## Optische Wellenleiter und Mikroresonatoren in zweidimensionalen Photonischen Kristallen aus Makroporösem Silizium



DISSERTATION

ULB Sachsen-Anhalt

zur Erlangung des akademischen Grades doctor rerum naturalium (Dr. rer. nat.)

vorgelegt der

Mathematisch-Naturwissenschaftlich-Technischen Fakultät (mathematisch-naturwissenschaftlicher Bereich) der Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg

> von Herrn Albert Birner geb. am: 27.01.1969 in: Etsdorf

### Gutachter:

- 1. Prof. Dr. Ulrich M. Gösele
- 2. Prof. Dr. Hans-Reiner Höche
- 3. Prof. Dr. Jürgen Mlynek

Halle (Saale), 31. Januar 2000

"If only it were possible to make dielectric materials in which electromagnetic waves cannot propagate at certain frequencies, all kinds of almost-magical things would be possible." John Maddox, Nature **348**, 481 (1990)



"Genialität ist ein Prozent Inspiration und 99 Prozent Transpiration" Thomas Alva Edison (1847-1931)

# Inhaltsverzeichnis

1.	Einl	eitung		1
2.	Allg	emein	e Grundlagen	3
	2.1.	Elektro	onen und Photonen in gitterperiodischen Umgebungen	3
	2.2.	Grund	konzepte Photonischer Kristalle	4
	2.3.	Klassif	fizierung nach der Dimensionalität	5
		2.3.1.	Eindimensionale Photonische Kristalle	5
		2.3.2.	Zweidimensionale Kristalle	6
		2.3.3.	Dreidimensionale Kristalle	7
	2.4.	Bandst	truktur und Transmission von Multischichtsystemen	10
	2.5.	Theori	e gitterperiodischer Systeme	11
		2.5.1.	Berechnung von Bandstrukturen und Zustandsdichten	12
			2.5.1.1. Die makroskopischen Maxwell-Gleichungen	12
			2.5.1.2. Reziprokes Gitter	14
			2.5.1.3. Partialwellenentwicklung	15
		2.5.2.	Transmissionsrechnungen nach Sakoda	17
		2.5.3.	Finite-Difference Time-Domain Rechnungen	21
	2.6.	Defekt	strukturen in 2D Photonischen Kristallen	21
		2.6.1.	Wellenleiterstrukturen	22
			2.6.1.1. Aktuelles Beispiel aus der Literatur	22
			2.6.1.2. Bandstrukturen und Geometrien	23
		2.6.2.	Integrierte Mikrokavität	24
			2.6.2.1. Aktuelles Beispiel aus der Literatur	24

			2.6.2.2.	Geometrie einer Mikrokavität in makroporösem Silizium	25
			2.6.2.3.	Bandstruktur und Güte	26
			2.6.2.4.	Allgemeine Struktur der Grundmoden	28
			2.6.2.5.	Verlustmechanismen	29
	2.7.	Fabry-	Perot-Inter	ferenzen	29
	2.8.	Anwei	ndungen Pl	hotonischer Kristalle	31
		2.8.1.	Klassisch	ne Elektrodynamik	32
		2.8.2.	Nicht-lin	eare- und Quantenoptik	33
3.	Her	stellun	g 2D Pho	otonischer Kristalle	35
	3.1.	Grund	lagen		35
	3.2.	Elektro	ochemisch	es Ätzen von Makroporösem Silizium	36
	3.3.	Mikro	strukturieru	ung	41
4.	Pro	benprä	paration,	, Untersuchungsmethoden	43
	4.1.	Prober	präparatio	n für optische Messungen	43
	4.2.	Меваи	ıfbauten fü	r Transmissionsmessungen	44
		4.2.1.	Fourier-T	Transform-Infrarotspektrometer	44
		4.2.2.	Gepulster	s Differenzfrequenz(DFG)-System	45
		4.2.3.	Dauerstri	ch Optisch Parametrischer Oszillator (OPO)	47
5.	IR-o	ptisch	e Messur	ngen an defektfreien Kristallen	49
	5.1.	Fourie	r-Transfori	m IR Untersuchungen	50
		5.1.1.	Transmis	sionsmessungen T $(\vec{k},\sigma,r/a)$	50
		5.1.2.	Einfluß v	on dünnen Siliziumdioxidschichten	53
		5.1.3.	Bestimm	ung der Bandkanten im Experiment	55
		5.1.4.	Erstellun	g einer Gap map	56
		5.1.5.	Auswertu	ung der Fabry-Perot-Resonanzen	62
		5.1.6.	Identifizi	erung der Transmissionsbanden	65
		5.1.7.	Diskussio	on	66
		5.1.8.	Ausblick		67

## Inhaltsverzeichnis

	5.2.	Signalabschwächung bei Transmission weniger Kristallreihen	68
		5.2.1. Probengeometrie	68
		5.2.2. Messung der Signalabschwächung	70
		5.2.3. Diskussion	71
6.	Wel	lenleiter in Photonischen Kristallen	73
	6.1.	Gerade Wellenleiter	73
		6.1.1. Voruntersuchung: Transmissionsmessung an benachbarten Wellenleitern	73
		6.1.2. Transmissionsrechnung	75
		6.1.3. Transmissionsmessungen mit Differenzfrequenz-System	78
	6.2.	Abgewinkelte Wellenleiter	79
		6.2.1. Transmissionsrechnung und Feldverteilung	79
		6.2.2. Transmissionsmessungen mit Differenzfrequenz-System	82
	6.3.	Diskussion	83
	6.4.	Ausblick	84
7.	Mik	rokavitäten in 2D Photonischen Kristallen	85
7.	<b>Mik</b> 7.1.	rokavitäten in 2D Photonischen Kristallen Transmissionsrechnung	<b>85</b> 85
7.	<b>Mik</b> 7.1.	rokavitäten in 2D Photonischen Kristallen         Transmissionsrechnung         7.1.1.         Feldverteilung	<b>85</b> 85 87
7.	<b>Mik</b> 7.1.	rokavitäten in 2D Photonischen Kristallen         Transmissionsrechnung         7.1.1.         Feldverteilung         7.1.2.         Meßproblematik	<b>85</b> 85 87 88
7.	<b>Mik</b> 7.1. 7.2.	rokavitäten in 2D Photonischen Kristallen         Transmissionsrechnung         7.1.1.         Feldverteilung         7.1.2.         Meßproblematik         Transmissionsmessung mit Optisch-Parametrischem Oszillator	<b>85</b> 85 87 88 88
7.	<b>Mik</b> 7.1. 7.2. 7.3.	rokavitäten in 2D Photonischen Kristallen         Transmissionsrechnung         7.1.1.         Feldverteilung         7.1.2.         Meßproblematik         Transmissionsmessung mit Optisch-Parametrischem Oszillator         Diskussion	<b>85</b> 85 87 88 88 89 90
7.	Mika 7.1. 7.2. 7.3. 7.4.	rokavitäten in 2D Photonischen Kristallen         Transmissionsrechnung         7.1.1.         Feldverteilung         7.1.2.         Meßproblematik         Transmissionsmessung mit Optisch-Parametrischem Oszillator         Diskussion         Ausblick	<ul> <li>85</li> <li>85</li> <li>87</li> <li>88</li> <li>89</li> <li>90</li> <li>93</li> </ul>
7.	Miku 7.1. 7.2. 7.3. 7.4. Zus	Transmissionsrechnung	<ul> <li>85</li> <li>85</li> <li>87</li> <li>88</li> <li>89</li> <li>90</li> <li>93</li> <li>95</li> </ul>
7. 8. Ar	Miki 7.1. 7.2. 7.3. 7.4. Zus	rokavitäten in 2D Photonischen Kristallen   Transmissionsrechnung	<ul> <li>85</li> <li>85</li> <li>87</li> <li>88</li> <li>89</li> <li>90</li> <li>93</li> <li>95</li> <li>98</li> </ul>
7. 8. Ar A.	Mika 7.1. 7.2. 7.3. 7.4. Zus hang	rokavitäten in 2D Photonischen Kristallen   Transmissionsrechnung	<ul> <li>85</li> <li>85</li> <li>87</li> <li>88</li> <li>89</li> <li>90</li> <li>93</li> <li>95</li> <li>98</li> <li>98</li> </ul>
7. 8. Ar A. B.	Mika 7.1. 7.2. 7.3. 7.4. Zus hhang Infilt	Transmissionsrechnung   7.1.1. Feldverteilung   7.1.2. Meßproblematik   Transmissionsmessung mit Optisch-Parametrischem Oszillator   Diskussion   Ausblick   Ausblick   Tration von Flüssigkristallen in Photonische Kristalle   echnungstabellen für Energieskalen und Wellenlängenskala	<ul> <li>85</li> <li>87</li> <li>88</li> <li>89</li> <li>90</li> <li>93</li> <li>95</li> <li>98</li> <li>98</li> <li>101</li> </ul>

Inhaltsverzeichnis

Vorträge	109
Patentanmeldungen	109
Danksagung	110
Lebenslauf	112

# 1. Einleitung

Für die grundlegenden Eigenschaften von Halbleitern, dem Grundmaterial der sich seit Jahrzehnten sprunghaft entwickelnden Mikroelektronik, ist das dynamische Zusammenwirken von Elektronen verantwortlich. Dieses sorgt dafür, daß man die Ausbreitung von Elektronen in Halbleitern durch eine komplizierte elektronische Bandstruktur beschreiben muß, welche eine Energielücke aufweist. Der Ladungstransport ist im dominierenden Halbleiterbauelement, dem Transistor [1], sehr gut durch externe Potentiale kontrollierbar, so daß seit dessen Entdeckung eine Vielzahl von Bauelementen für die Schaltung und Verstärkung elektrischer Signale bis hin zu modernen Mikroprozessoren entwickelt wurden.

