3.4 Einbringen von Fehlstellen

Im Gegensatz zu den eben untersuchten quasi-kontinuierlichen Änderungen der Zylinder-Dielektrizitätskonstanten sollen im Folgenden bestimmte Zylinder den Wert des Dispersionsmediums  $\epsilon_D$  annehmen, d. h. Zylinder aus dem geordneten Gitter entfernt werden. Ausgehend vom geordneten Quadratgitter aus 70 Zylindern werden wir für eine bestimmte Anzahl an Fehlstellen Zylinder mit Hilfe von natürlichen Zufallszahlen zufällig entfernen und deren dielektrische Konstante über

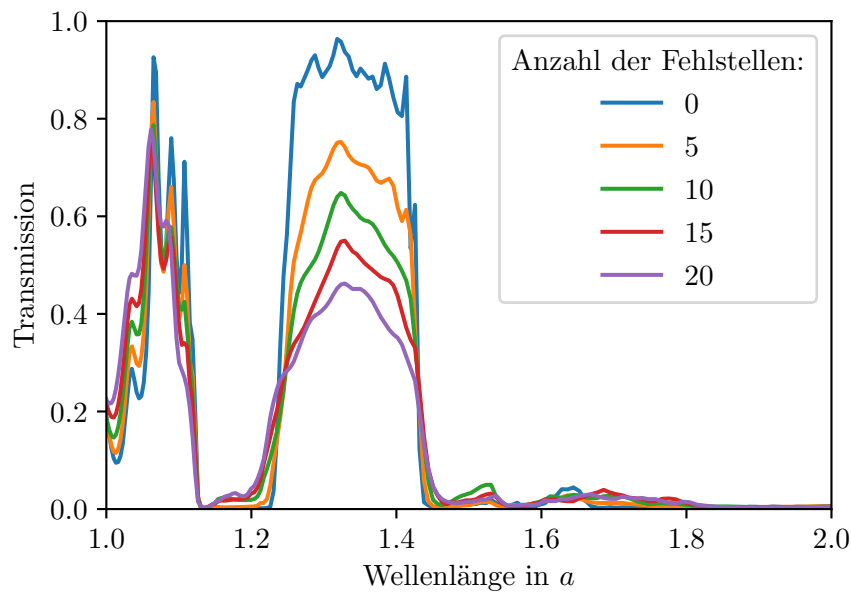
$$\epsilon_Z^\xi = \epsilon_D = 1, \quad \xi \in [1, 70] \in \mathbb{N} \quad (3.7)$$

anpassen. Ein Beispiel-Resultat des betreffenden Vorgehens ist in Abbildung 3.21 für 20 Fehlstellen dargestellt und in Abbildung 3.22 sind wieder die Spektren – jeweils für eine bestimmte Anzahl von Fehlstellen aus zehn Realisierungen gemittelt – im Vergleich zum Spektrum des geordneten Gitters dargestellt.

Erwartungsgemäß sinkt auch hier die Transmission mit steigender Unordnung, d. h. mit der Anzahl an Fehlstellen, was auf Streueffekte zurückzuführen ist. Ähnlich wie in Abbildung 3.13 für Positionsverschiebungen der Zylinder reagieren die beiden Transmissionsmaxima unterschiedlich auf Unordnung: während sich die Transmission bei  $1.3184 a$  verringert, bleibt das erste Maximum bei  $1.0655 a$  für höhere Unordnung auffallend stabil, d. h. die Transmission sinkt weniger stark. Zwischen der Wellenlänge von  $1.0 a$  und  $1.0655 a$  fällt besonders die Staffelung der Spektren auf, wobei die Transmission im Bereich der Wendepunkte mit steigendem Unordnungsgrad interessanterweise ansteigt. An den Rändern der Minima vermerken wir wieder eine Aufweichung der Bandkanten; die Maxima erfahren zudem eine Verbreiterung und die Beträge der Anstiege verringern sich.



**Abbildung 3.21:** Zylinder-Anordnung im Quadratgitter mit der Gitterkonstante  $a$  und dem Zylinderradius von  $r = a/4$ . Aus dem geordneten Gitter wurden 20 durch Pseudozufallszahlen ausgewählte Zylinder entfernt.

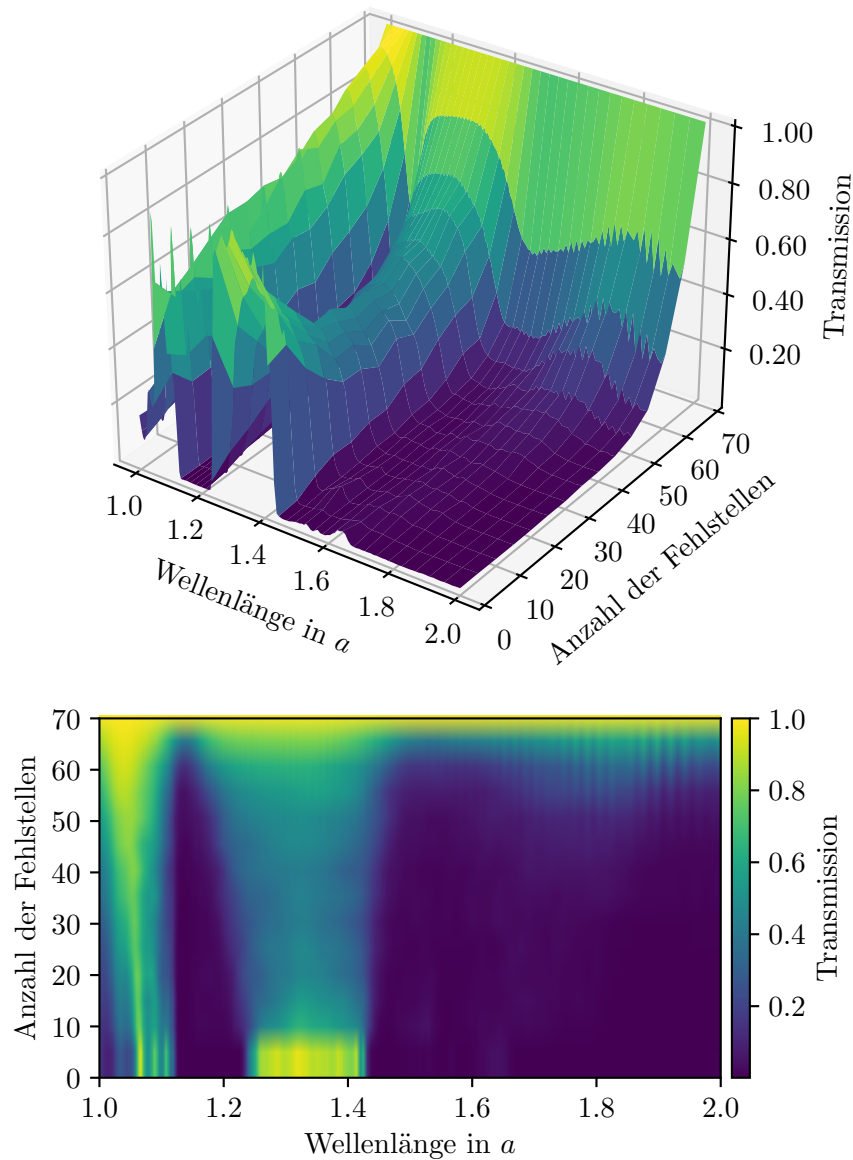


**Abbildung 3.22:** Spektren für Quadratgitter-Anordnungen von Zylindern mit einer unterschiedlichen Anzahl von Fehlstellen.

Auch hier bietet es sich an, die Spektren über der Fehlstellenanzahl, also dem Unordnungsgrad, aufzutragen. Das Resultat des Vorgehens ist in Abbildung 3.23 in Form eines 3D- und eines Farbdigramms dargestellt. Zunächst verwundert es nicht, dass, wie bereits mehrfach beobachtet, die Transmissionsmaxima durch Unordnung allgemein abgeschwächt werden, da die photonischen Eigenschaften anfangs in den Hintergrund treten. Für das zweite Maximum wird dies jedoch ab einer bestimmten Anzahl von Fehlstellen zunehmend unwichtig; im Gitter entstehen dann vermehrt Lücken, durch welche sich der Wellentransport vereinfacht und die Transmission somit ansteigt. Die Fehlstellenanzahl, bei welcher sich beide Mechanismen in etwa ausgleichen, liegt bei etwa 25 und macht sich in einem Wendepunkt bemerkbar. Bei einer geringen Anzahl von Fehlstellen dominiert die Periodizität der Anordnung, ausgedrückt durch die Bandstruktur; es treten deshalb Maxima und Minima auf. Bei einer hohen Fehlstellenanzahl ist die Beschreibung der Struktur als photonischer Kristall nicht mehr zielführend – das Verhalten weniger Zylinder ließe sich dann bspw. durch Mie-Streuung beschreiben. Das erklärt auch, warum es zu einer Aufweichung der Bandkante besonders um das zweite Maximum kommt. Indessen erhöht sich der Wellenlängenbereich beider Maxima, da die Bandstruktur mit zunehmender Unordnung ihre Bedeutung verliert – im Farbdigramm wird das besonders anschaulich.

Im Gegensatz zum zweiten Maximum sinkt die Transmission für das Erste bei höherer Fehlstellenanzahl kaum. Dem muss eine geometrische Größe zugrunde liegen, welche sich für jene Art der Unordnung nicht ändert. Hierfür käme erneut der Radius infrage, da sich dieser durch die Entfernung einzelner Zylinder im Gegensatz zur Gitterkonstante nicht verändert.

Der Frage nach den Wirkungsmechanismen der beiden auftretenden Maxima wollen wir im nächsten Kapitel nachgehen.



**Abbildung 3.23:** 15 gemittelte Transmissionsspektren für TM-Moden, dargestellt über der Anzahl an Fehlstellen; einmal als dreidimensionale (oben) und einmal als zweidimensionale Darstellung (unten) mit gemeinsamer Farbskala.



### 3.4 Wirkungsmechanismen für beide Transmissionsmaxima

Nachdem wir nunmehr das geordnete Quadratgitter auf vier verschiedene Arten gestört haben, lässt sich zusammenfassend festhalten, dass die Spektren für stärkere Unordnung tendenziell immer glatter werden und kleine Störungen des geordneten Quadratgitters stets eine Verringerung der Transmission zur Folge haben. Das machte sich für die vier verschiedenen Ansätze von Unordnung jedoch auf unterschiedliche Weise bemerkbar, wobei das erste Maximum bei  $1.0655 a$  und das zweite Maximum bei  $1.3184 a$  verschieden auf diese reagierten:

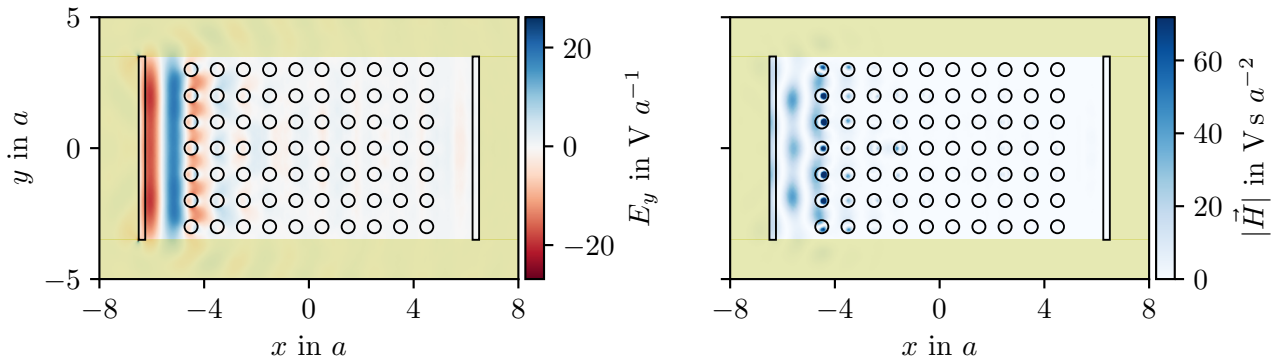
1. Bei der Veränderung der regulären Gitterposition blieb das erste Maximum weitestgehend unverändert, unterdessen strebte das Zweite gegen Null.
- 2./3. Bei der Veränderung des Radius und der dielektrischen Konstante konvergierten beide Maxima mit steigender Unordnung gegen Null.
4. Bei dem Einbringen von Fehlstellen strebte das erste Maximum bis 70 Fehlstellen gegen Eins; das Zweite sank bis zum Wendepunkt und konvergierte anschließend ebenfalls gegen Eins.

Grundsätzlich unterscheidet sich der Ansatz aus 1. von den restlichen Ansätzen 2. bis 4. in dem Umstand, dass der effektive dielektrische Kontrast  $K_{eff}$  und das Flächenverhältnis von Dispersionsmedium und den Zylinderflächen unverändert bleiben. Die Ansätze in 2. und 3. sind grundsätzlich eng miteinander verwandt und bewirken ein ähnliches spektrales Verhalten. Das liegt daran, dass sich die Werte  $\tilde{r}$  und  $\tilde{\epsilon}_Z$  ausgehend von den jeweiligen Standardwerten sowohl verringern, als auch erhöhen können. Diese Veränderung finden wir bei Fall 4. nur in eine Richtung, da die Fehlstellenanzahl bei steigender Unordnung stets erhöht wird und niemals sinkt.

Aber welche Wirkungsmechanismen stehen hinter den beiden Transmissionsmaxima? Sieht man sich die Feldkomponenten für eine konkrete Wellenlänge innerhalb der Bandlücke an, so wird deutlich, dass Wellen bereits an den ersten zwei Zylinderreihen entscheidend abgeschwächt werden. In Abbildung 3.24 kann dies sowohl für die  $E_y$ -Komponente, als auch für den Betrag des Magnetfeldes beobachtet werden. Ursächlich hierfür ist destruktive Interferenz zwischen den Wellen des Dispersionsmediums und jenen, welche die Zylinder durchqueren, wobei für die zugehörige Simulation eine monochromatische Quelle mit  $\lambda = 1.8 a$  Verwendung fand. Dass die dielektrische Konstante innerhalb der Zylinder größer ist als außerhalb, führt laut

$$\lambda = \frac{2\pi}{\omega} v_P = \frac{2\pi c}{n\omega}, \quad n \geq 0 \quad (3.8)$$

mit der Phasengeschwindigkeit  $v_P$  zu einer kleineren Wellenlänge und laut Gleichung (2.7) zu einer verringerten Ausbreitungsgeschwindigkeit. Es entsteht somit eine Phasenverschiebung zwischen den Wellen innerhalb und außerhalb der Zylinder.



**Abbildung 3.24:** Anordnung von Zylindern mit dem Radius  $r = a/4$  im Quadratgitter. Innerhalb der Simulationszelle ist die Komponente der Quelle (links) und der Betrag des Magnetfeldes (rechts) für den Fall von TM-Moden dargestellt. Verwendet wurde eine monochromatische Linienquelle mit der in der Bandlücke liegenden Wellenlänge  $\lambda = 1.8 a$ .

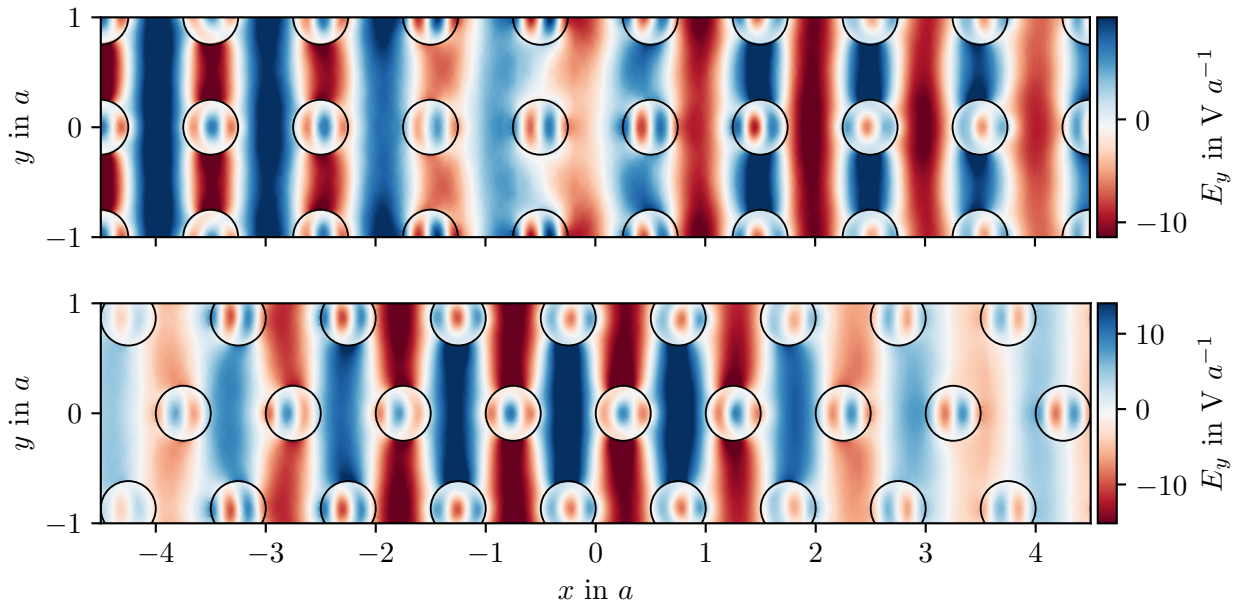
Dementsprechend muss für Wellenlängen um die Transmissionsmaxima konstruktive Interferenz einen stärkeren Einfluss haben als destruktive. Zur näheren Untersuchung sollen fortan Wellenbilder für monochromatische Quellen einmal mit der Wellenlänge  $\lambda = 1.0655 a$  des ersten und  $\lambda = 1.3184 a$  des zweiten Maximums verglichen werden.

### 3.4.1 Das erste Maximum

Ein Ausschnitt aus der Simulationszelle unter Einbeziehung aller zehn Zylinder in  $x$ -Richtung ist in Abbildung 3.25 für die Wellenlängen des ersten Maximums dargestellt. Da das zu dieser Wellenlänge gehörende Transmissionsmaximum auch im TM-Spektrum der hexagonalen Struktur auftritt, ist die besagte Struktur zum Vergleich zusätzlich aufgeführt. Für das erste Maximum wird nochmals der Zusammenhang  $\lambda/2 \approx 2r$  zwischen Wellenlänge und Zylinderdurchmesser deutlich: auf Höhe der ersten drei bis vier Zylinderreihen in  $x$ -Richtung liegt stets ein Wellental und zwischen den Zylindern ein Wellenberg. Nicht so auf Höhe der fünften Zylinderreihe: denn dort befindet sich der Wendepunkt der Welle mit einer  $E_y$ -Komponente von etwa Null. Erst ab der siebten Reihe ist das alte Muster wiederhergestellt – allerdings umgekehrt, sodass auf den letzten fünf Reihen nun jeweils ein Wellenberg und dazwischen jeweils ein Wellental liegt. Im Grunde genommen weist das Wellenbild im Bereich der ersten und letzten drei Reihen, anders als in den vier dazwischenliegenden Reihen, eine Antisymmetrie bezüglich der  $x$ -Achse auf.

Die Ursache liegt in den Zylindern: bei Reihe vier, fünf und sechs liegt ein Nullpunkt der Welle mit  $E_y \approx 0$  in der Mitte. Bei den restlichen Zylinderreihen in  $x$ -Richtung befindet sich hingegen nur ein Wellenberg oder Tal in der Mitte der Zylinder. Ebenda machen sich die Auswirkungen der Phasenverschiebung bemerkbar, denn in den Zylindern breiten sich die Wellen langsamer aus als im Dispersionsmedium. Mit jeder Zylinderreihe addiert sich diese Verschiebung auf und die Periodizität des Wellenbildes wird gestört.

erstes Maximum,  $\lambda = 1.0655 a$



**Abbildung 3.25:** Ausschnitt des Wellenbildes für eine Quadratgitter-Anordnung (oben) und eine hexagonale Anordnung (unten) von Zylindern mit einer monochromatischen Linienquelle der Wellenlänge des ersten Maximums.

Obwohl die Zylinderreihen für das hexagonale Gitter verschoben wurden, ändert sich die Struktur des Wellenbildes für dieselbe Wellenlänge nicht fundamental und der Wellentransport wird nach wie vor wenig eingeschränkt. Daraus lässt sich schlussfolgern, dass die individuelle Position der Zylinder für die betrachtete Wellenlänge nicht fundamental wichtig sein kann. Das erklärt auch, warum die Ausbreitung von Wellen jener Wellenlänge von Unordnung bzgl. der Zylinderposition nur geringfügig beeinflusst wird. Die Gitterkonstante spielt also für die beschriebene Phasenverschiebung nicht die entscheidende Rolle; einen äußerst großen Einfluss hat hingegen der Zylinderradius  $r$ .

Ich komme hier zu folgender These: Für jeden Radius existiert ein Wellenlängenbereich, für welchen die Verluste durch die Phasenverschiebung und die resultierende destruktive Interferenz minimiert wird. Es entsteht ein Transmissionsmaximum, welches eine ausgesprochene „Stabilität“ gegenüber Unordnung aufweist, solange die Zylinderfläche  $\pi r^2$  unverändert bleibt.

Aber warum ist dieses Maximum nicht robust gegenüber Störung der dielektrischen Konstante der Zylinder, wo doch die Zylinderfläche gleich bleibt? Das Problem hierbei ist, dass die Phasengeschwindigkeit  $v_P$  in den einzelnen Zylindern durch die Manipulation der Dielektrizitätskonstanten unterschiedlich verändert wird, was das Gleichgewicht für den festgelegten Radius durcheinanderbringt. Insgesamt zeigt die Analyse des ersten Maximums, dass sich die

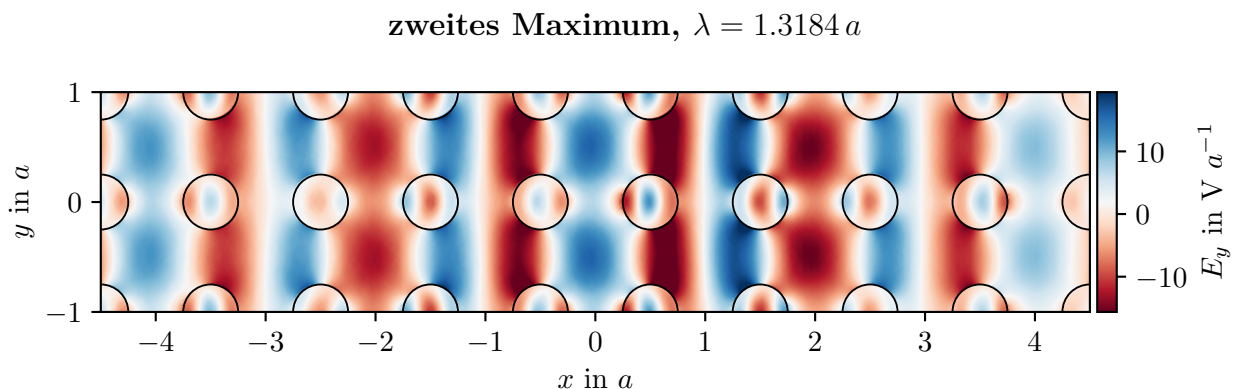
zugehörige Wellenlänge für die behandelte Struktur besonders gut für den Wellentransport eignet, was für zahlreiche Anwendungen interessant sein könnte.