Was Elektronen in Halbleiterkristallen durch die Streuung am räumlich periodischen Potential der Kristallatome widerfährt, erleben in tiefgehender Analogie Photonen in Photonischen Kristallen: Mehrfachstreuungen an gitterperiodisch angeordneten "dielektrischen Atomen" führen zur Ausbildung einer optischen Bandstruktur. Für Wellenlängen, die mit der Gitterkonstante vergleichbar sind, können sich dabei optische Bandlücken ausbilden, welche sich fundamental auf die Lichtausbreitung sowie auf Emissionsprozesse in diesen meist künstlich hergestellten Strukturen auswirken. Es wurden neuartige quantenoptische Effekte, wie die räumliche Lokalisierung von Licht [2] und die Beeinflussung bzw. Unterdrückung der spontanen Emission von Leuchtzentren [3] durch Manipulation der spektralen Modendichte, vorhergesagt. Die Umsetzung der damit zusammenhängenden Konzepte steht augenblicklich an der Schwelle. So wurde kürzlich beispielsweise in der Optoelektronik in diesem Zusammenhang eine enorm gesteigerte Auskopplungseffizienz von Licht aus den aktiven Bereichen von Leuchtdioden (LEDs) berichtet [4]. Die zufriedenstellende Lösung dieses Problems wurde für die LED als letzte Hürde angesehen, um Glühbirnen überwiegend zu verdrängen.

Die vorhergesagten Eigenschaften Photonischer Kristalle lösten vor gut zehn Jahren intensive, anfangs ausschließlich grundlagenorientierte, Forschungsanstrengungen aus, die teilweise wie moderne Formen altbekannter Schildbürgerstreiche anmuteten. Grundlagenexperimente zum besseren Verständnis der Eigenschaften mehrdimensionaler Photonischer Kristalle waren bis 1996 [5] auf Untersuchungen im Mikrowellenbereich beschränkt. Das war dadurch bedingt, daß man nur für diesen sehr langwelligen Bereich des elektromagnetischen Spektrums (cm-Wellen) in der Lage war, ausgedehnte, periodisch strukturierte Dielektrika mit einer Gitterkonstante im Bereich der halben Wellenlänge (1 mm  $< \lambda < 1$  cm) hochgenau herzustellen. Diese Arbeit baut auf dem neuartigen Konzept von Grüning auf, Photonische Kristalle für den Infrarotbereich durch kontrollierte Formation von geordneten Makroporen in n-Silizium herzustellen [6]. Das farbige Bild nach der Titelseite zeigt die aufgrund von Gittereffekten farbig schimmernde Oberfläche eines solchen makroporösen Substrates.

Als eines der Ziele soll durch Untersuchungen an perfekt gitterperiodischen Kristallen ein tieferes Verständnis der Eigenschaften solcher Strukturen gewonnen werden. Desweiteren sollen erstmals optische Defektstrukturen, die in solche Makroporenkristalle eingebaut werden sollen, mittels Transmissionsuntersuchungen charakterisiert werden.

Die Einführung in die allgemeinen Grundlagen Photonischer Kristalle umfaßt die photonische Bandstruktur, Transmissionsrechnungen, Defektstrukturen und mögliche Anwendungen (Kapitel 2). Danach wird auf die elektrochemische Herstellung geordneter Makroporenkristalle (Kapitel 3) und deren Präparation für die infrarot-optische Charakterisierung, sowie auf die dafür verwendeten Meßaufbauten (Kapitel 4) eingegangen werden.

In Kapitel 5 sollen die Eigenschaften defektfreier Kristalle durch Verwendung von Fourier-Transform-Infrarot-Spektroskopie näher untersucht werden. Dabei wird vor allem auf das Transmissionsverhalten in Abhängigkeit von der Porösität der Strukturen eingegangen werden. Den Transmissionsspektren sind Fabry-Perot-artige Resonanzen überlagert, die näher untersucht werden sollen. Durch einen Vergleich der gemessenen Transmissionsbanden mit den gerechneten Bandstrukturen soll eine Zuordnung von Transmissionsbanden und Zustandsbändern versucht werden. Schließlich soll in diesem Kapitel das Transmissionverhalten von solchen Kristallen untersucht werden, die aus einer einzelnen Kristallreihe bzw. aus wenigen Kristallreihen aufgebaut sind, um das Dämpfungsverhalten für Wellenlängen innerhalb der Bandlücke zu untersuchen.

Die mit einem Differenzfrequenzaufbau gemessenen Transmissionsspektren von Wellenleiterstrukturen unterschiedlicher Geometrie, welche in ein Makroporengitter integriert wurden, sollen in Kapitel 6 mit Transmissionsrechnungen verglichen und diskutiert werden.

Im letzten experimentellen Kapitel sollen die Untersuchungen mit einem optisch-parametrischen Oszillator an einer integrierten Mikrokavität in den Vergleich zu theoretischen Erwartungen gestellt werden (Kapitel 7).

Schließlich wird durch eine Zusammenfassung in Kapitel 8 die vorliegende Arbeit abgerundet.

2

## 2. Allgemeine Grundlagen

## 2.1. Elektronen und Photonen in gitterperiodischen Umgebungen

In Halbleiterkristallen breiten sich Elektronenwellen in einem durch die Kristallatome vorgegebenen, gitterperiodischen Potential aus. Dabei wird die Dispersionsrelation freier Elektronen modifiziert: Es kommt zur Ausbildung einer elektronischen Bandstruktur mit einer Bandlücke, die z. B. im Anregungsspektrum dieser Materialien nachgewiesen werden kann. Durch gezieltes Einbringen von Defekten (Dotierung) können die elektronischen Eigenschaften dieser Werkstoffe seit vielen Jahrzehnten gezielt manipuliert und damit sozusagen maßgeschneidert werden. Nahezu die gesamte moderne Elektronik basiert auf diesen Materialien, vornehmlich auf Silizium.

Seit etwa zwölf Jahren ist das optische Analogon zu einem elektronischen Halbleiter, der sogenannte Photonische Kristall, Gegenstand intensiver Forschungsarbeiten. Bei Photonischen Kristallen handelt es sich um Materialien mit periodisch variierendem Brechungsindex, welche die Ausbreitung elektromagnetischer Wellen in ähnlicher Weise beeinflussen sollen, wie dies für Elektronenwellen in z. B. einem Gitter aus Siliziumatomen der Fall ist. In Analogie zu Halbleitern sollte dabei die Periodizität des zugrundeliegenden Gitters von der Größenordnung der Wellenlänge der zu streuenden Wellenobjekte, in unserem Fall der elektromagnetischen Strahlung, sein. Dies ist schematisch in Abb. 2.1 dargestellt. Trotz weitreichender Analogien zwischen elektronischen Wellen in Halbleitern



Abbildung 2.1.: Ausbreitung von Elektronenwellen bzw. Lichtwellen in Gittern der Periodizität der zugehörigen Wellenlängen.

und elektromagnetischen Wellen in Photonischen Kristallen, gibt es auch einige markante Unterschiede, wie man z. B. an den jeweiligen Bewegungsgleichungen erkennen kann. Darin werden Elektronen durch ein skalares Wellenfeld beschrieben, das elektromagnetische Feld dagegen besitzt vektoriellen Charakter. Weiterhin erlaubt die zeitunabhängige Schrödingergleichung Lösungen mit negativen Energieeigenwerten, während in der entsprechenden Wellengleichung der Elektrodynamik lediglich das Quadrat der Eigenfrequenzen auftritt, mithin negative Eigenwerte ausgeschlossen sind. Bei der Ausbreitung von Elektronenwellen in Halbleitern spielen Übergänge zwischen Elektronenniveaus bzw. -bändern eine sehr wichtige Rolle, während man sich bei Photonischen Kristallen auf das Vorhandensein bzw. das Fehlen von Moden geeigneter Frequenzen konzentriert. Es gibt nur sehr wenige natürlich vorkommende Photonische Kristalle. Von der Vielfalt optischer Erscheinungen sind lediglich die schillernden Effekte von Opalen und mancher Kristallite auf Schmetterlingsflügeln auf natürlich vorkommende Photonische Kristalle zurückzuführen. Aufgrund des Fortschrittes in den Nanotechnologien ist es wegen der extremen Miniaturisierungsanforderungen erst seit kurzem denkbar, Photonische Kristalle für den optischen bzw. infraroten Frequenzbereich in kontrollierter Weise künstlich herzustellen. Als gesichert gilt, daß ihnen bei der Realisierung neuartiger optischer Bauelemente eine Schlüsselrolle zukommen wird. Neben den technologischen Aspekten [4, 7, 8] eröffnen sie auch der Grundlagenforschung, insbesondere in der Quantenoptik, durch die Möglichkeit einer weitgehenden Kontrolle elektromagnetischer Wellen, völlig neue Wege [9–12].

## 2.2. Grundkonzepte Photonischer Kristalle

Im Jahre 1987 erschienen zwei Artikel von Yablonovitch und John, in welchen mehrdimensionale Photonische Kristalle zum ersten Mal näher betrachtet wurden: Yablonovitch [3] betrachtete den angeregten Zustand eines Atoms, das in einem Photonischen Kristall sitzt. Er postulierte, daß für diesen Zustand die spontane Emission mit Übergangsfrequenzen, die in der Bandlücke des Photonischen Kristalls liegen, verboten sein müßte. Weiterhin sagte er voraus, daß in den Photonischen Kristall gezielt eingebrachte Defekte, ähnlich dem Dotieren von Halbleitern, räumlich lokalisierte Zustände erzeugen müßten, die energetisch innerhalb der Bandlücke liegen. Bildlich könnte man sich einen lokalisierten Photonenzustand als eine Art Käfig mit unscharf definierten Wänden vorstellen, durch den die Ausbreitung von Lichtwellen auf einen kleinen Raumbereich eingeschränkt werden kann. Natürlich handelt es sich hier nicht um ein permanentes Einfangen und Einsperren von Photonen, dennoch ist die Verweilzeit in diesen Kavitäten auf einer photonischen Zeitskala enorm lang.