### 3.4.2 Das zweite Maximum

Für das zweite Maximum mutet das Wellenbild aus Abbildung 3.26 besonders periodisch bzgl. der Gitterkonstante an, denn bei  $x = (0, \pm 2, \pm 4) a$  finden wir stets einen Wellenberg bzw. ein Tal zwischen den Zylindern vor. Bei  $x = (\pm 1, \pm 3) a$  liegen hingegen genau ein Wellenberg und ein Tal zwischen zwei Zylindern; der Wendepunkt befindet sich dann bei der halben Gitterkonstante. Prinzipiell ist das Wellenbild im Bezug auf die  $x$ -Richtung näherungsweise spiegelsymmetrisch. Aus einem besonders periodischen Wellenbild können wir schlussfolgern, dass die Wellen die Struktur mit minimalen Verlusten durchqueren können, was dann zum Transmissionsmaximum führt.

Verschiebt man nun die Position der Zylinder, so stört das die Periodizität des Wellenbildes ungemein und muss größere Auswirkungen auf die Wellentransmission haben als bei der Wellenlänge des ersten Maximums. Die Änderung der Abstände zwischen den Zylindern beeinflusst die Wellenstreuung durch die Struktur. Wenn die konstruktiven und destruktiven Interferenzen zwischen den ungeordneten Streuern ausgeglichen sind, hat die Unordnung einen geringen Einfluss auf die Transmission durch die Zylinder-Anordnung.

Dass das erste Maximum für die hexagonale Struktur nicht auftritt und um  $1.3 a$  sogar eine Bandlücke vorliegt (siehe Abbildung 3.7), bestätigt die Annahme, dass die individuelle Zylinder-Position eine entscheidende Bedeutung hat. Allerdings sind die restlichen Parameter, Radius und Dielektrizitätskonstante, nicht weniger wichtig. Prinzipiell weist das zweite Maximum nämlich keine Robustheit gegenüber irgendeiner Art von Unordnung auf – die Transmission sinkt für alle untersuchten Unordnungsansätze.



**Abbildung 3.26:** Ausschnitt des Wellenbildes für eine Quadratgitter-Anordnung von Zylindern mit einer monochromatischen Linienquelle der Wellenlänge des zweiten Maximums.

Im Gegensatz zum ersten Maximum zeichnet sich das Zweite durch eine hohe Breite aus. Das bedeutet: falls wir die Wellenlänge leicht verändern, bleibt die Periodizität immer

noch erhalten und Wellen können gut transmittieren. Vom ersten Maximum kann so etwas hingegen nicht behauptet werden: das Maximum ist schmal und deshalb äußerst sensibel gegenüber Wellenlängenverschiebungen.

Ab den zwei Wellenlängen an den Rändern des zweiten Maximums, d. h. an den Bandkanten, bricht aber das Gleichgewicht zwischen konstruktiver und destruktiver Interferenz. Es kommt dann zu einem abrupten Absinken der Transmission, denn die Verluste durch destruktive Interferenzen steigen rapide an – das Wellenbild ist nicht mehr schön periodisch.

Aber was hat es mit der Breite der Maxima auf sich? Das erste Maximum erstreckt sich laut meinen Rechnungen stets über einen geringeren Wellenlängenbereich als das zweite. Bei Störungen der periodischen Struktur kommt es hauptsächlich zu einer „Zuspitzung“ bzw. einer Abweichung von der Kastenform im zweiten Maximum. In diesem Punkt gibt es für das zweite Maximum tatsächlich deutliche Unterschiede in den vier verschiedenen Ansätzen für Unordnung:

1. Bei der Veränderung der regulären Gitterposition spitzt sich das zweite Maximum mit steigender Unordnung nicht zu; die Kastenförmigkeit bleibt erhalten.
- 2./3. Bei der Veränderung des Radius und der dielektrischen Konstante wird das zweite Maximum hingegen schmaler.
4. Bei dem Einbringen von Fehlstellen kommt es ebenfalls zu einer leichten Zuspitzung, allerdings steigt der Wellenlängenbereich gleichzeitig an, was bereits diskutiert wurde.

### 3.5 Amorphe Strukturen

Nach der Beschäftigung mit einer Störung der geordneten Struktur können wir vom Verständnis der Wirkungsmechanismen hinter den beiden Maxima profitieren und uns fortan dem Problem der Unordnung von einer anderen Seite aus nähern. Selbstverständlich ist Unordnung stets eine Frage der Perspektive bzw. des Bezugspunktes. Im letzten Kapitel der Arbeit haben wir keinen solchen Bezugspunkt mehr – es soll um gänzlich ungeordnete, amorphe photonische Kristalle gehen, deren geometrische Anordnung durch Gesetzmäßigkeiten der Molekulardynamik erzeugt wird [48]. Nur im Bezug auf eine Größe wollen wir Ordnung beibehalten: der Zylinderradius  $r$  sei für alle Konstituenten gleich. Eine derartige Rahmenbedingung gewährleistet uns einen validen Vergleich mit den bisherigen Ergebnissen für manipulierte geordnete Gitter und stellt durchaus eine profane Annahme dar [16, 18, 26, 28–30, 34, 35]. Aus Spektren für amorphe Anordnungen von Zylindern mit zufallsverteilten Radien ging im Übrigen hervor, dass die Transmission im Vergleich zu den bisherigen Ergebnissen noch schneller sinkt – auch daher erfolgt hier keine detailliertere Auseinandersetzung diesbezüglich. Da wir nun keinen Unordnungsgrad mehr haben, der sich stets auf eine festgelegte Ordnung bezieht, gewinnt eine andere Kenngröße an Bedeutung: Die Packungsdichte  $P$ , im dreidimensionalen Fall auch gelegentlich Füllfaktor genannt, bezeichnet für zweidimensionale Systeme das Flächenverhältnis

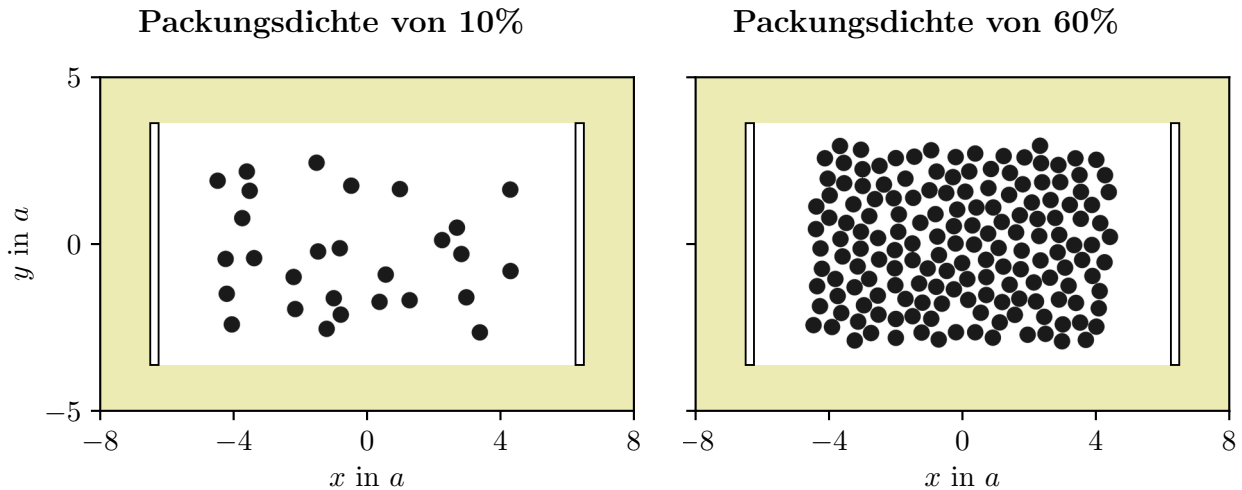
$$P = \frac{N \cdot A_Z}{A_S}, \quad (3.9)$$

mit der Anzahl an Konstituenten  $N$ , deren Fläche  $A_Z$  und die Struktur einbettende Fläche  $A_S$ . Es bietet sich an, die Fläche zu wählen, welche die bisher untersuchte Quadratgitter-Anordnung aus Abbildung 3.1 mit 70 Zylindern einnimmt, also  $A_S = (9a + 2r)(6a + 2r)$ . Da  $A_Z$  und  $A_S$  für unser Problem bekannt sind, erhalten wir durch Einsetzen

$$P = \frac{\pi}{988} N. \quad (3.10)$$

Jeweils ein Beispiel für eine Anordnung mit einer hohen und einer niedrigen Packungsdichte befindet sich in Abbildung 3.27. Zur Erzeugung der amorphen 2D-Strukturen diente ein Molekulardynamik-Algorithmus [48], welcher Realisierungen u. a. für eine gewünschte Packungsdichte generiert. Im Vergleich zwischen den sehr unterschiedlichen Zylinder-Strukturen wird ersichtlich, welche Bedeutung die Packungsdichte hinsichtlich der Unordnung hat. Den maximale Wert für Kreise im zweidimensionalen euklidischen Raum hat die hexagonale Anordnung mit  $P = \sqrt{3}\pi/6 \approx 90,69\%$  – natürlich nicht für die Gitterkonstante der bereits betrachteten Struktur aus Abbildung 3.5, sondern für  $a = 2r$ . Wenn wir also die Packungsdichte erhöhen, korrespondiert dies automatisch mit der Ordnung des Systems; wir können die betreffende Größe also in gewisser Weise auch als eine Art Unordnungsgrad auffassen.

In amorphen Strukturen mit niedriger Packungsdichte haben wir eine ausgesprochen geringe Reichweite der Ordnung, nur Nahordnung ist zu finden. Streuung tritt dann oft in einer bestimmten Längenskala auf. Mit steigender Packungsdichte, erhöht sich die Fernordnung – indes im linearen Sinne. Das lässt sich auch mathematisch z. B. über die sog. „Paarkorrelationsfunktion“ oder den „Strukturfaktor“ beschreiben, worauf ich aber nicht näher eingehen möchte.



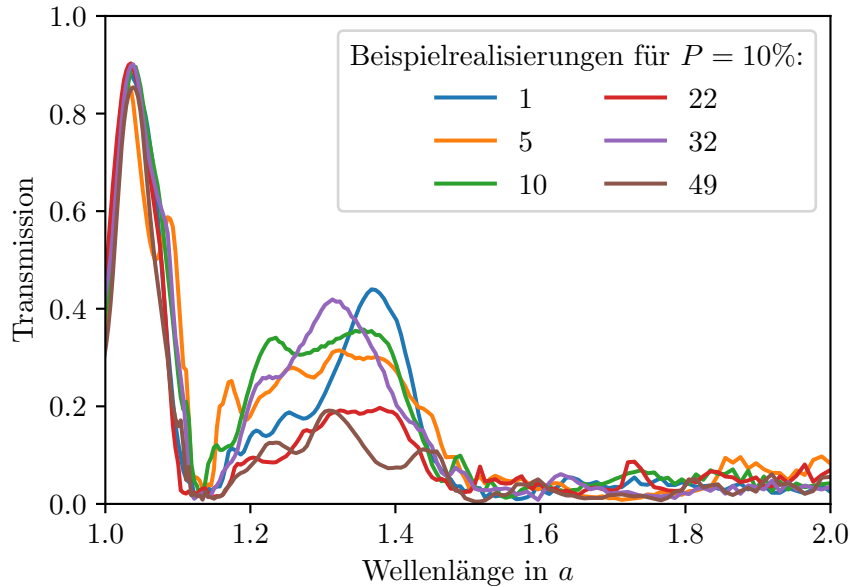
**Abbildung 3.27:** Zwei Realisierungen amorpher Anordnungen von Zylindern mit dem Radius  $r = a/4$  für jeweils unterschiedliche Packungsdichten  $P$ .