Einen gänzlich anderen Blickwinkel hatte John [2]: Mehrere Gruppen, die sich mit der Ausbreitung von Licht in ungeordneten Medien beschäftigt hatten, konnten zwar das optische Analogon zur schwachen Lokalisierung von Elektronen, die sogenannte "kohärente Rückstreuung", beobachten, waren aber bei der Suche nach starker Lokalisierung (Anderson-Lokalisierung), erfolglos geblieben. John argumentierte nun, daß Anderson-Lokalisierung von Licht, nicht wie im elektronischen Fall durch das Einbringen von Störstellen in ein homogenes Material, sondern durch das Amorphisieren eines Photonischen Kristalls möglich sein müßte: Die Bandlücke leicht gestörter Photonischer Kristalle bietet ideale Bedingungen für das Entstehen von zunächst isolierten photonischen Defektzuständen, die sich mit zunehmender Unordnung zu einem Kontinuum von Anderson-lokalisierten Zuständen verdichten können [11, 12].

## 2.3. Klassifizierung nach der Dimensionalität

### 2.3.1. Eindimensionale Photonische Kristalle

Am weitesten fortgeschritten ist die Herstellung und Untersuchung Photonischer Kristalle naturgemäß bei den einfachsten, den eindimensional periodischen Strukturen, welche z. B. seit vielen Jahrzehnten in optischen Labors als dielektrische Spiegel (Bragg stacks) und Interferenzfilter Verwendung finden. Einen interessanten Ansatz, um hierzu verwandte Strukturen auch in integrierter Form zu schaffen, machte kürzlich die Gruppe um Kimerling [13], die auf einem SOI-Substrat (Silicon-On-Insulator) einen Wellenleiter mit einem Durchmesser von ca. 0,5  $\mu$ m mittels Röntgenlithographie derart strukturierte, daß eine periodische Anordnung mit einer genau definierten, isolierten Defektstelle hergestellt werden konnte (vgl. Abb. 2.2). Man kann sich diese Struktur als Resonator relativ



**Abbildung 2.2.:** REM-Aufnahme einer eindimensionalen Wellenleiterstruktur aus Si (links). Durch gezielten Einbau von Löchern mit periodischem Abstand erzielt man eine resonatorartige Funktion des Wellenleiters, wie die Transmissionsmessung (rechts) belegt [11, 13].

hoher Güte vorstellen, in dem am Ort der Defektstelle eine drastische Überhöhung der elektromagnetischen Feldstärke stattfindet. Bei der Resonanzfrequenz ist dabei eine Transmissionsintensität von ca. 80% relativ zur Transmissionsintensität außerhalb der Photonischen Bandlücke gemessen worden. Das Volumen der resonanten Mode ist proportional zu  $(\lambda/2n)^3$  und wurde zu  $V = 0,055 \ \mu m^3$ , dem kleinsten bis dato realisierten Modenvolumen, abgeschätzt. Der gemessene Gütefaktor der Resonanz bei der Wellenlänge  $\lambda_c$  mit der Halbwertsbreite  $\Delta\lambda$ ,  $Q = \lambda_c/\Delta\lambda$ , lag mit einem Wert von 265 nur unwesentlich unter dem errechneten Wert von 280. In einem klassischen Resonator gibt der Gütefaktor in etwa die Zahl der Umläufe eines resonanten Wellenpaketes, und damit auch die Überhöhung des elektrischen Feldes innerhalb der Kavität an. In diesem Fall ist das makroskopische Bild von umlaufenden Wellenpaketen aber mit Vorsicht zu benutzen, da die mittlere optische Kavitätenlänge genau  $\lambda_c/2$  entspricht, also nur die longitudinale Grundmode in den Resonator paßt.

Besonders vorteilhaft an dieser Struktur ist, daß ihre kleine Periodenlänge von lediglich 0,42  $\mu$ m resonante Moden im technologisch für die optische Kommunikation über Glasfasern interessanten

Wellenlängenbereich um 1,55  $\mu$ m verwirklichen läßt. Diese Struktur ist auch für Untersuchungen an implantierten Er<sup>3+</sup>-Ionen, deren  ${}^{4}I_{13/2} \rightarrow {}^{4}I_{15/2}$  Übergang mit der Resonanz dieser Struktur zum Überlapp gebracht werden kann, geeignet.

#### 2.3.2. Zweidimensionale Kristalle

Bauen wir einen Kristall in zwei räumlichen Richtungen (x-y) gitterperiodisch und seine z-Richtung homogen auf, so kann man die Ausbreitung von Licht in der xy-Ebene durch eine Bandstruktur beschreiben, welche ebenfalls unter geeigneten Bedingungen Bandlücken aufweist. Das so entstandene Gebilde bezeichnen wir als 2D Photonischen Kristall (vgl. Abb. 3.7). Charakteristisch für diesen ist die Entkopplung des elektromagnetischen Vektorfeldes in Felder zweier verschiedener Polarisationsrichtungen. Da beide Polarisationsrichtungen unterschiedliches Verhalten zeigen, können 2D Kristalle z. B. für polarisationsabhängige Effekte genutzt werden. 2D Kristalle bringen herstellungstechnische Vorteile mit sich, da bekannte Verfahren, die zur Ausbildung kolumnarer Strukturen führen, Verwendung finden können [14–18, 90]. Jedoch ist der Einfluß von 2D Kristallen mit hohem Aspektverhältnis auf die 3D-Zustandsdichte bereits groß genug für eine Reihe von interessanten Anwendungen [19].

2D Photonische Kristalle wurden bis vor kurzem entweder aus einer makroskopischen Anordnung von Stäbchen [20] oder aus kleinen Bündeln von Glasfasern [21] aufgebaut und anschließend im Mikrowellen- bzw. Infrarotbereich studiert. Einen Durchbruch brachte der Versuch von Grüning und Lehmann, Siemens AG München, den von ihnen entwickelten Prozeß des elektrochemischen Wachsens regelmäßig angeordneter Makroporen in Silizium zu verwenden. Die hiermit möglich gewordenen Strukturen zeigten erstmals eine vollständige<sup>1</sup>, zweidimensionale Bandlücke im Infrarotbereich um 4,9  $\mu$ m Wellenlänge [5]. Basierend auf diesem Herstellungsverfahren sind im Ergebnisteil dieser Arbeit in Abb. 3.7 in einer REM-Aufnahme Wände einer weiterentwickelten Form von Makroporösem Silizium dargestellt, mit der Photonische Bandlücken zwischen 3  $\mu$ m und 4,5  $\mu$ m Wellenlänge realisiert werden können. Die vertikalen Wände wurden wiederum durch ein Mikrostrukturierungsverfahren hergestellt [22] um die optische Charakterisierung dieser Strukturen als 2D Kristall zu ermöglichen (vgl. Abschn. 3.3). Die 100  $\mu$ m langen Poren sind in einem hexagonalen Raster mit einer Gitterkonstante von  $a = 1,5 \ \mu$ m angeordnet.

Ein perfekt regelmäßiger Photonischer Kristall ist zunächst eine Miniaturform eines mehrdimensionalen, hochreflektierenden Spiegels für Wellenlängen innerhalb der Bandlücke. Durch die oben angesprochene Möglichkeit, die Porenkeime und damit den genauen Porenort mittels Lithographie festlegen zu können, erlangt man eine große Flexibilität bei der Herstellung dieser Kristalle. Diese Flexibilität macht sich insbesondere dann bezahlt, wenn es um die bereits erwähnte Dotierung im Sinne von Porenauslassung oder Verschiebung von Poren mit dem Ziel, Defekte in solchen Kristallen zu erzeugen, geht. Das Einbringen von Defekten und Defektstrukturen führt zu einer lokalen Brechung

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>,,vollständig" im Sinne von richtungs- und polarisationsunabhängig, jedoch beschränkt auf die zwei Dimensionen der Gitterperiodizität

der Translationssymmetrie. Typische Defektstrukturen sind beispielsweise Wellenleiterstrukturen, in denen Licht verlustfrei sogar um harte Knicke läuft [20] (im Gegensatz zu einem minimalen Biegeradius von Zentimetern bei optischen Fasern), und Mikroresonatoren sehr hoher Güte. Die Kapitel 6 und 7 werden sich mit laser-optischen Untersuchungen solcher Defektstrukturen im Spektralbereich des mittleren Infrarot beschäftigen.

#### 2.3.3. Dreidimensionale Kristalle

Aufgrund der Linearität der Maxwell-Gleichungen sind Photonische Bandstrukturen im Frequenzraum uneingeschränkt skalierbar. Dies brachte Yablonovitch auf die Idee, Photonische Kristalle zunächst mit Perioden im Millimeterbereich mittels Feinmechanik herzustellen, um deren Bandlücken durch Mikrowellenexperimente nachzuweisen. Er wollte einen Photonischen Kristall mit einer vollständigen Bandlücke bauen, der Ausbreitung für Licht einer bestimmten Frequenz in beliebigen Raumrichtungen durch eine Bandlücke zu verbieten vermochte. Anschaulich mußte die Brillouinzone des Photonischen Kristalls so beschaffen sein, daß für alle Raumrichtungen bei ungefähr denselben Frequenzen stehende Wellen erhalten werden konn-Deshalb sollte die Brillouinzone der Struktur möglichst kugelförmig sein. ten. Also wurde für die photonischen Atome, d. h. für die periodisch angeordneten dielektrischen Streuzentren, die kubisch-flächenzentrierte (fcc) Kristallstruktur als die aussichtsreichste erachtet. Bandstrukturrechnungen zeigten jedoch, daß bei einer ein-

atomigen Basis selbst für beliebig hohen Brechungsindexkontrast keine vollständige Bandlücke auftritt. Theoretiker der Iowa State University [24] entdeckten schließlich eine vollständige Bandlücke für eine Anordnung photonischer Atome gemäß der Diamantstruktur, einer fcc Struktur mit zweiatomiger Basis, welche eine bei der einatomigen fcc Struktur auftretende Polarisationsentartung gerade aufhebt. Eine entsprechende, bei Yablonovitch angefertigte Struktur, die mittlerweile unter dem Namen "Yablonovite" (vgl. Abb. 2.3) bekannt wurde [23], war der erste Photonische Kristall mit omnidirektionaler Bandlücke in der Evolutionsreihe der Photonischen Kristalle, wenn auch die Bandlücke nur im Mikrowellenbereich lag.<sup>2</sup>

Der Yablonovite konnte nicht ohne weiteres miniaturisiert werden, da man z. B. für Kristalle im optischen Spektralbereich präzise, dreidimensional ange-



**Abbildung 2.3.:** "Yablonovite" genannte Struktur, an der zuerst eine vollständige Photonische Bandlücke experimentell nachgewiesen wurde [23].

ordnete Kanäle mit weniger als 1 µm Durchmesser in Dielektrika bohren müßte. Für

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup>Es sei betont, daß ein Photonischer Kristall durchaus mehrere Bandlücken haben kann (vgl. Abb. 2.8). Am interessantesten aber ist in den meisten Fällen die niederfrequenteste, da diese für alle Hochsymmetrierichtungen des Kristalls jeweils meist am breitesten ist.

Photonische Kristalle im optischen Frequenzbereich mußte man folglich neue Herstellungsarten entwickeln bzw. nach neuen Strukturen Umschau halten. Es wurde eine einfach miniaturisierbare Anordnung, die sogenannte "Lincoln-logStruktur [25, 26] vorgeschlagen. Wie man in Abb. 2.4 sieht, ähnelt die Struktur einem luftigen Holzstoß, für den lange Scheite schichtweise parallel ausgerichtet und mit jeweils etwas seitlichem Abstand voneinander übereinandergestapelt wurden, wobei aufeinanderfolgende Schichten gekreuzt liegen. Übernächste Schichten sind gegeneinander mittig verschoben, so daß man die fünfte Schicht durch vertikale Verschiebung der ersten Schicht erhält. Hatte der erste dieser Kristalle noch eine Bandlücke bei einer Frequenz von 13 GHz (entspricht einer Wellenlänge von ca. 2,3 cm) [25], so wurde vor kurzem [26] mittels Mikrostrukturierung von Silizium-Wafern ein Kristall mit einer Bandlücke bei einer Wellenlänge von 11  $\mu$ m fabriziert. Die bisher erzielten Ausdehnungen dieser Kristalle waren jedoch vergleichsweise klein und der Aufwand zur Realisierung größerer Strukturen ist nicht unerheblich. Der oben erwähnte Kristall umfaßt z. B. lediglich 1,25 Perioden in vertikaler Richtung.

Unter geeigneten Sedimentationsbedingungen formen Kolloide periodische Strukturen, die sich in allen drei Raumrichtungen über mehrere hundert Einheitszellen ausdehnen können [27-29]. Solche Strukturen sind auch in der Natur bekannt und werden als "Opal" bezeichnet. Die für diese Sedimentationstechnik bisher verwendeten Materialien (meist SiO<sub>2</sub>-Kügelchen) besitzen jedoch nur recht kleine Brechungsindizes und die damit herstellbaren Kristalle kubischer Symmetrie haben selbst für größtmögliche Brechungsindexverhältnisse  $\eta = n_2/n_1$  der beiden Materialien keine vollständigen photonischen Bandlücken. Einen neuen Ansatz stellen hier die sogenannten Invertierten Opale dar. Vereinfacht kann das Rezept für diese Herstellung Invertierter Opale etwa folgendermaßen aussehen: Man stellt zunächst einen künstlichen Opal her, d. h. ein dichtgepacktes fcc Gitter aus monodispersen SiO<sub>2</sub>-Kügelchen ( $\varnothing \approx 100-1000$  nm). Diesen Opal unterzieht man einem Sinterprozeß, in dem er geringfügig schrumpft und



Abbildung 2.4.: Lincoln-log Struktur, aus Si-Stäben aufgeschichtet. Eine Einheitszelle erstreckt sich in vertikaler Richtung über vier Ebenen. Die Photonische Bandlücke dieser Struktur liegt etwa bei einer Wellenlänge von  $11 \ \mu$ m, wobei diese Angabe sich gewöhnlich auf die Vakuumwellenlänge bezieht

benachbarte Kügelchen mittels Hälsen aus SiO<sub>2</sub> fest verbunden werden. In die Hohlräume infiltriert man anschließend, meist durch Abscheidung aus der Gasphase, ein Material mit großem Brechungsindex. Abschließend wird zur Vergrößerung des dielektrischen Kontrastes das dreidimensionale SiO<sub>2</sub>-Netzwerk durch selektive Ätzung entfernt, was dadurch ermöglicht wird, daß alle SiO<sub>2</sub>-Kügelchen miteinander verbunden sind. Man betreibt also ein Art dreidimensionaler Abformung. Alternativ zu den SiO<sub>2</sub>-Kügelchen gibt es in jüngster Zeit auch vielversprechende Ansätze, monodisperse Latexkügelchen für die Herstellung des Negativs für die Infiltration zu verwenden. Latexkügelchen bringen zwei wesentliche Vorteile mit sich: Der Sedimentationsprozeß vereinfacht sich drastisch und gleichzeitig können diese Kügelchen wegen ihres organischen Ursprungs nach der Infiltration durch einen einfachen Temperaturschritt rückstandslos verbrannt werden.

Schon seit 1992 [30] ist bekannt, daß invertierte Opale eine vollständige Bandlücke aufweisen können, sofern das Brechungsindexverhältnis  $\eta = n_{\text{Diel}}/n_{\text{Luft}}$  größer als 2,9 ist. Kürzlich angestellte theoretische Studien [31] zeigen, daß man z. B. für einen invertierten Opal aus Silizium bzw. Germanium bei optimalem Füllverhältnis<sup>3</sup> eine Bandlückenbreite von ca. 10% bzw. 15% der Mittenfrequenz der Bandlücke erwarten kann. Besonders kritisch ist dabei das Volumenverhältnis der beiden Materialien: Vollständige Bandlücken existieren nur in einem relativ engen Bereich um die dichteste Kugelpackung, die bildlich einem "Schweizer Käse" sehr ähnelt. Die dichteste Kugelpackung selbst ist dabei aufgrund der verbundenen Hälse des SiO<sub>2</sub>-Gitters nur näherungsweise realisierbar. Tab. 2.5 gibt einen Überblick über die Brechungsindizes der z. B. für die Infiltration am häufigsten diskutierten Materialien.

Material	n
$SiO_2$	1,4
Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> (Korund)	1,7
$\mathrm{Si}_3\mathrm{N}_4$	2,1
C (Diamant)	2,4
ZnSe	2,4
$TiO_2$ (Rutil)	2,7
GaAs	3,1
Si	3,4
Ge	4,0

Abbildung 2.5.: Brechungsindizes einiger häufig verwendeter Materialien im Nahen Infrarot

Erst kürzlich hat eine Gruppe an der Universiteit van Amster-

dam erstmals über die erfolgreiche Herstellung invertierter Opale berichtet [32]. Hierbei wurden die Hohlräume zwischen den SiO<sub>2</sub> Kügelchen nahezu komplett mit TiO<sub>2</sub> ausgefüllt. Abb. 2.6 zeigt



Abbildung 2.6.: Rasterelektronenmikroskopische Aufnahmen von räumlich periodischen Strukturen, die durch Infiltration eines künstlichen Opals mit Titanoxid und anschließendes selektives Entfernen des Opals hergestellt wurde. Die Pfeile deuten beispielhaft auf Löcher in der Struktur hin, die durch die verbundenen Hälse der Opalmatrix (links) oder durch unvollständige Infiltration der Hohlräume (rechts) entstanden sind.

eine rasterelektronenmikroskopische (REM) Aufnahme des so entstandenen Gebildes mit einer Git-

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup>Aus theoretischer Sicht wäre ein 24,5% iger Anteil des Materials mit dem hohen Brechungsindex optimal [12].

terkonstante von ca. 0,5  $\mu$ m. Mit  $\eta \approx 2,7$  wurde die Schwelle für die Erlangung einer vollständigen Bandlücke bislang nicht durchbrochen [11, 12].