### 3.5.1 Spektren unterschiedlicher Realisierungen

Aus bisherigen Erfahrungen können wir bereits vermuten, dass für eine amorphe Struktur ein Transmissionsmaximum bei etwa  $\lambda = 1.0655 a$  auftreten muss, da für diese Wellenlänge die Gitterposition nur eine untergeordnete Rolle spielt – der Radius hat hingegen eine große Relevanz und ist gemäß unserer Festlegung für jeden Zylinder gleich. Wenn wir Abbildung 3.28 betrachten, sehen wir, dass sich diese Erwartung in der Tat erfüllt. Für sechs unterschiedliche amorphe Strukturen mit einer Packungsdichte von 10% ergeben sich stark variierende Spektren, die nur für das erste Maximum bei  $\lambda = 1.0655 a$  auffallend gut übereinstimmen; das zweite Maximum bei  $\lambda = 1.3184 a$  ist ebenfalls zu erkennen. Die Differenzen zwischen den Spektren der einzelnen Realisierungen sind indessen sehr hoch, was eine Diskrepanz zum ersten Maximum darstellt. Aus den bisherigen Ergebnissen wissen wir, dass das zweite Maximum u. a. sensibel auf Veränderungen der Gitterkonstante reagiert. Nun haben wir bei amorphen Strukturen keine solche Größe mehr – die Zylinder-Abstände variieren, und die einzelnen Realisierungen unterscheiden sich bzgl. jener Abstände. Dass die einzelnen Spektren die genannten Unterschiede widerspiegeln, ist deshalb nicht überraschend.

Neben den Maxima finden wir außerdem wieder Bereiche mit einer gegen Null gehenden Transmission. Die Definition einer Bandstruktur für amorphe Strukturen erweist sich als

schwierig; denn die Definition einer gitterperiodischen Funktion für Bloch-Wellenvektoren  $\mathbf{k}$  ist ohne Periodizität ausgeschlossen. Deshalb erhalten Transmissionsminima in der Literatur oft auch die Bezeichnung „Pseudobandlücke“ [13]. Statt der Bandstruktur bestünde für amorphe photonische Strukturen aber zumindest die Möglichkeit, die photonische Zustandsdichte über eine FDTD-basierte spektrale Methode zu berechnen [49].



**Abbildung 3.28:** Spektren aus Einzelrealisierungen amorpher Strukturen für eine Packungsdichte von 10%. Die Wellenlänge ist in Einheiten der Gitterkonstante des idealen Gitters aus Abbildung 3.1 angegeben.

Es liegt nahe, Realisierungen nicht nur für 10%, sondern auch für andere Packungsdichten zu vergleichen. Weitere Diagramme dieser Art hier aufzuführen würde allerdings den Rahmen sprengen und bringt außerdem wenig Erkenntnisgewinn. Sinnvoller erscheint es mir an dieser Stelle, die Differenzen zwischen den Einzelrealisierungen in einer Kenngröße auszudrücken. Die Transmissionsspektren einzelner Realisierungen variieren für feste Packungsdichten unterschiedlich stark. Zur genaueren Quantifizierung des Unterschiedes zweier Spektren erfolgt nunmehr die Integration über die Differenz der Spektren  $T_i$  und  $T_j$ :

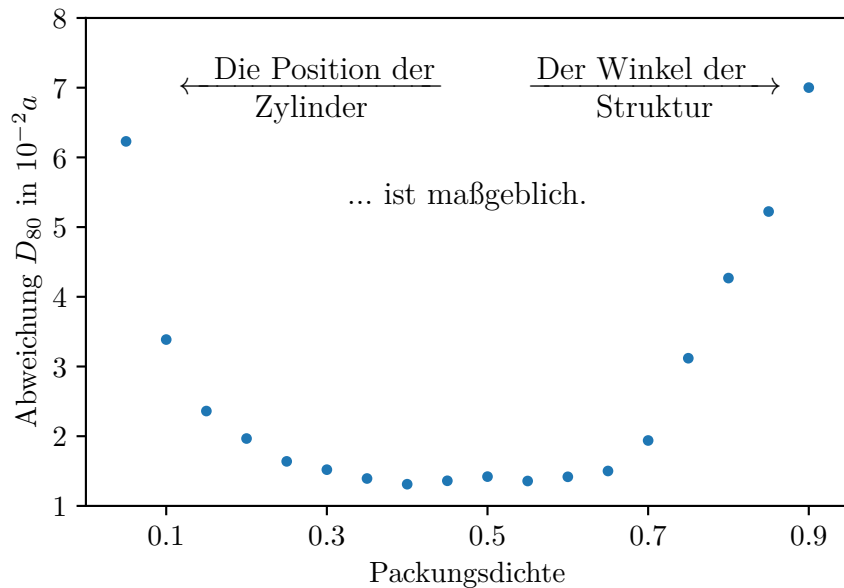
$$T_{ij} = \int |T_i(\lambda) - T_j(\lambda)| d\lambda. \quad (3.11)$$

Bei einer festen Packungsdichte können wir nun eine Größe konstruieren, welche als Maß für die Abweichung der Spektren dient. Für eine Anzahl von  $N$  Spektren definieren wir:

$$D_N = \frac{2}{N(N-1)} \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N T_{ij} \quad (3.12)$$



und bezeichnen sie als „spektrale Abweichung“. Abbildung 3.29 zeigt nun jene Größe für Packungsdichten von fünf bis hin zu zehn Prozent. Jeder Wert setzt sich aus Differenzen zwischen  $N = 80$  Spektren zusammen – für diese Anzahl sind die Werte bereits gut konvergiert. Es stellt sich heraus, dass die spektrale Abweichung ein Minimum bei etwa 50% aufweist und an den Grenzen für hohe und niedrige Packungsdichten divergiert, was zunächst vielleicht überrascht. Für die verschiedenen Unordnungsansätze aus den vergangenen Kapiteln war die spektrale Abweichung für unterschiedliche Unordnungsgrade in etwa gleich – es gab also kein Minimum. Bei der Erzeugung amorpher Strukturen müssen also fundamentale Mechanismen zugrunde liegen, die zu jenem merklichen Verhalten führen.

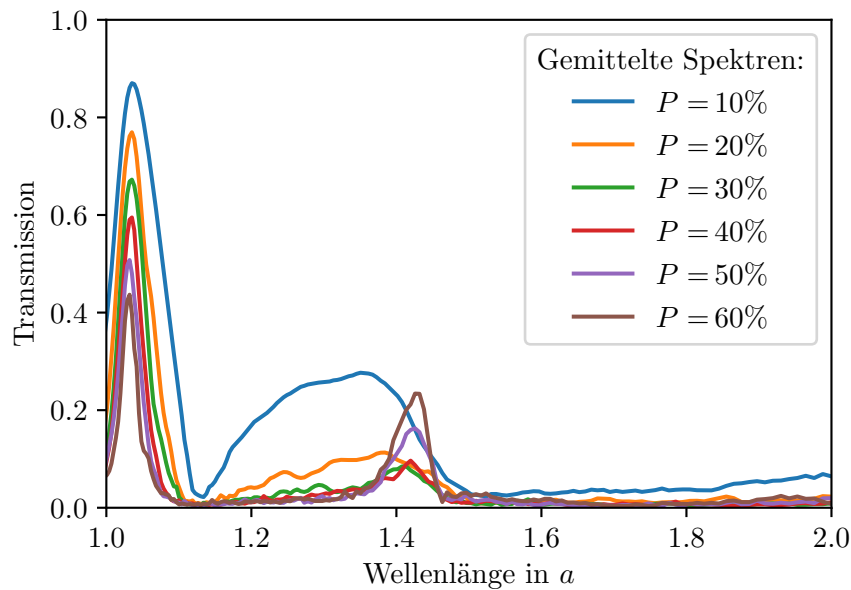


**Abbildung 3.29:** Die spektrale Abweichung aus jeweils  $N = 80$  Spektren unterschiedlicher Realisierungen amorpher Strukturen, dargestellt über der Packungsdichte.

Für niedrige Packungsdichten ist eine Erklärung einfach: Da die Zylinder wenig Fläche im Dispersionsmedium einnehmen, hat ein einzelner Zylinder weitaus mehr Positionsmöglichkeiten – die Zelle ist dünn besetzt im Gegensatz zu höheren Packungsdichten. Mit steigendem Wert gibt es für die Zylinder eine immer geringer werdende Anzahl von Anordnungsmöglichkeiten, sodass die Spektren weniger voneinander abweichen. Wie erwähnt, kommt es dann aber auch zu einem Wendepunkt um 50%. Zwar haben die Zylinder bei hohen Packungsdichten weniger Positionsmöglichkeiten, allerdings gewinnt dann der Winkel zwischen Quelle und Struktur vermehrt an Bedeutung. Je nach Orientierung unterscheiden sich die Spektren somit stark und die spektrale Abweichung steigt an.

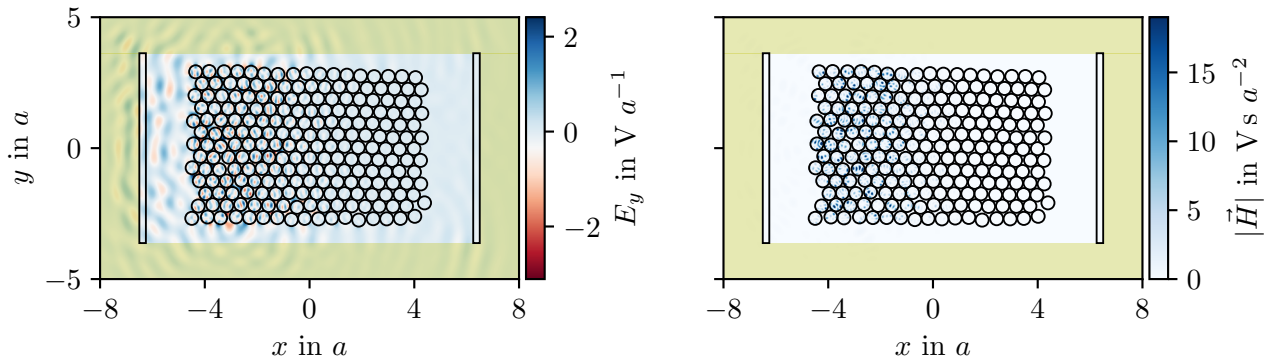
### 3.5.2 Spektren unterschiedlicher Packungsdichten

Welche konkreten Auswirkungen hat eine Veränderung der Packungsdichte nun auf die Transmissionsspektren der amorphen Zylinder-Anordnungen? Um jener Frage nachzugehen, betrachten wir verschiedene Spektren, die in Abbildung 3.30 gemeinsam für unterschiedliche Packungsdichten dargestellt sind. Auch hier entspricht jedes Spektrum einer Mittelung aus mehreren Transmissionsspektren – zwecks des Ausgleichs von Schwankungen. Wie wir gesehen haben, ist die Variation der Spektren einzelner Realisierungen für amorphe Anordnungen recht hoch. Daher erfolgt ab sofort eine Mittelung von Spektren 80 verschiedener Einzelrealisierungen für jede Packungsdichte.



**Abbildung 3.30:** Spektren von zufälligen Anordnungen von Zylindern für unterschiedliche Packungsdichten. Die Wellenlänge ist in Einheiten der Gitterkonstante des idealen Gitters aus Abbildung 3.1 angegeben.

Die Ergebnisse zeigen deutlich, dass sich die Transmission für höhere Packungsdichten verringert, was für beide Extrema im festgelegten Spektralbereich gilt. Ebenda stoßen wir jedoch auf ein Paradoxon: Es scheint, als wäre eine hohe Packungsdichte gleichbedeutend mit einer hohen Unordnung; denn für alle untersuchten Ansätze für die Störung von Ordnung trat ein ähnliches Verhalten auf. Wenn wir uns allerdings Abbildung 3.31 ansehen, finden wir bereits für  $P = 80\%$  eine außerordentlich geordnete Struktur vor; für eine solch hohe Packungsdichte muss die Struktur zwangsläufig geordnet sein. Dennoch sieht man im Wellenbild, wie stark die Wellen bereits an den ersten Zylinderreihen abgeschirmt werden. Von einer niedrigen Transmission kann also nicht automatisch auf eine ungeordnete Struktur geschlossen werden – auch perfekt geordnete Zylinder-Anordnungen vermögen je nach Bandstruktur bestimmte Wellenlängen zu blockieren.