#### Bandstruktur und Transmission von Multischichtsystemen 2.4.

folgenden anschauliches Im soll ein Modell missionsrechnungen im eindimensionalen Abb. 2.7 zeigt ein dreischichtiges Medium,

das von einer nach links laufenden Welle der Amplitude a und einer nach rechts laufenden Welle der Amplitude b durchquert wird, wobei an den Grenzflächen Teilreflexionen auftreten. Werden die Amplitudenreflexions--transmissionskoeffizienten bzw. beim Übergang vom Medium i ins Medium j mit  $r_{ij}$  bzw.  $t_{ij}$  bezeichnet, so liefert die Addition des reflektierten und des transmittierten Anteils folgendes Gleichungssystem:



Bandstruktur-

und

werden

Trans-

[33, 34].

für

eingeführt

Fall

Abbildung 2.7.: Transmission durch Multischichten

$$a_i' = t_{ji}a_j + r_{ij}b_i' \tag{2.1}$$

$$b_j = t_{ij}b'_i + r_{ji}a_j \tag{2.2}$$

Stellt man dieses Gleichungssystem um, so erhält man die Amplituden im Medium i in Abhängigkeit der Amplituden im Medium *j*:

$$a'_{i} = \frac{t_{ij}t_{ji} - r_{ij}r_{ji}}{t_{ij}} a_{j} + \frac{r_{ij}}{t_{ij}} b_{j}$$
(2.3)

$$b'_{i} = -\frac{r_{ji}}{t_{ij}}a_{j} + \frac{1}{t_{ij}}b_{j}$$
(2.4)

bzw. in Matrixform:

$$\begin{pmatrix} a'_i \\ b'_i \end{pmatrix} = M_{ij} \begin{pmatrix} a_j \\ b_j \end{pmatrix} \quad \text{mit} \quad M_{ij} = \begin{pmatrix} \frac{t_{ij}t_{ji} - r_{ij}r_{ji}}{t_{ij}} & \frac{r_{ij}}{t_{ij}} \\ -\frac{r_{ji}}{t_{ij}} & \frac{1}{t_{ij}} \end{pmatrix}$$
(2.5)

Im Idealfall (ebene Grenzfläche, keine Streuung) können dann die Fresnelschen Gleichungen angewandt werden, um die Parameter  $t_{ij}$  und  $r_{ij}$  in Abhängigkeit der Brechungsindizes zu bestimmen, z. B. für s-Polarisation:

$$t_{ij}^{(s)} = \frac{2n_i \cos \theta_i}{n_i \cos \theta_i + n_j \cos \theta_j} \qquad \text{bzw.} \qquad r_{ij}^{(s)} = \frac{n_i \cos \theta_i - n_j \cos \theta_j}{n_i \cos \theta_i + n_j \cos \theta_j} \tag{2.6}$$

und für p-Polarisation

$$t_{ij}^{(p)} = \frac{\frac{2n_i}{\cos\theta_i}}{\frac{n_i}{\cos\theta_i} + \frac{n_j}{\cos\theta_j}} \qquad \text{bzw.} \qquad r_{ij}^{(p)} = \frac{\frac{n_i}{\cos\theta_i} - \frac{n_j}{\cos\theta_j}}{\frac{n_i}{\cos\theta_i} + \frac{n_j}{\cos\theta_j}}$$
(2.7)

Innerhalb der Medien stellen wir das Feld durch ebene Wellen dar:

$$\begin{pmatrix} a_i \\ b_i \end{pmatrix} = M_i \begin{pmatrix} a'_i \\ b'_i \end{pmatrix} \quad \text{mit} \quad M_i = \begin{pmatrix} e^{i\frac{2\pi n_i d}{\lambda}} & 0 \\ 0 & e^{-i\frac{2\pi n_i d}{\lambda}} \end{pmatrix}$$
(2.8)

Für die Berechnung der charakteristischen Matrix einer Vielschichtstruktur müssen noch die Matrizen der Einzelschichten und der Grenzflächen multipliziert werden:

$$\begin{pmatrix} a_1' \\ b_1' \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} a_n \\ b_n \end{pmatrix} \quad \text{mit} \quad M = \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{21} & m_{22} \end{pmatrix} = M_{12}M_2M_{23}M_3\dots M_{(n-1)n}$$
(2.9)

Die reflektierte bzw. transmittierte Amplitude ergibt sich aus den Elementen der Gesamtmatrix M für den Spezialfall  $a'_1 = r, b'_1 = 1, a_n = 0, b_n = t.$ 

$$r = \frac{m_{12}}{m_{22}}$$
 bzw.  $t = \frac{1}{m_{22}}$  (2.10)

Abb. 2.8 zeigt eine nach obigem Formalismus erstellte Transmissionsrechnung an einer dielektri-



**Abbildung 2.8.:** Transmissionsrechnung einer eindimensionalen Multischicht aus 16 Doppellagen ( $n_{\rm hi}$ =3,4,  $d_{\rm hi}$ =0,1 µm,  $n_{\rm lo}$ =1,5,  $d_{\rm lo}$ =1,3 µm) im Vergleich zu ihrer Bandstruktur für den komplexen Wellenvektor  $k + i\kappa$ . Die rechte Ordinate bezieht sich auf die blaue Kurve[35].

schen Multischicht. Zum Vergleich ist die Bandstruktur für den komplexen Wellenvektor  $k + i\kappa$ aufgetragen. Außerhalb der Bandlücken ist der Wellenvektor rein reell. In den Bandlücken erhält dieser einen komplexen Anteil. Dort sind keine ausgedehnten Zustände mehr vorhanden. Die Positionen der Fabry-Perot-Maxima in Abb. 2.8 sind mit der Phasengeschwindigkeit  $\omega/k$  verknüpft, während die Breite der Peaks mit der Gruppengeschwindigkeit  $\partial \omega/\partial k$  zusammenhängt [35].

## 2.5. Theorie gitterperiodischer Systeme

In Abschn. 2.5.1 betrachten wir zunächst den allgemeinen Fall eines unendlich ausgedehnten 3D Kristalls, um dessen Bandstrukturen und Zustandsdichten aus den Maxwellschen Gleichungen her-

zuleiten. Hierzu wird der Formalismus des Reziproken Gitters  $\mathcal{G}$  eingeführt (Abschn. 2.5.1.2), um Partialwellenentwicklungen nach  $\vec{G} \in \mathcal{G}$  durchführen zu können. Die zugehörigen Abbildungen beziehen sich jedoch bereits auf den in dieser Arbeit näher untersuchten 2D Kristall. Schließlich wird ein Formalismus für Transmissionsrechnungen an endlichen Systemen erläutert (Abschn. 2.5.2).

### 2.5.1. Berechnung von Bandstrukturen und Zustandsdichten

Zur Berechnung photonischer Bandstrukturen ist es, aufgrund der Verwandtheit der Helmholtz- (als Spezialfall der Maxwellschen Gleichungen) und der Schrödinger-Gleichung naheliegend, auf die Methoden der elektronischen Bandstrukturrechnung zurückzugreifen. Diese Vorgehensweise ist auch darin begründet, daß man in beiden Fällen die Wellenausbreitung in gitterperiodischen Strukturen behandelt. Dabei ist den spezifischen Unterschieden von photonischen und elektronischen Kristallen Rechnung zu tragen. Zum einen handelt es sich beim elektromagnetischen Feld um eine vektorielle Größe für das skalare Näherungen unzureichend sind. Zum anderen sind die "Streupotentiale" der dielektrischen Atome wohldefiniert und müssen nicht selbstkonsistent bestimmt werden.

#### 2.5.1.1. Die makroskopischen Maxwell-Gleichungen

Um die Wellengleichung für die elektrischen und magnetischen Eigenmoden harmonischer Zeitabhängigkeit  $e^{i\omega t}$  in einem dreidimensionalen, unendlich ausgedehnten Photonischen Kristall zu lösen, setzen wir die makroskopischen Maxwell-Gleichungen [36] (CGS-System) mit der elektrischen Feldstärke  $\vec{E}$  und der magnetischen Induktion  $\vec{B}$  an:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{D} = 4\pi\rho, \qquad (2.11)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{H} = \frac{4\pi}{c}\vec{J} + \frac{1}{c}\frac{\partial D}{\partial t},$$
 (2.12)

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} + \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} = 0$$
 (2.13)

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0. \tag{2.14}$$

Die makroskopischen Größen  $\vec{D}$  bzw.  $\vec{H}$  sind die dielektrische Verschiebung und die magnetische Feldstärke, welche die elektrische und magnetische Polarisierbarkeit des Mediums berücksichtigen. Im Falle eines linearen<sup>4</sup> und isotropen<sup>5</sup> Mediums sind diese Größen proportional zu  $\vec{E}$  bzw.  $\vec{B}$ :

$$\vec{D}(\vec{r},t) = \varepsilon(\vec{r},\omega)\vec{E}(\vec{r},t)$$
(2.15)

$$\vec{H}(\vec{r},t) = \frac{1}{\mu(\vec{r})} \vec{B}(\vec{r},t) .$$
(2.16)

<sup>4</sup>Die Polarisation P eines dielektrischen Mediums in Abhängigkeit von der elektrischen Feldstärke E wird gewöhnlich als folgende Reihenentwicklung geschrieben:  $P = \varepsilon_0 (\chi E + \chi_2 E^2 + \chi_3 E^3 + ...)$ . Die Koeffizienten  $\chi$  sind Tensoren,  $\chi_2$  ist beispielsweise der Kerr-Tensor. Von einem *linearen* Medium spricht man nur dann, wenn die Koeffizienten  $\chi_2, \chi_3, ...$  vernachlässigt werden können [34], wie im Fall von Silizium.

<sup>&</sup>lt;sup>5</sup>Bei anisotropen Medien kann ein analoger Formalismus mit den Tensoren  $\varepsilon_{ij}$  und  $\mu_{ij}$  aufgestellt werden.

Die beiden Proportionalitätsfaktoren,  $\varepsilon(\vec{r}, \omega)$  bzw.  $\mu(\vec{r})$  bezeichnet man als Dielektrizitätskonstante bzw. magnetische Permeabilität des Mediums. In absorptionsfreien Medien gilt  $\varepsilon \in \mathbb{R}^+$ . Die Frequenzabhängigkeit von  $\varepsilon(\vec{r}, \omega)$  kann man unter den gegebenen Bedingungen vernachlässigen, da die Dielektrizitätskonstante  $\varepsilon_{Si} = 11,76$  im Infrarot bei Wellenlängen zwischen 3 und 5  $\mu$ m nahezu konstant ist [37].