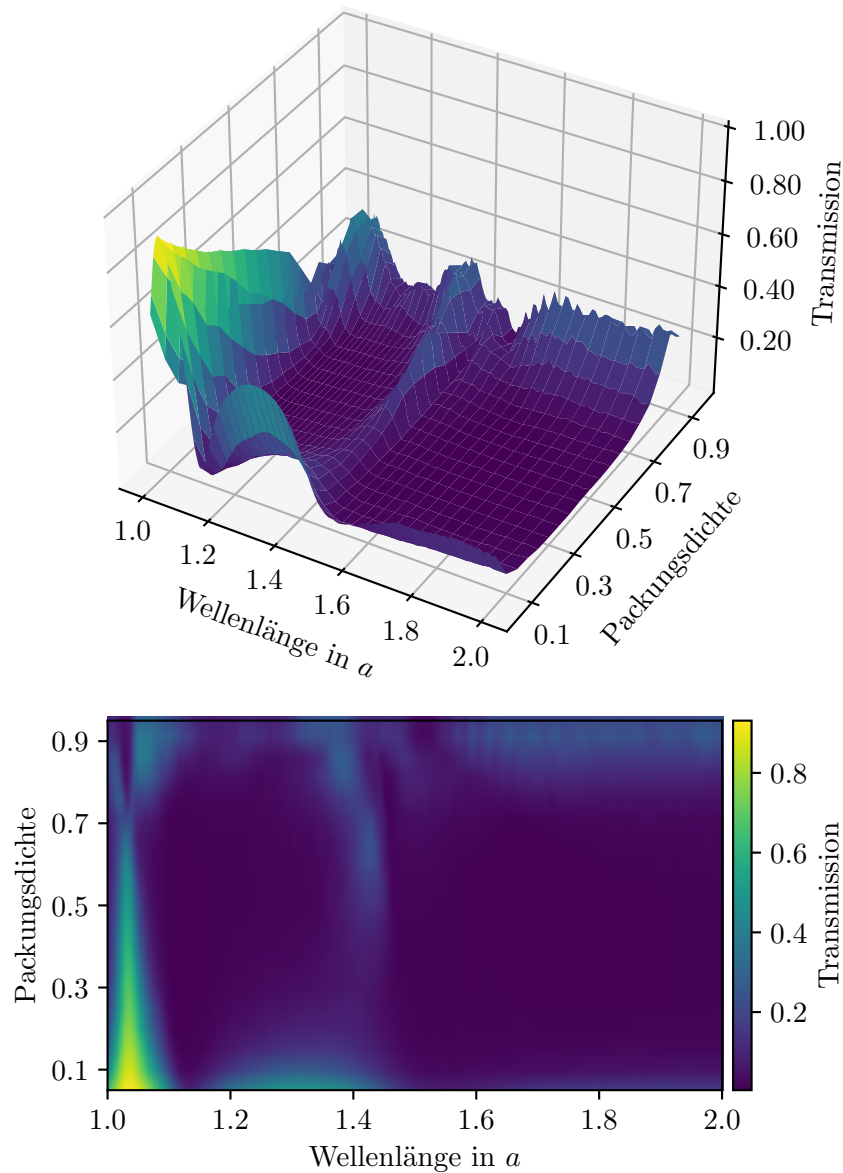
**Abbildung 3.31:** Amorphe Anordnung von Zylindern mit dem Radius  $r = a/4$ , welcher sich auf die Gitterkonstante des geordneten Gitters aus Abbildung 3.1 bezieht. Innerhalb der Simulationszelle ist die Komponente der Quelle (links) und der Betrag des Magnetfeldes (rechts) für den Fall von TM-Moden dargestellt; verwendet wurde eine Linienquelle.

Betrachten wir in dem Zusammenhang ein interessantes Phänomen: Um  $\lambda = 1.4 a$  ist eine spektrale Verschiebung des zweiten Maximums zu beobachten. Gut erkennbar wird jener Sachverhalt erst bei  $P > 40\%$  und noch deutlicher in Abbildung 3.32 mit dem bereits vertrauten 3D- und Farbdigramm der Spektren – nur diesmal mit der Packungsdichte. Dass das verschobene zweite Maximum bis zu  $P = 90\%$  ansteigt, können wir unter folgender Begründung als Indiz für ein Ordnungsphänomen interpretieren:

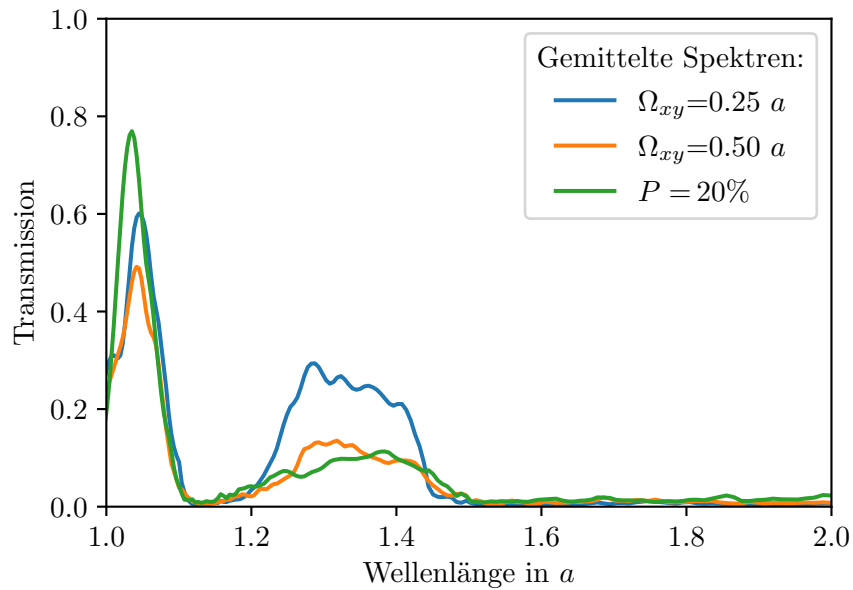
Weil die Gitterkonstante mit  $a \approx 2r$  verändert und die Anordnung näherungsweise hexagonal ist, entsteht ergo auch eine neue Bandstruktur, die andere Transmissionsmaxima hervorbringt – wobei Abweichungen vom idealen Gitter inbegriffen sind. Jene Erklärung wird zusätzlich dadurch gestützt, dass zunächst hauptsächlich das zweite Maximum davon betroffen ist und das erste eine wesentlich geringere spektrale Verschiebung erfährt. Zur Erinnerung: das erste Maximum entsteht vor allem durch den Radius, der ja nicht verändert wurde. Demgemäß bleiben in der Bandstruktur Photonen-Zustände um die entsprechende Wellenlänge  $\lambda = 1.0655 a$  eher erhalten. Nichtsdestotrotz erfährt das erste Maximum eine leicht hypsochrome spektrale Verschiebung – nur erst ab einer Packungsdichte von 70%, was ausschließlich im Farbdigramm sichtbar wird.

Nachdem wir nun amorphe Anordnungen betrachtet haben, bietet sich abschließend noch ein interessanter Vergleich an: Inwieweit ähnelt das Spektrum eines geordneten Gitters mit gestörten Zylinderpositionen dem Spektrum einer amorphen Anordnung? Um beide Ansätze gut vergleichen zu können, sollte natürlich die Packungsdichte übereinstimmen. Weil die bisher untersuchte Quadratgitter-Struktur einen Wert von etwa  $P \approx 22\%$  aufweist, legen wir die Packungsdichte der amorphen Struktur auf 20%. Abbildung 3.33 zeigt uns die Resultate: ein Spektrum aus zehn Realisierungen für einen Unordnungsgrad von  $\Omega = 0.25 a$ , eines für  $\Omega = 0.50 a$  und letztlich das gemittelte Spektrum von zehn amorphen Strukturen. Grundsätzlich können wir deutlich sehen, dass die Spektren eine große Ähnlichkeit aufweisen und die Lage der Maxima ziemlich gut übereinstimmt.

Überraschend ist das nicht unbedingt – bei großer Unordnung verkörpert die Packungsdichte ohnehin die entscheidende Größe des Systems – allerdings zeigt es uns auch die Konsistenz des Übergangs zwischen den grundsätzlich verschiedenen Ansätzen zur Generierung ungeordneter Strukturen.



**Abbildung 3.32:** 18 Transmissionen (jeweils aus 80 Einzelspektren gemittelt) für TM-Moden, dargestellt über der Packungsdichte; einmal als dreidimensionale (oben) und einmal als zweidimensionale Darstellung (unten) mit gemeinsamer Farbskala.



**Abbildung 3.33:** Vergleich zwischen dem Spektrum einer amorphen Struktur mit zwei Spektren von Strukturen, deren Zylinderpositionen zufällig verschoben wurden.

Im Hinblick auf die Höhe der Transmissionsmaxima, treten sowohl beim ersten als auch beim zweiten Maximum Abweichungen zwischen den Spektren auf. Eine bessere Übereinstimmung im zweiten Maximum konnte über die Erhöhung des Unordnungsgrades auf  $\Omega = 0.50 a$  erreicht werden. Da in dem Fall  $\Omega > 0.25 a$  gilt, waren Überlappungen gestattet, was allerdings auch die Packungsdichte minimal verringerte. Eine Konsequenz der Zylinder-Überlappung war aber notwendigerweise auch das Absinken des ersten Maximums; denn wenn Zylinder übereinander liegen, wird dadurch der Zylinderradius indirekt verändert.

# 4 Zusammenfassung

## 4.0.1 Inhalt der Arbeit

Ausgangspunkt für die Untersuchungen von Unordnung war zunächst ein geordnetes System aus im Quadratgitter angeordneten Zylindern. Es fungierte als Bezugspunkt für die Definition von Unordnungsgraden und ermöglichte ein kontrolliertes Einschalten von Unordnung, was eine wesentliche Grundlage zum besseren Verständnis der Problematik darstellte. Die Berechnung von Transmissionsspektren offenbarte das Auftreten von zwei charakteristischen Maxima im gewählten Wellenlängenbereich. Ein Vergleich mit der photonischen Zustandsdichte zeigte, dass die Transmissionsminima mit den verarmten Bereichen der Zustandsdichte übereinstimmen.

Der kontrollierte Einbezug von Unordnung erfolgte über vier verschiedene Ansätze: Störung der Position, des Radius und des Brechungsindex einzelner Zylinder. Für die Positionsveränderungen wurde der Ansatz aus [30] verwendet und für die restlichen Fälle modifiziert. Aus den berechneten Spektren ging hervor, dass jegliche Art von Unordnung zu einer Verringerung der Transmission beiträgt, was bereits genannte Veröffentlichungen bestätigen [29,30,32,33,35]. Allerdings gab es Unterschiede zwischen den beiden Maxima. Das erste Maximum bei  $\lambda = 1.0655 a$  konvergierte für hohe Unordnung nur gegenüber Störungen des Radius und der Dielektrizitätskonstante gegen Null, während die Transmission im Bereich des zweiten Maximums bei  $\lambda = 1.3184 a$  immer sank und nur für die Positionsverschiebungen und den Einsatz von Fehlstellen nicht gegen Null konvergierte.

Um dieses merkwürdige Verhalten zu verstehen, erfolgte das Studium der Wirkungsmechanismen hinter den beiden Maxima. Es stellte sich heraus, dass das erste Maximum das Ergebnis einer Phasenverschiebung zwischen den Wellen in und außerhalb der Zylinder ist, wobei die Gitterkonstante nur eine untergeordnete Rolle spielt. Bei dieser Wellenlänge werden die durch Phasenverschiebung auftretenden destruktiven Interferenzen minimiert, was den Wellentransport erleichtert. Das zweite Maximum hängt hingegen sowohl vom Radius als auch von der Gitterkonstante ab.

Schlussendlich folgte noch die Untersuchung amorpher Anordnungen – allerdings mit festem Radius. Je nach Packungsdichte gab es eine unterschiedliche spektrale Abweichung zwischen den Spektren von Einzelrealisierungen. Dafür sind zwei gegensätzliche Mechanismen verantwortlich: einerseits die individuelle Positionierung der Zylinder und andererseits der Winkel der Struktur relativ zur Quelle. Bei einer Erhöhung der Packungsdichte sank die Transmission insgesamt und es bildete sich ein neues Maximum aus, was sich auf ein Ordnungsphänomen zurückführen lässt. Ein Vergleich der Resultate amorpher Strukturen mit jenen für Systeme, deren Ordnung durch Positionsveränderungen der Zylinder gestört wurde, zeigte schließlich, dass beide Ansätze gut vereinbar sind bzw. dass es einen fließenden Übergang gibt.

Insgesamt konnte ich einen guten Überblick über die unterschiedlichen Arten von Unordnung gewinnen. Gerade weil das zweidimensionale Quadratgitter eine besonders universelle Wahl

verkörpert, d. h. ohne zu große Einschränkungen der Allgemeinheit, lassen sich viele Erkenntnisse auch auf andere Systeme übertragen. Nach den Auseinandersetzungen mit dem Thema verstehe ich unterdessen besser, wie die Spektren zustande kommen, auf welche Mechanismen einzelne Maxima zurückzuführen sind und was Modifikationen bzw. Störungen des geordneten Systems bewirken. Von den erlangten Kenntnissen ausgehend, eröffnen sich neue Anknüpfungspunkte für weiterführende Arbeiten.

## 4.0.2 Ausblick

Die Robustheit des ersten Maximums gegenüber verschiedenen Unordnungsansätzen eröffnet einige interessante Erkenntnisse im Bezug auf den Wellentransport. Wellen mit dieser Wellenlänge können selbst bei starker Unordnung immer noch gut durch die Struktur transmittieren. Ferner ist davon auszugehen, dass für jeden Zylinderradius solch eine optimale Wellenlänge existiert, bei welcher destruktive Interferenz minimiert wird. Allerdings wäre für die Fertigung entscheidend, den systematischen Fehler der Zylinderradien und der dielektrischen Konstanten zu reduzieren.

Für zukünftige Untersuchungen sind noch Kombination der verschiedenen Unordnungsansätze von Interesse. Außerdem stellt sich für das in dieser Arbeit gewählte Quadratgitter-System noch die Frage, was Unordnung ausschließlich innerhalb oder hingegen auf der Oberfläche der Struktur bewirkt; für andere Anordnungen gibt es dazu bereits Veröffentlichungen [30, 33]. Zusätzlich ist auch das Einbringen von Liniendefekten von grundsätzlichem Interesse – vor allem für Wellenleiter, die einen Transport für beliebige Krümmungsradien ermöglichen. Sodann wären noch Untersuchungen des Einflusses von Unordnung durch Störungen auf dreidimensionale photonische Kristalle interessant, da dies bisher wenig thematisiert wurde [50].

Nicht nur die geringe diesbezügliche Quantität an Publikationen im Gebiet der Photonik impliziert: Berücksichtigung von Unordnung ist längst nicht Usus [36]. Sie so gut es geht zu vermeiden oder sie aus Überlegungen auszuschließen, scheint oftmals die Devise zu sein. Fraglich ist, ob Konvergenz in Richtung Perfektion mehr Nutzen als Nachteile in Form von Voreingenommenheit und damit Distanz gegenüber möglicher Innovation bringt – vielleicht ist ein Perspektivwechsel notwendig. Alternativ kann sie aber auch als zugehöriger innewohnender Bestandteil statt als notwendiges Übel betrachtet werden. Das Einbeziehen von in der Realität auftretenden Effekten kann die Theorie bereichern und Nähe zum Experiment schaffen. Es birgt womöglich ungeahnte Vorteile, Abweichungen von unser selbstdefinierten Vollkommenheit als natürliche Gegebenheit zu betrachten und von vornherein einbeziehen. Wie so oft bietet die Natur mit ihrer inhärenten Komplexität mannigfaltige Anregungen, wodurch bereits Erfolge erzielt werden konnten [27]. Dennoch ist die Schnittstelle zwischen amorphen und geordneten Kristallen nach wie vor dünn besetzt und es gilt diese zu füllen. Ein möglicher Sinneswandel in genannter Sache birgt Chancen, die weit über den Bereich der Photonik hinausgehen.

# Literaturverzeichnis

- [1] KINOSHITA, S ; YOSHIOKA, S ; MIYAZAKI, J: Physics of structural colors. In: *Reports on Progress in Physics* 71 (2008), jun, Nr. 7, 076401. <http://dx.doi.org/10.1088/0034-4885/71/7/076401>. – DOI 10.1088/0034-4885/71/7/076401
- [2] JACOBS, Matthew ; LOPEZ-GARCIA, Martin ; PHRATHEP, O.-Phart ; LAWSON, Tracy ; OULTON, Ruth ; WHITNEY, Heather M.: Photonic multilayer structure of Begonia chloroplasts enhances photosynthetic efficiency. In: *Nature Plants* 2 (2016), Oct, Nr. 11, 16162. <http://dx.doi.org/10.1038/nplants.2016.162>. – DOI 10.1038/nplants.2016.162. – ISSN 2055-0278
- [3] VIGNOLINI, Silvia ; RUDALL, Paula J. ; ROWLAND, Alice V. ; REED, Alison ; MOYROUD, Edwige ; FADEN, Robert B. ; BAUMBERG, Jeremy J. ; GLOVER, Beverley J. ; STEINER, Ullrich: Pointillist structural color in Pollia fruit. In: *Proceedings of the National Academy of Sciences* 109 (2012), Nr. 39, 15712–15715. <http://dx.doi.org/10.1073/pnas.1210105109>. – DOI 10.1073/pnas.1210105109. – ISSN 0027-8424
- [4] ZI, Jian ; YU, Xindi ; LI, Yizhou ; HU, Xinhua ; XU, Chun ; WANG, Xingjun ; LIU, Xiaohan ; FU, Rongtang: Coloration strategies in peacock feathers. In: *Proceedings of the National Academy of Sciences* 100 (2003), Nr. 22, 12576–12578. <http://dx.doi.org/10.1073/pnas.2133313100>. – DOI 10.1073/pnas.2133313100. – ISSN 0027-8424
- [5] WELCH, Victoria ; VIGNERON, Jean P. ; LOUSSE, Virginie ; PARKER, Andrew: Optical properties of the iridescent organ of the comb-jellyfish *Beroë cucumis* (Ctenophora). In: *Phys. Rev. E* 73 (2006), Apr, 041916. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevE.73.041916>. – DOI 10.1103/PhysRevE.73.041916
- [6] PARKER, Andrew R. ; MCPHEDRAN, Ross C. ; MCKENZIE, David R. ; BOTTEN, Lindsay C. ; NICOROVICI, Nicolae-Alexandru P.: Aphrodite’s iridescence. In: *Nature* 409 (2001), Jan, Nr. 6816, 36-37. <http://dx.doi.org/10.1038/35051168>. – DOI 10.1038/35051168. – ISSN 1476-4687
- [7] LOPEZ-GARCIA, Martin ; MASTERS, Nathan ; O’BRIEN, Heath E. ; LENNON, Joseph ; ATKINSON, George ; CRYAN, Martin J. ; OULTON, Ruth ; WHITNEY, Heather M.: Light-induced dynamic structural color by intracellular 3D photonic crystals in brown algae. In: *Science Advances* 4 (2018), Nr. 4. <http://dx.doi.org/10.1126/sciadv.aan8917>. – DOI 10.1126/sciadv.aan8917
- [8] TEYSSIER, Jérémie ; SAENKO, Suzanne V. ; MAREL, Dirk van d. ; MILINKOVITCH, Michel C.: Photonic crystals cause active colour change in chameleons. In: *Nature Communications* 6 (2015), Mar, Nr. 1, 6368. <http://dx.doi.org/10.1038/ncomms7368>. – DOI 10.1038/ncomms7368. – ISSN 2041-1723



- [9] POUYA, C. ; VUKUSIC, P.: Electromagnetic characterization of millimetre-scale replicas of the gyroid photonic crystal found in the butterfly *Parides sesostris*. In: *Interface Focus* 2 (2012), Nr. 5, 645-650. <http://dx.doi.org/10.1098/rsfs.2011.0091>. – DOI 10.1098/rsfs.2011.0091
- [10] GAN, Zongsong ; TURNER, Mark D. ; GU, Min: Biomimetic gyroid nanostructures exceeding their natural origins. In: *Science Advances* 2 (2016), Nr. 5. <http://dx.doi.org/10.1126/sciadv.1600084>. – DOI 10.1126/sciadv.1600084
- [11] PRUM, R.O. ; TORRES, R. ; KOVACH, C. ; WILLIAMSON, S. ; GOODMAN, S.M.: Coherent light scattering by nanostructured collagen arrays in the caruncles of the malagasy asities (Eurylaimidae: aves). In: *Journal of Experimental Biology* 202 (1999), 12, Nr. 24, 3507-3522. <http://dx.doi.org/10.1242/jeb.202.24.3507>. – DOI 10.1242/jeb.202.24.3507. – ISSN 0022-0949
- [12] DUFRESNE, Eric R. ; NOH, Heeso ; SARANATHAN, Vinodkumar ; MOCHRIE, Simon G. ; CAO, Hui ; PRUM, Richard O. ; YALE): Self-assembly of amorphous biophotonic nanostructures by phase separation. In: *Soft Matter*. <http://dx.doi.org/10.1039/b902775k>. – DOI 10.1039/b902775k
- [13] DONG, B. Q. ; LIU, X. H. ; ZHAN, T. R. ; JIANG, L. P. ; YIN, H. W. ; LIU, F. ; ZI, J.: Structural coloration and photonic pseudogap in natural random close-packing photonic structures. In: *Opt. Express* 18 (2010), Jul, Nr. 14, 14430–14438. <http://dx.doi.org/10.1364/OE.18.014430>. – DOI 10.1364/OE.18.014430
- [14] SIMONIS, Priscilla ; VIGNERON, Jean P.: Structural color produced by a three-dimensional photonic polycrystal in the scales of a longhorn beetle: *Pseudomyagrus waterhousei* (Coleoptera: Cerambycidae). In: *Phys. Rev. E* 83 (2011), Jan, 011908. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevE.83.011908>. – DOI 10.1103/PhysRevE.83.011908
- [15] LI, Ling ; KOLLE, Stefan ; WEAVER, James C. ; ORTIZ, Christine ; AIZENBERG, Joanna ; KOLLE, Mathias: A highly conspicuous mineralized composite photonic architecture in the translucent shell of the blue-rayed limpet. In: *Nature Communications* 6 (2015), Feb, Nr. 1, 6322. <http://dx.doi.org/10.1038/ncomms7322>. – DOI 10.1038/ncomms7322. – ISSN 2041-1723
- [16] ZHANG, Jing ; ZHANG, Jingjing ; OU, Yangteng ; QIN, Yipeng ; WEN, Huilin ; DONG, Weiliang ; WANG, Rui ; CHEN, Su ; YU, Ziyi: Photonic Plasticines with Uniform Structural Colors, High Processability, and Self-Healing Properties. In: *Small* 17 (2021), Nr. 8, 2007426. <http://dx.doi.org/https://doi.org/10.1002/smll.202007426>. – DOI <https://doi.org/10.1002/smll.202007426>
- [17] PARKER, Andrew R. ; TOWNLEY, Helen E.: Biomimetics of photonic nanostructures. In: *Nature Nanotechnology* 2 (2007), Jun, Nr. 6, 347-353. <http://dx.doi.org/10.1038/nnano.2007.152>. – DOI 10.1038/nnano.2007.152. – ISSN 1748-3395