Wir betrachten nur solche dielektrischen Medien, für die  $\mu = 1$  eine sehr gute Näherung<sup>6</sup> ist. Verzichtet man nun noch auf freie Ladungen und Ströme, so vereinfachen sich die Maxwellschen Gleichungen zu:

$$\vec{\nabla} \cdot \varepsilon(\vec{r}) \vec{E}(\vec{r}, t) = 0, \qquad (2.17)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{H}(\vec{r},t) = \frac{\varepsilon(\vec{r})}{c} \frac{\partial \vec{E}(\vec{r},t)}{\partial t},$$
 (2.18)

$$\vec{\nabla} \times \vec{E}(\vec{r},t) + \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{H}(\vec{r},t)}{\partial t} = 0, \qquad (2.19)$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{H}(\vec{r},t) = 0. \qquad (2.20)$$

Durch einen Ansatz harmonischer Wellen für  $\vec{H}$  und  $\vec{E}$  separieren Zeit- und Ortsabhängigkeiten:

$$\vec{H}(\vec{r},t) = \vec{H}(\vec{r}) \cdot e^{i\omega t}$$
(2.21)

$$\vec{E}(\vec{r},t) = \vec{E}(\vec{r}) \cdot e^{i\omega t} . \qquad (2.22)$$

Setzt man dies in die Gleichungen 2.18, 2.19 ein, so findet man

$$\nabla \times E(\vec{r}) = \frac{-i\omega}{c} \vec{H}(\vec{r})$$
(2.23)

$$\nabla \times H(\vec{r}) = \frac{i\omega}{c} \varepsilon(\vec{r}) \vec{E}(\vec{r})$$
(2.24)

Durch eine Kombination dieser Gleichungen folgen die beiden gesuchten Wellengleichungen für die magnetischen und elektrischen Eigenmoden des Mediums:

$$\nabla \times \left(\varepsilon^{-1}(\vec{r})\nabla \times \vec{H}(\vec{r})\right) - \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \vec{H}(\vec{r}) = 0, \qquad (2.25)$$

$$\nabla \times \left(\nabla \times \vec{E}(\vec{r})\right) - \varepsilon(\vec{r}) \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \vec{E}(\vec{r}) = 0.$$
(2.26)

Im Sonderfall einer ortsunabhängigen Dielektrizitätskonstante  $\varepsilon(\vec{r}) = \varepsilon$  kann man die Felder  $\vec{H}(\vec{r})$  bzw.  $\vec{E}(\vec{r})$  in ebene Wellen  $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$  entwickeln, diese in die entsprechende Wellengleichung 2.25 bzw. 2.26 einsetzen und erhält unmittelbar den Zusammenhang

$$\frac{(\vec{k})^2}{\varepsilon} = \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \quad \text{bzw.} \quad \omega(\vec{k}) = \frac{c}{\sqrt{\varepsilon}} |\vec{k}|.$$
(2.27)

Gl. 2.27 stellt die Dispersionsrelation ebener Wellen in einem homogenen dielektrischen Medium dar, die sog. Lichtgerade mit der Steigung  $c/\sqrt{\varepsilon}$ . Im Vergleich zur Lichtausbreitung im Vakuum

<sup>&</sup>lt;sup>6</sup>Bei paramagnetischen ( $\mu > 1$ ) und diamagnetischen ( $\mu < 1$ ) Substanzen liegen die Abweichungen von Eins meist im Bereich  $\pm 10^{-5}$ . Bei ferromagnetischen Substanzen jedoch ist  $\mu = 1$  keine gute Näherung mehr [36].

 $(\varepsilon = 1)$  bedeutet dies, daß in einem Medium der Dielektrizitätskonstante  $\varepsilon$  der Wellenvektor  $\vec{k}$  einer ebenen Welle mit Frequenz  $\omega$  effektiv um den Faktor  $n = \sqrt{\varepsilon}$  vergrößert und damit ihre Wellenlänge  $\lambda = 2\pi/|\vec{k}|$  um  $1/\sqrt{\varepsilon}$  verringert ist.

Im Falle Photonischer Kristalle ist  $\varepsilon(\vec{r})$  per definitionem keine Konstante und damit muß die Wellengleichung 2.25 bzw. 2.26 explizit gelöst werden. Für die Berücksichtigung räumlich periodischer Potentiale bei der Betrachtung von Wellenausbreitungen wurde das Konzept des Reziproken Gitters entwickelt. Die wichtigsten Eigenschaften sollen im nächsten Abschnitt kurz aufgerollt werden.

#### 2.5.1.2. Reziprokes Gitter

Ein Kristall zeichnet sich dadurch aus, daß die Bausteine (i. a. Atome), aus denen er aufgebaut ist, räumlich periodisch angeordnet sind. Vergißt man zunächst die Struktur der Kristallbausteine und betrachtet diese stattdessen als Punkt, so erhält man deren Translationsgitter. Dieses Gitter  $\mathcal{R}$  wird durch drei primitive Translationsvektoren  $\vec{a}_1$ ,  $\vec{a}_2$  und  $\vec{a}_3$  erzeugt und  $\mathcal{R} =$  $\vec{R} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3$ ,  $n_1, n_2, n_3 \in \mathbb{Z}^3$  definiert. Aus dieser Definition geht klar hervor, daß man mit diesem Formalismus zunächst unendlich ausgedehnte Kristallsysteme betrachtet. Diese Voraussetzung wird weiter unten an Gegebenheiten realer Systeme angepaßt (s. Abschn. 2.5.2).



**Abbildung 2.9.:** Zweidimensionales hexagonales Translationsgitter der Gitterkonstante *a*. In der Realraumdarstellung (links) sind die beiden primitiven Einheitsvektoren  $\vec{a}_1$  und  $\vec{a}_2$  eingezeichnet, wobei  $|\vec{a}_1| = |\vec{a}_2| = a$ ist. Angedeutet ist zudem das zugrundeliegende Porengitter. Im Reziproken Gitter findet sich die 1. Brillouin-Zone (1. BZ) als Hexagon. Die Hochsymmetriepunkte  $\Gamma$ , M und K spannen den irreduziblen Teil der 1. BZ (hellblau) auf. Es gilt zudem  $|\vec{b}_1| = |\vec{b}_2| = 4\pi/\sqrt{3}a$  und  $\vec{a}_i \cdot \vec{b}_j = 2\pi\delta_{ij}$ .

Anstatt das Realraumgitter  $\mathcal{R}$  für die weitere Berechnung zu verwenden ist es meist zweckmäßig, sich auf das zugehörige Reziproke Gitter zu beziehen [38, 39], welches von den primitiven Vektoren

 $\vec{b}_1, \vec{b}_2$  und  $\vec{b}_3$  aufgespannt wird. Diese konstruieren sich aus den primitiven Translationsvektoren des Realraumgitters gemäß

$$\vec{b}_1 = 2\pi \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)}, \quad \vec{b}_2 = 2\pi \frac{\vec{a}_3 \times \vec{a}_1}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)}, \quad \vec{b}_3 = 2\pi \frac{\vec{a}_1 \times \vec{a}_2}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)}.$$
(2.28)

Im Realraumgitter führt man die Wigner-Seitz-Zelle ein, um eine Elementarzelle zu definieren, die die vollständige Umgebung eines bestimmten Gitterpunktes enthält [39]. Analog dazu definiert man die 1. Brillouin-Zone (1. BZ) als Elementarzelle des Reziproken Gitters. Abb. 2.9 stellt Realraumund Reziprokes Gitter im Vergleich zueinander dar, jedoch bereits an den 2D Fall angepaßt.

#### 2.5.1.3. Partialwellenentwicklung

Die Struktur der Kristallbausteine wird nun wieder berücksichtigt durch die Betrachtung der "Atompotentiale". Im Falle Photonischer Kristalle ist mit dieser Struktur die (gitterperiodische) ortsabhängige Dielektrizitätsfunktion  $\varepsilon(\vec{r})$  gemeint. Im Reziproken Gitter  $\mathcal{G} = \vec{G} = h_1\vec{b}_1 + h_2\vec{b}_2 + h_3\vec{b}_3$ ,  $h_1, h_2, h_3 \in \mathbb{Z}^3$ ,  $\vec{a}_i \cdot \vec{b}_j = 2\pi\delta_{ij}$  läßt diese sich in eine Fourier-Reihe entwickeln:

$$\varepsilon^{-1}(\vec{r}) = \sum_{\vec{G} \in \mathcal{G}} \kappa_{\vec{G}} \mathrm{e}^{i\vec{G}\cdot\vec{r}}.$$
(2.29)

Wir setzen diese Entwicklung in die Differentialgleichung 2.25 ein und wenden das Bloch-Floquetsche (B.F.) Theorem an. Zum einen erlaubt es die Eigenmoden des Photonischen Kristalls durch Kristallimpulse  $\vec{k}$  zu numerieren, die in der 1. BZ des Reziproken Gitters liegen. Zum anderen besagt es, daß die Eigenmoden selbst aus einer ebenen Welle mit Wellenvektor  $\vec{k}$  bestehen, auf die eine gitterperiodische Funktion  $u_{\vec{k}}(\vec{r})$  aufmoduliert ist [12]. Demzufolge setzen wir für die Eigenmoden  $\vec{H}_{\vec{k}}(\vec{r})$  eine Partialwellenentwicklung nach ebenen Wellen an:

$$\vec{H}_{\vec{k}}(\vec{r}) \stackrel{\text{B.F.}}{=} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \cdot u_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \sum_{\vec{G}\in\mathcal{G}} \sum_{\lambda=1}^{2} h_{\vec{G}}^{\lambda} \hat{e}_{\vec{G}}^{\lambda} e^{i\vec{G}\cdot\vec{r}}.$$
(2.30)

Hier kommt die Divergenzfreiheit,  $\vec{\nabla} \cdot \vec{H} = 0$ , zur Hilfe, so daß wir die Entwicklung in Gl. 2.30 auf zwei zueinander und auf  $\vec{k} + \vec{G}$  senkrecht stehende Polarisationseinheitsvektoren  $\hat{e}_{\vec{G}}^{\lambda=1,2}$  beschränken können, welche an jedem Punkt  $\vec{G}$  des Reziproken Gitters  $\mathcal{G}$  neu bestimmt werden müssen. Setzen wir nun die Entwicklungen für  $\varepsilon(\vec{r})$  sowie für  $\vec{H}_{\vec{k}}(\vec{r})$  in die Wellengleichung 2.25 ein, so erhalten wir ein hermitesches Eigenwertproblem für die Eigenfrequenzen des Photonischen Kristalls zu vorgegebem Kristallimpuls  $\vec{k}$ , welches mit numerischen Standardmethoden gelöst werden kann:

$$\sum_{\vec{G}'\in\mathcal{G}}\sum_{\lambda'=1}^{2}M_{\vec{G}\vec{G}'}^{\lambda\lambda'}h_{\vec{G}'}^{\lambda'} = \frac{\omega^2}{c^2}h_{\vec{G}}^{\lambda},$$
(2.31)

wobei die Matrixelemente durch

$$M_{\vec{G}\vec{G}'}^{\lambda\lambda'} = (\vec{k} + \vec{G})(\vec{k} + \vec{G}')\kappa_{\vec{G} - \vec{G}'}\hat{e}_{\vec{G}}^{\lambda} \cdot \hat{e}_{\vec{G}'}^{\lambda'}$$
(2.32)

gegeben sind. Die zugehörigen Moden  $\vec{H}_{\vec{k}}(\vec{r})$  sind durch die Eigenvektoren  $h_{\vec{G}}^{\lambda}$  festgelegt. Analoges gilt für die Eigenmoden des elektrischen Feldes  $\vec{E}_{\vec{k}}(\vec{r})$ .