- [18] SOWADE, Blaudeck ; BAUMANN: Self-Assembly of Spherical Colloidal Photonic Crystals inside Inkjet-Printed Droplets. (2016). <http://dx.doi.org/10.1021/acs.cgd.5b01567>. – DOI 10.1021/acs.cgd.5b01567. – ISSN 1528–7483
- [19] SHANG, Guoliang ; EICH, Manfred ; PETROV, Alexander: Photonic glass based structural color. In: *APL Photonics* 5 (2020), Nr. 6, 060901. <http://dx.doi.org/10.1063/5.0006203>. – DOI 10.1063/5.0006203
- [20] ZHANG, Jing ; ZHANG, Jingjing ; OU, Yangteng ; QIN, Yipeng ; WEN, Huilin ; DONG, Weiliang ; WANG, Rui ; CHEN, Su ; YU, Ziyi: Photonic Plasticines with Uniform Structural Colors, High Processability, and Self-Healing Properties. In: *Small* 17 (2021), Nr. 8, 2007426. <http://dx.doi.org/10.1002/smll.202007426>. – DOI 10.1002/smll.202007426
- [21] SHI, Enzheng ; LI, Hongbian ; YANG, Long ; ZHANG, Luhui ; LI, Zhen ; LI, Peixu ; SHANG, Yuanyuan ; WU, Shiting ; LI, Xinming ; WEI, Jinqian ; WANG, Kunlin ; ZHU, Hongwei ; WU, Dehai ; FANG, Ying ; CAO, Anyuan: Colloidal Antireflection Coating Improves Graphene–Silicon Solar Cells. In: *Nano Letters* 13 (2013), Apr, Nr. 4, 1776–1781. <http://dx.doi.org/10.1021/nl400353f>. – DOI 10.1021/nl400353f. – ISSN 1530–6984
- [22] WANG, Wei ; ZHENG, Ang ; JIANG, Yifan ; LAN, Dongsheng ; LU, Fenghua ; ZHENG, Lelin ; ZHUANG, Lin ; HONG, Ruijiang: Large-scale preparation of size-controlled Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>@SiO<sub>2</sub> particles for electrophoretic display with non-iridescent structural colors. In: *RSC Adv.* 9 (2019), 498–506. <http://dx.doi.org/10.1039/C8RA08352E>. – DOI 10.1039/C8RA08352E
- [23] YI, Zichuan ; ZENG, Weibo ; MA, Simin ; FENG, Haoqiang ; ZENG, Wenjun ; SHEN, Shitao ; SHUI, Lingling ; ZHOU, Guofu ; ZHANG, Chongfu: Design of Driving Waveform Based on a Damping Oscillation for Optimizing Red Saturation in Three-Color Electrophoretic Displays. In: *Micromachines* 12 (2021), Nr. 2. <http://dx.doi.org/10.3390/mi12020162>. – DOI 10.3390/mi12020162. – ISSN 2072–666X
- [24] RÖHLIG, David: Simulation of bandgap properties for finite-size colloidal photonic structures [Konferenzbeitrag] CMD2020GEFES, Condensed Matter Divisions of the Spanish Royal Physics Society (RSEF-GEFES), European Physical Society (EPS-CMD), September 2020. – Mini-colloquium Plasmonic metamaterials: from surfaces to 3D supercrystals
- [25] KUHN, Eduard ; RÖHLIG, David ; SOWADE, Enrico ; RITTRICH, Dirk ; WILLERT, Andreas ; SCHULZ, Stefan E. ; BAUMANN, Reinhard R. ; THRÄNHARDT, Angela ; BLAUDECK, Thomas: Disorder explains dual-band reflection spectrum in spherical colloidal photonic supraparticle assemblies. In: *Nano Select* n/a, Nr. n/a. <http://dx.doi.org/https://doi.org/10.1002/nano.202100263>. – DOI <https://doi.org/10.1002/nano.202100263>

- [26] YANG, Jin-Kyu ; NOH, Heeso ; LIEW, Seng F. ; ROOKS, Michael J. ; SOLOMON, Glenn S. ; CAO, Hui: Lasing modes in polycrystalline and amorphous photonic structures. In: *Phys. Rev. A* 84 (2011), Sep, 033820. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevA.84.033820>. – DOI 10.1103/PhysRevA.84.033820
- [27] SIDDIQUE, Radwanul H. ; DONIE, Yidenekachew J. ; GOMARD, Guillaume ; YALAMANCHILI, Sisir ; MERDZHANOVA, Tsvetelina ; LEMMER, Uli ; HÖLSCHER, Hendrik: Bioinspired phase-separated disordered nanostructures for thin photovoltaic absorbers. In: *Science Advances* 3 (2017), Oktober, Nr. 10, e1700232. <http://dx.doi.org/10.1126/sciadv.1700232>. – DOI 10.1126/sciadv.1700232
- [28] SEGURA, D. ; VEGA, D. ; CARDADOR, D. ; RODRIGUEZ, A.: Effect of fabrication tolerances in macroporous silicon photonic crystals. In: *Sensors and Actuators A: Physical* 264 (2017), 172-179. <http://dx.doi.org/https://doi.org/10.1016/j.sna.2017.07.011>. – DOI <https://doi.org/10.1016/j.sna.2017.07.011>. – ISSN 0924-4247
- [29] YUAN, Tangwei ; FENG, Tianhua ; XU, Yi: Manipulation of transmission by engineered disorder in one-dimensional photonic crystals. In: *Opt. Express* 27 (2019), Mar, Nr. 5, 6483–6494. <http://dx.doi.org/10.1364/OE.27.006483>. – DOI 10.1364/OE.27.006483
- [30] LIMA, Leonardo L. ; ALENCAR, Márcio A. R. ; CAETANO, Dilson P. ; SOLLI, Daniel R. ; HICKMANN, Jandir M.: The effect of disorder on two-dimensional photonic crystal waveguides. In: *Journal of Applied Physics* 103 (2008), Juni, Nr. 12, S. 123102–123102–4. <http://dx.doi.org/10.1063/1.2939240>. – DOI 10.1063/1.2939240
- [31] FREI, W. R. ; JOHNSON, H. T.: Finite-element analysis of disorder effects in photonic crystals. In: *Phys. Rev. B* 70 (2004), Oct, 165116. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.70.165116>. – DOI 10.1103/PhysRevB.70.165116
- [32] BAYINDIR, Mehmet ; CUBUKCU, E. ; BULU, I. ; TUT, T. ; OZBAY, E. ; SOUKOULIS, C. M.: Photonic band gaps, defect characteristics, and waveguiding in two-dimensional disordered dielectric and metallic photonic crystals. In: *Phys. Rev. B* 64 (2001), Oct, 195113. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.64.195113>. – DOI 10.1103/PhysRevB.64.195113
- [33] KWAN, Kai-Chong ; ZHANG, Xiangdong ; ZHANG, Zhao-Qing ; CHAN, C. T.: Effects due to disorder on photonic crystal-based waveguides. In: *Applied Physics Letters* 82 (2003), Nr. 25, 4414-4416. <http://dx.doi.org/10.1063/1.1584512>. – DOI 10.1063/1.1584512
- [34] LANGTRY, T. N. ; ASATRYAN, A. A. ; BOTTEN, L. C. ; STERKE, C. M. ; MCPHEDRAN, R. C. ; ROBINSON, P. A.: Effects of disorder in two-dimensional photonic crystal waveguides. In: *Phys. Rev. E* 68 (2003), Aug, 026611. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevE.68.026611>. – DOI 10.1103/PhysRevE.68.026611

- [35] WANG, Donglin ; YU, Zhongyuan ; LIU, Yumin ; ZHOU, Shuai ; GUO, Xiaotao ; SHU, Changgan: Slight disorder effects in two dimensional photonic crystal structures. In: *Optik* 125 (2014), Nr. 18, 5418-5421. <http://dx.doi.org/https://doi.org/10.1016/j.ijleo.2014.06.021>. – DOI <https://doi.org/10.1016/j.ijleo.2014.06.021>. – ISSN 0030-4026
- [36] ROTHAMMER, Maximilian ; ZOLLFRANK, Cordt ; BUSCH, Kurt ; FREYMANN, Georg von: Tailored Disorder in Photonics: Learning from Nature. In: *Advanced Optical Materials* 9 (2021), Nr. 19, 2100787. <http://dx.doi.org/https://doi.org/10.1002/adom.202100787>. – DOI <https://doi.org/10.1002/adom.202100787>
- [37] CONRAD, Steffen: *Numerische Untersuchung metallischer Photonischer Kristalle*, Universität des Saarlandes, Diss., 2007
- [38] JONES, Philip H. ; MARAGÒ, Onofrio M. ; VOLPE, Giovanni: *Optical Tweezers: Principles and Applications*. Cambridge University Press, 2015. – ISBN 9781107051164. – Eingesehen am 06.04.2021
- [39] OSKOOI, Ardavan F. ; ROUNDY, David ; IBANESCU, Mihai ; BERMEL, Peter ; JOANNOPOULOS, J.D. ; JOHNSON, Steven G.: Meep: A flexible free-software package for electromagnetic simulations by the FDTD method. In: *Computer Physics Communications* 181 (2010), Nr. 3, 687-702. <http://dx.doi.org/https://doi.org/10.1016/j.cpc.2009.11.008>. – DOI <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2009.11.008>. – ISSN 0010-4655
- [40] TAFLOVE, Allen ; OSKOOI, A. (Hrsg.) ; JOHNSON, S. G. (Hrsg.): *Advances in FDTD Computational Electrodynamics: Photonics and Nanotechnology*. Artech House, 2013
- [41] SULLIVAN, Dennis M.: *Electromagnetic Simulation Using the FDTD Method, Second Edition*. The Institute of Electrical and Electronics Engineers, Inc., 2013
- [42] LIMA, Leonardo ; ALENCAR, Márcio ; CAETANO, Dilson ; SOLLI, Daniel ; HICKMANN, Jandir: The effect of disorder on two-dimensional photonic crystal waveguides. In: *Journal of Applied Physics* 103 (2008), 07, S. 123102 – 123102. <http://dx.doi.org/10.1063/1.2939240>. – DOI 10.1063/1.2939240
- [43] JACKSON, John D.: *Klassische Elektrodynamik*. De Gruyter, 2013. <http://dx.doi.org/doi:10.1515/9783110334470>. <http://dx.doi.org/doi:10.1515/9783110334470>. – ISBN 9783110334470
- [44] *gaussian-src*. [https://meep.readthedocs.io/en/latest/Scheme\\_User\\_Interface/#gaussian-src](https://meep.readthedocs.io/en/latest/Scheme_User_Interface/#gaussian-src). – Eingesehen am 17.08.2021
- [45] BERENGER, Jean-Pierre: A perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves. In: *ScienceDirect* 114 (1994), 10, S. 185–200. <http://dx.doi.org/10.1006/jcph.1994.1159>. – DOI 10.1006/jcph.1994.1159

- [46] *Transmittance/Reflectance Spectra*. <https://meep.readthedocs.io/en/latest/Introduction/#transmittancereflectance-spectra>. – Eingesehen am 06.03.2021
- [47] SALEH, Mohamed: *Band Structure of Some Photonic Crystals*, Diss., 02 2017. <http://dx.doi.org/10.13140/RG.2.2.20730.08646>. – DOI 10.13140/RG.2.2.20730.08646
- [48] SKOGE, Monica ; DONEV, Aleksandar ; STILLINGER, Frank H. ; TORQUATO, Salvatore: Packing hyperspheres in high-dimensional Euclidean spaces. In: *Physical Review E* 74 (2006), Oct, Nr. 4. <http://dx.doi.org/10.1103/physreve.74.041127>. – DOI 10.1103/physreve.74.041127. – ISSN 1550–2376
- [49] CHAN, C. T. ; YU, Q. L. ; HO, K. M.: Order-N spectral method for electromagnetic waves. In: *Phys. Rev. B* 51 (1995), Jun, 16635–16642. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.51.16635>. – DOI 10.1103/PhysRevB.51.16635
- [50] GARCÍA, P. D. ; SAPIENZA, R. ; TONINELLI, C. ; LÓPEZ, C. ; WIERSMA, D. S.: Photonic crystals with controlled disorder. In: *Phys. Rev. A* 84 (2011), Aug, 023813. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevA.84.023813>. – DOI 10.1103/PhysRevA.84.023813