Da nach der Partialwellenentwicklung in Gl. 2.29 die Fourier-Koeffizienten  $\kappa_{\vec{G}}$  von  $\varepsilon^{-1}(\vec{r})$  alle Informationen über den Kristall in sich tragen, bestimmen diese das Aussehen der Bandstruktur. Im Falle eines 2D Kristalls aus zylindrischen Stäben ( $\varepsilon_a$ ) mit Radius R in einem Hintergrunddielektrikum ( $\varepsilon_b$ ) ergibt sich aus der Rücktransformation

$$\kappa_{\vec{G}} = \frac{1}{A} \int_{A} \mathrm{d}\vec{x} \,\varepsilon^{-1}(\vec{x}) \,\mathrm{e}^{-i\vec{G}\cdot\vec{x}} = \begin{cases} \frac{1}{\varepsilon_{a}}f + \frac{1}{\varepsilon_{b}}(1-f) & |\vec{G}| = 0, \\ \left(\frac{1}{\varepsilon_{a}} - \frac{1}{\varepsilon_{b}}\right) f \frac{2J_{1}(\vec{G}\cdot\vec{R})}{\vec{G}\cdot\vec{R}} & |\vec{G}| \neq 0. \end{cases}$$
(2.33)

A ist die Fläche der Einheitszelle,  $f = 2\pi/\sqrt{3}(R/a)^2$  der Füllfaktor des hexagonalen Gitters.

Die Fourier-Koeffizienten  $\kappa$  werden nun für einen Satz von Reziproken Gittervektoren  $\vec{G}$  analytisch bestimmt und in der Reihenentwicklung verwendet. Für einen vorgegebenen Kristallimpuls erhalten wir unendlich viele Eigenfrequenzen, die wir, nach ansteigender Frequenz sortiert, mit dem Bandindex *n* durchnumerieren. Damit sind wir also in der Lage die Dispersionrelationen Photonischer Kristalle zu berechnen und kompakt in Form eines Banddiagramms darzustellen [12].



Abbildung 2.10.: Photonische Bandstruktur für einen zweidimensionalen Photonischen Kristall (vgl. Abb. 3.7) mit einer hexagonalen Anordnung von zylindrischen Löchern (links). Darstellung der frequenzabhängigen Zustandsdichte (rechts). Die Einfügungen stellen schematisch ein hexagonales Gitter sowie die 1. Brillouin-Zone (1. BZ) des zugehörigen Reziproken Gitters dar. Der irreduzible Teil der 1. BZ ist samt den Hochsymmetriepunkten  $\Gamma$ , M und K hervorgehoben [11].

Wie im Text erläutert, spielt neben der Dispersionsrelation die photonische Zustandsdichte  $N(\omega)$ beim Verständnis der Eigenschaften Photonischer Kristalle eine wichtige Rolle.  $\Delta N(\omega)$  definiert sich durch das "Abzählen" der im Photonischen Kristall erlaubten Zustände in einem vorgegebenen Frequenzintervall  $\Delta \omega$ . Wir müssen folglich über alle *n* Bänder summieren sowie über die 1. BZ eine Diracsche  $\delta$ -Funktion integrieren gemäß

$$N(\omega) = \sum_{n} \int_{1.BZ} d^3k \delta(\omega - \omega_n(\vec{k})).$$
(2.34)

Zur numerischen Berechnung bedienen wir uns wiederum der Methoden der elektronischen Bandstrukturtheorie, d. h. wir diskretisieren obiges Integral, Gl. 2.34, in einer mit der Kristallsymmetrie verträglichen Weise [31] und interpolieren linear zwischen den einzelnen Punkten der Diskretisierung. Wie aus der elektronischen Bandstrukturrechnung bekannt, gilt auch hier, daß flache Bänder in der Bandstruktur zu hohen Zustandsdichten führen und umgekehrt.

Bei zweidimensionalen Photonischen Kristallen entkoppeln die Polarisationen des elektromagnetischen Feldes vollständig, sofern wir uns auf die Ausbreitung senkrecht zu den Zylinderachsen beschränken [40–42]. Wir können also die Polarisation des elektrischen Feldes parallel (E-Polarisation) und senkrecht (H-Polarisation) zu den Zylinderachsen getrennt betrachten. Abb. 2.10 zeigt Bandstrukturen für H- und E-Polarisation und Zustandsdichten für den 2D Photonischen Kristall aus Abb. 3.7, welche mit den oben skizzierten Methoden berechnet wurden.

Um endliche dielektrische Strukturen zu berechnen, wendet man meist eine sog. Superzellen-Näherung an, bei der man die endliche Struktur an ihren Grenzen periodisch fortsetzt. Auf diese Weise kann man  $\varepsilon(\vec{r})$  auch in der ursprünglich eingeschränkten Richtung nach Vektoren des Reziproken Gitters der Superzellen entwickeln. Will man die Eigenmoden gestörter Systeme theoretisch untersuchen, so wählt man die Superzelle idealerweise so, daß die Ausläufer der Störungen am Rand der Superzelle keine Rolle mehr spielen [43].

Es ist möglich, die Methode der Entwicklung in ebene Wellen so abzuwandeln, daß man realistische Transmissionsspektren endlicher Photonischer Kristalle theoretisch studieren kann [44, 45]. Die Methode von Sakoda wird im nächsten Abschnitt näher erläutert.

#### 2.5.2. Transmissionsrechnungen nach Sakoda

Die in Abschn. 2.5.1.2 eingeführten Methoden für die Bandstrukturberechnung basieren auf dem Theorem von Bloch und Floquet zur Entwicklung des Strahlungsfeldes nach gitterperiodisch modulierten ebenen Wellen. Die Anwendung dieses Theorems ist nur bei unendlich ausgedehnten Kristallen uneingeschränkt gültig. Reale Transmissionsexperimente werden naturgemäß an endlichen Schichtdicken durchgeführt, die im Extremfall bis zu einer einzelnen Gitterkonstante klein sein können (vgl. Abb. 5.17). Orientiert man sich bei der Interpretation der Transmissionsspektren solcher Strukturen an den Rechnungen unendlich ausgedehnter Kristalle, so werden z. B. nicht berücksichtigt

 die Kopplungsstärke zwischen dem einlaufenden (bzw. dem transmittierten) Strahlungsfeld (ebene Wellen) und den Eigenmoden des Kristalls an der Kristalloberfläche, die beispielsweise im Falle von Symmetrieverbot Null werden kann [44–46],

- der Energietransfer in Bragg-Wellen, insbesondere für kleine Wellenlängen [44, 45],
- das Auftauchen von Fabry-Perot-artigen Signalüberhöhungen in den Transmissionsspektren als Folge von Interferenzen durch Mehrfachreflektionen an den Begrenzungsflächen der untersuchten Schicht (vgl. Abschn. 2.7) [44, 45].

Für die Berechnung von Transmissionsspektren genügt es folglich nicht, die Zustandsdichten unendlich ausgedehnter Systeme zu analysieren. Die in Abb. 2.11 skizzierte Methode von Sakoda



Abbildung 2.11.: Geometrie der Transmissionsrechnungen nach der Methode von Sakoda [44].

umgeht dieses Problem. Der dargestellte 2D Kristall sei in x-Richtung unendlich ausgedehnt und periodisch, so daß man  $\varepsilon(\vec{r}) \to \varepsilon(\vec{x}) = \varepsilon(x, y)$  in dieser Richtung nach Reziproken Gittervektoren, d. h. in eine Fourier-Reihe, entwickeln kann. Da in der y-Richtung die Struktur nur eine Breite von  $L = (2N_L - 1)a_2 + 2(R + d)$  aufweist, kann man in dieser Richtung zunächst keine Entwicklung nach Reziproken Gittervektoren durchführen, da diese nicht definiert sind.

In der Rechnung wird nun versucht (s. Abb. 2.11), von links kommend mit einer ebenen Welle des Vektors  $k_i$  an die Moden des Kristalls anzukoppeln. Es treten Bragg-Reflexionen  $k_r^{(Ord)}$  unterschiedlicher Ordnungen auf (skizziert sind lediglich (Ord) = -1,0,1). Rechts vom Kristall sieht man die transmittierten Wellen  $k_t^{(Ord)}$ , die ebenfalls in unterschiedlichen Ordnungen auftreten. Bei Transmissionsmessungen wird gewöhnlich nur die nullte Ordnung  $k_t^{(0)}$  erfaßt.