# Abbildungsverzeichnis

|     |   |    |
|-----|---|----|
| 1.1 | TEM-Aufnahme von Kollagen-Arrays in der dunkelblauen Karunkel des <i>Neodrepanis coruscans</i> , Größenbalken entspricht 200 nm [11]. . . . .   | 4  |
| 1.2 | Fotografie des Bockkäfers <i>Pseudomyagrus waterhousei</i> (links), SEM-Aufnahme einer geteilten Schuppe (Mitte), mit geordnetem und ungeordnetem Bereich (rechts) [14]. . . . .  | 4  |
| 1.3 | Fotografien von fünf verschiedenen Arten von photonischen Plastilinen mit unterschiedlichen Silica-Partikelgrößen zwischen 182 und 263 nm (links). SEM-Aufnahme der Probe 2-G (rechts) [16]. . . . .  | 5  |
| 1.4 | Kolloidale Kugelpackungen aus Polystyrol-Partikeln mit einem Durchmesser von 305 nm eingebettet in Luft; dargestellt sind eine vollständig erhaltene (links) und eine aufgebrochene Kugel (rechts) [18]. . . . .  | 5  |
| 1.5 | SEM-Aufnahmen zweier GaAs-Membranen mit Arrays aus Luftlöchern in geordnete Domänen unterschiedlicher Orientierung; der Größenbalken entspricht 2 $\mu$ m [26]. . . . .   | 6  |
| 1.6 | Schematische Darstellung (links) und SEM-Aufnahme (rechts) eines dünnen „a-Si:H“-Films mit Luftlöchern auf einem Glas-Substrat [27]. . . . .  | 6  |
| 1.7 | Wellenbild der Intensität des elektrischen Feldes für eine geordnete photonische Anordnung von Zylindern mit einem gebogenen Liniendefekt (links); der Radius liegt bei $r = 0.3 a$ , ausgedrückt im Bezug auf die Gitterkonstante $a$ . Rechts daneben ist die gleiche Struktur mit Unordnung bzgl. des Radius dargestellt; die Wellenlänge der Quelle liegt jeweils bei $\lambda = 3.3 a$ [34]. . . . . | 7  |
| 2.1 | Darstellung des zweidimensionalen Yee-Gitters mit der typischen Anordnung der elektrischen und magnetischen Vektorkomponenten [38]. . . . .   | 13 |
| 2.2 | Simulationszelle ohne photonische Struktur mit einer Punktquelle (links) und dem Transmissionsgebiet (rechts). Innerhalb der Zelle ist die Komponente der Quelle, $E_y$ , dargestellt. . . . .  | 16 |
| 2.3 | Simulationszelle ohne photonische Struktur mit einer Linienquelle (links) und dem Transmissionsgebiet (rechts). Innerhalb der Zelle ist die Komponente der Quelle, $E_y$ , dargestellt. . . . .   | 17 |
| 3.1 | Anordnung von Zylindern im Quadratgitter mit der Gitterkonstante $a$ und einem Zylinderradius von $r = a/4$ ; die Zelle ist zudem vom nicht-reflektierenden Absorptionsschichten (kurz: PML's) umgeben. . . . .   | 18 |
| 3.2 | Anordnung von Zylindern mit dem Radius $r = a/4$ im Quadratgitter. Innerhalb der Simulationszelle ist die Komponente der Quelle (links) und der Betrag des Magnetfeldes (rechts) für den Fall von TM- und TE-Moden dargestellt. . . . .   | 19 |
| 3.3 | Zwei Ausschnitte aus der Simulationszelle für eine Anordnung von Zylindern mit dem Radius $r = a/4$ im Quadratgitter. Eingezeichnet sind die Feldvektoren einmal für TM-Moden mit $E_z = 0$ (oben) und einmal mit $H_z = 0$ für TE-Moden (unten). . . . .   | 21 |

|      |  |    |
|------|--|----|
| 3.4  | Transmission für TM- und TE- Moden für eine Anordnung von Zylindern mit dem Radius $r = a/4$ im Quadratgitter. . . . .   | 22 |
| 3.5  | Anordnung von Zylindern im hexagonalen Gitter mit der Gitterkonstante $a$ und dem Zylinderradius $r = a/4$ ; die Zelle ist zudem vom nicht-reflektierenden Absorptionsschichten (kurz: PML's) umgeben. . . . .   | 23 |
| 3.6  | Anordnung von Zylindern mit dem Radius $r = a/4$ im Quadratgitter. Innerhalb der Simulationszelle ist die Komponente der Quelle (links) und der Betrag des Magnetfeldes (rechts) für den Fall von TM-Moden dargestellt. . .                                      | 24 |
| 3.7  | Transmission für TM- und TE- Moden an einem hexagonalen Gitter mit der Gitterkonstante $a$ und einem Zylinderradius von $r = a/4$ . . . . .  | 25 |
| 3.8  | Vergleich der Transmission für TM-Moden in einem Ausschnitt des eigentlichen Wellenlängenbereichs am Quadratgitter und an einem hexagonalen Gitter – jeweils mit der Gitterkonstante $a$ und dem Zylinderradius $r = a/4$ . . . . .                              | 25 |
| 3.9  | Pfad im reziproken Raum zwischen drei Symmetriepunkten, welcher für die Bandstruktur gewählt wurde; farbig gekennzeichnet ist die reduzierte Brillouin-Zone. . . . .   | 26 |
| 3.10 | Photonische Bandstruktur für das Quadratgitter mit der Gitterkonstante $a$ und dem Radius $r = a/4$ . . . . .  | 27 |
| 3.11 | Vergleich des Transmissionsspektrums mit der photonischen Zustandsdichte zwischen den Punkten $\Gamma$ und X für das Quadratgitter mit dem Kreisradius $r = a/4$ . . . . .   | 28 |
| 3.12 | Zylinder-Anordnung im Quadratgitter mit der regulären Gitterkonstante $a$ und dem Zylinderradius $r = a/4$ . Die einzelnen Zylinder wurden mit einem Unordnungsgrad von $\Omega_{xy} = 0.25 a$ verschoben. . . . .   | 29 |
| 3.13 | Spektren für gestörte Quadratgitter-Anordnungen von Zylindern. Die Zylinderpositionen wurden für unterschiedliche Unordnungsgrade $\Omega_{xy}$ verschoben. . . . .  | 30 |
| 3.14 | 20 Transmissionsspektren für TM-Moden, dargestellt über dem Unordnungsgrad $\Omega_{xy}$ ; einmal als dreidimensionale (oben) und einmal als zweidimensionale Darstellung (unten) mit gemeinsamer Farbskala. . . . .   | 31 |
| 3.15 | Zylinder-Anordnung im Quadratgitter mit der Gitterkonstante $a$ und dem regulären Zylinderradius $r = a/4$ . Die einzelnen Zylinder wurden für einen Unordnungsgrad von $\Omega_r = 0.125 r$ verschoben. . . . .   | 33 |
| 3.16 | Spektren für gestörte Quadratgitter-Anordnungen von Zylindern. Die Zylinderradien wurden mit unterschiedlichen Unordnungsgraden $\Omega_r$ manipuliert. . . . .  | 33 |
| 3.17 | 17 Transmissionsspektren für TM-Moden, dargestellt über dem Unordnungsgrad $\Omega_r$ ; einmal als dreidimensionale (oben) und einmal als zweidimensionale Darstellung (unten) mit gemeinsamer Farbskala. . . . .  | 34 |
| 3.18 | Zylinder-Anordnung im Quadratgitter mit der Gitterkonstante $a$ und dem Zylinderradius $r = a/4$ . Die Änderung der Dielektrizitätskonstante $\epsilon_Z$ einzelner Zylinder erfolgte für einen Unordnungsgrad von $\Omega_\epsilon = 0.25 \epsilon_Z$ . . . . . | 35 |
| 3.19 | Spektren für gestörte Quadratgitter-Anordnungen von Zylindern. Die Dielektrizitätskonstanten der Zylinder wurden für unterschiedliche Unordnungsgrade $\Omega_\epsilon$ verändert. . . . .   | 36 |

|      |   |    |
|------|---|----|
| 3.20 | 17 Transmissionsspektren für TM-Moden, dargestellt über dem Unordnungsgrad $\Omega_\epsilon$ ; einmal als dreidimensionale (oben) und einmal als zweidimensionale Darstellung (unten) mit gemeinsamer Farbskala. . . . .  | 37 |
| 3.21 | Zylinder-Anordnung im Quadratgitter mit der Gitterkonstante $a$ und dem Zylinderradius von $r = a/4$ . Aus dem geordneten Gitter wurden 20 durch Pseudozufallszahlen ausgewählte Zylinder entfernt. . . . .   | 38 |
| 3.22 | Spektren für Quadratgitter-Anordnungen von Zylindern mit einer unterschiedlichen Anzahl von Fehlstellen. . . . .  | 39 |
| 3.23 | 15 gemittelte Transmissionsspektren für TM-Moden, dargestellt über der Anzahl an Fehlstellen; einmal als dreidimensionale (oben) und einmal als zweidimensionale Darstellung (unten) mit gemeinsamer Farbskala. . . . .   | 40 |
| 3.24 | Anordnung von Zylindern mit dem Radius $r = a/4$ im Quadratgitter. Innerhalb der Simulationszelle ist die Komponente der Quelle (links) und der Betrag des Magnetfeldes (rechts) für den Fall von TM-Moden dargestellt. Verwendet wurde eine monochromatische Linienquelle mit der in der Bandlücke liegenden Wellenlänge $\lambda = 1.8 a$ . . . . . | 42 |
| 3.25 | Ausschnitt des Wellenbildes für eine Quadratgitter-Anordnung (oben) und eine hexagonale Anordnung (unten) von Zylindern mit einer monochromatischen Linienquelle der Wellenlänge des ersten Maximums. . . . .   | 43 |
| 3.26 | Ausschnitt des Wellenbildes für eine Quadratgitter-Anordnung von Zylindern mit einer monochromatischen Linienquelle der Wellenlänge des zweiten Maximums. . . . .   | 44 |
| 3.27 | Zwei Realisierungen amorpher Anordnungen von Zylindern mit dem Radius $r = a/4$ für jeweils unterschiedliche Packungsdichten $P$ . . . . .  | 47 |
| 3.28 | Spektren aus Einzelrealisierungen amorpher Strukturen für eine Packungsdichte von 10%. Die Wellenlänge ist in Einheiten der Gitterkonstante des idealen Gitters aus Abbildung 3.1 angegeben. . . . .  | 48 |
| 3.29 | Die spektrale Abweichung aus jeweils $N = 80$ Spektren unterschiedlicher Realisierungen amorpher Strukturen, dargestellt über der Packungsdichte. . . . .   | 49 |
| 3.30 | Spektren von zufälligen Anordnungen von Zylindern für unterschiedliche Packungsdichten. Die Wellenlänge ist in Einheiten der Gitterkonstante des idealen Gitters aus Abbildung 3.1 angegeben. . . . .   | 50 |
| 3.31 | Amorphe Anordnung von Zylindern mit dem Radius $r = a/4$ , welcher sich auf die Gitterkonstante des geordneten Gitters aus Abbildung 3.1 bezieht. Innerhalb der Simulationszelle ist die Komponente der Quelle (links) und der Betrag des Magnetfeldes (rechts) für den Fall von TM-Moden dargestellt; verwendet wurde eine Linienquelle. . . . .     | 51 |
| 3.32 | 18 Transmissionen (jeweils aus 80 Einzelspektren gemittelt) für TM-Moden, dargestellt über der Packungsdichte; einmal als dreidimensionale (oben) und einmal als zweidimensionale Darstellung (unten) mit gemeinsamer Farbskala. . . . .  | 52 |
| 3.33 | Vergleich zwischen dem Spektrum einer amorphen Struktur mit zwei Spektren von Strukturen, deren Zylinderpositionen zufällig verschoben wurden. . . . .  | 53 |



# Selbstständigkeitserklärung

Hiermit erkläre ich, dass ich die vorliegende Arbeit selbstständig angefertigt, nicht anderweitig zu Prüfungszwecken vorgelegt und keine anderen als die angegebenen Hilfsmittel verwendet habe.

Sämtliche wissentlich verwendete Textausschnitte, Zitate oder Inhalte anderer Verfasser wurden ausdrücklich als solche gekennzeichnet.

.....  
Ort, Datum

.....  
Unterschrift des Verfassers