Für H-Polarisation<sup>7</sup> sehen die wesentlichen Schritte folgendermaßen aus (vgl. Abb. 2.11): In den Bereichen 1 bzw. 3 kann man  $H_z(x, y)$  nach der einlaufenden und den reflektierten Wellen bzw. nach den transmittierten Wellen entwickeln:

$$H_{1z} = H_0 e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{x}} + \sum_n R_n e^{i\vec{k}_r^{(n)} \cdot \vec{x}}, \quad \vec{k}_i = (k_1 \sin \theta, k_1 \cos \theta) = (k_x, k_{1y}), \quad (2.35)$$

$$H_{3z} = \sum_{n} T_{n} e^{i\vec{k}_{t}^{(n)} \cdot (\vec{x} - \vec{L})}, \quad \vec{x} = (x, y), \quad \vec{L} = (0, L).$$
(2.36)

 ${}^{7}\vec{H}(\vec{r})|_{\mathrm{H-Pol.}} = (0, 0, H(x, y))$ 

Die Wellenvektoren der Bragg-Wellen *n*-ter Ordnung,  $\vec{k}_r^{(n)}$  und  $\vec{k}_t^{(n)}$  sind gegeben als

$$k_{r,x}^{(n)} = k_{t,x}^{(n)} = k_x^{(n)} = k_x + G_n, \ G_n = \frac{2\pi n}{a_1}, n \in \mathbb{Z},$$
 (2.37)

$$k_{r,y}^{(n)} = \begin{cases} -\sqrt{k_1^2 - (k_x^{(n)})^2} & (k_1 \ge |k_x^{(n)}|), \\ -i\sqrt{(k_x^{(n)})^2 - k_1^2} & \text{sonst}. \end{cases}$$
(2.38)

$$k_{t,y}^{(n)} = \begin{cases} \sqrt{k_3^2 - (k_x^{(n)})^2} & (k_3 \ge |k_x^{(n)}|), \\ i\sqrt{(k_x^{(n)})^2 - k_3^2} & \text{sonst.} \end{cases}$$
(2.39)

In den homogenen Bereichen 1 bzw. 3 ergeben sich ferner die Beträge der Wellenvektoren aus  $k_1 = \sqrt{\varepsilon_1}\omega/c$  bzw.  $k_3 = \sqrt{\varepsilon_3}\omega/c$ . Die auf zwei Dimensionen reduzierte Wellengleichung für die Eigenmoden des magnetischen Feldes, Gl. 2.25, fordert

$$\hat{\mathcal{L}}H_{2z} = \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\varepsilon(x,y)} \frac{\partial H_{2z}}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\varepsilon(x,y)} \frac{\partial H_{2z}}{\partial y} \right] + \frac{\omega^2}{c^2} H_{2z} = 0.$$
(2.40)

Wir führen nun noch eine Randbedingungsfunktion f(x, y) ein:

$$f(x,y) = \frac{1}{L} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left[ yT_n + (L-y)(\delta_{n0}H_0 + R_n) \right] e^{ik_x^{(n)}x} .$$
(2.41)

Diese ist an den Rändern der Struktur äquivalent mit den z-Komponenten des magnetischen Feldes, also

$$f(x,0) = H_{1z}(x,0)$$
 bzw.  $f(x,L) = H_{3z}(x,L)$ . (2.42)

Jetzt definieren wir noch die Funktion  $\psi(x, y)$ ,

$$\psi(x,y) = H_{2z}(x,y) - f(x,y),$$
 wobei ferner gilt (2.43)

$$\mathcal{L}\psi(x,y) = -\mathcal{L}f(x,y) \text{ sowie } \psi(x,0) = \psi(x,L) = 0, \qquad (2.44)$$

und bauen auf diese Weise die Randbedingungen für  $H_{2z}(x, y)$  in die Feldgleichung für  $\psi(x, y)$  mit ein. Das ist der Hauptvorteil dieser Methode, denn jetzt können wir in der unendlich ausgedehnten x-Richtung nach Reziproken Gittervektoren entwickeln, während wir in y-Richtung eine Fourier-Entwicklung machen:

$$\psi(x,y) = \sum_{\substack{n=-\infty\\\infty}}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} A_{nm} \mathrm{e}^{ik_x^{(n)}x} \sin\frac{m\pi}{L}y, \qquad (2.45)$$

$$\frac{1}{\varepsilon(x,y)} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \kappa_{nm} \mathrm{e}^{i\left(G_n x + \frac{m\pi}{L}y\right)}.$$
(2.46)

Die Unterschiede von Gleichungen 2.30 bzw. 2.29 und 2.45 bzw. 2.46 sind auf die fehlende Gitterperiodizität in y-Richtung zurückzuführen (vgl. Abb. 2.11). Berücksichtigt man den angepaßten Füllfaktor  $f = 2N_L \pi R^2/(a_1 L)$ , so erhält man Ausdrücke, die denen in Gl. 2.33 ähnlich, im Falle von  $\kappa_0$  sogar deckungsgleich mit  $\kappa_{\vec{G}=0}$  in Gl. 2.33 sind:

$$\kappa_{00} = \frac{1}{\varepsilon_a} f + \frac{1}{\varepsilon_b} (1 - f), \qquad (2.47)$$

$$\kappa_{2n,2m} = \begin{cases} \frac{2f}{N_L} \left( \frac{1}{\varepsilon_a} - \frac{1}{\varepsilon_b} \right) (-1)^m \cos \frac{a_2 m \pi}{2L} \times \\ \times \frac{\sin(a_2 m N_L \pi/L)}{\sin(a_2 m \pi/L)} \frac{J_1(G_{2n,2m}R)}{G_{2n,2m}R} & (m \neq 0) \\ 2f \left( \frac{1}{\varepsilon_a} - \frac{1}{\varepsilon_b} \right) \frac{J_1(G_{2n}R)}{G_{2n}R} & (m = 0) . \end{cases}$$

$$(2.48)$$

$$\kappa_{2n-1,2m-1} = \frac{2f}{N_L} \left( \frac{1}{\varepsilon_a} - \frac{1}{\varepsilon_b} \right) (-1)^{m-1} \sin \frac{a_2(2m-1)\pi}{4L} \times \\ \times \frac{\sin\{[a_2(2m-1)N_L\pi]/(2L)\}}{\sin\{[a_2(2m-1)\pi]/(2L)\}} \frac{J_1(G_{2n-1,2m-1}R)}{G_{2n-1,2m-1}R}.$$
(2.49)

Dabei ist  $J_1$  die Bessel-Funktion erster Ordnung und  $G_{n,m} = \sqrt{G_n^2 + (m\pi/L)^2}$ . Sonstige  $\kappa_{n,m}$ -Koeffizienten sind Null. Diese Koeffizienten sind in das nachfolgende Gleichungssystem einzusetzen:

$$\frac{\omega^{2}}{c^{2}}A_{nm} - \sum_{n'=-\infty}^{\infty}\sum_{m'=1}^{\infty} \times \left[ \left( \frac{mm'\pi^{2}}{L^{2}} + k_{x}^{(n)}k_{x}^{(n')} \right) \kappa_{n-n',|m-m'|} + \left( \frac{mm'\pi^{2}}{L^{2}} - k_{x}^{(n)}k_{x}^{(n')} \right) \kappa_{n-n',m+m'} \right] A_{n'm'} = \\
= -\frac{2\omega^{2}}{\pi c^{2}} \frac{(-1)^{m-1}T_{n} + R_{n} + \delta_{n0}H_{0}}{m} + \frac{2\pi m}{L^{2}} \sum_{n'=-\infty}^{\infty} (T_{n'} - R_{n'} - \delta_{n'0}H_{0})\kappa_{n-n',m} + \\
+ \frac{2k_{x}^{(n)}}{\pi} \sum_{n'=-\infty}^{\infty}\sum_{m'=1}^{\infty} k_{x}^{(n')}(\kappa_{n-n',|m-m'|} - \kappa_{n-n',m+m'}) \frac{(-1)^{m'-1}T_{n'} + R_{n'} + \delta_{n'0}H_{0}}{m'}.$$
(2.50)

Als zusätzliche Randbedingungen nutzen wir ferner die der Kontinuität der *x*-Komponente des elektrischen Feldes und der *z*-Komponente des magnetischen Feldes [44]:

$$\pi\varepsilon_1 \sum_{m=1}^{\infty} mA_{nm} = (i\varepsilon_2 Lk_{r,y}^{(n)} + \varepsilon_1)R_n - \varepsilon_1 T_n + \delta_{n0}H_0(i\varepsilon_2 Lk_{1,y} + \varepsilon_1), \quad \forall n , \qquad (2.51)$$

$$\pi\varepsilon_3 \sum_{m=1}^{\infty} m(-1)^m A_{nm} = (i\varepsilon_2 L k_{r,y}^{(n)} - \varepsilon_3) T_n + \varepsilon_3 R_n + \delta_{n0} H_0 \varepsilon_3, \quad \forall n \,.$$

Schließlich beschränkt man für die Numerik die Fourier-Entwicklungen auf  $n = \pm N$  und m = M und erhält so ein Gleichungssystem mit (2N + 1)(M + 2) unabhängigen Gleichungen und mit  $(2N + 1)R_n$  Reflektions- und  $T_n$  Transmissions-Koeffizienten, sowie (2N + 1)M Koeffizienten von  $A_{nm}$  genausoviele Unbekannte.

Die in dieser Arbeit vorgestellten Transmissionsrechnungen an defektfreien Strukturen wurden nach diesem Verfahren durchgeführt, wobei mehrere Rechnungen mit leicht verschiedener Dicke dder homogenen Bedeckungsschicht durchgeführt wurden und über diese gemittelt wurde, um die Dominanz der Fabry-Perot-Resonanzen etwas zu mindern und so den realen Verhältnissen besser anzupassen [12]. Auf den Superzellen-Algorithmus für die Transmissionsrechnungen an den Defektstrukturen soll nicht näher eingegangen werden. Die Feldverteilungsrechnungen, welche die z-Komponente der dielektrischen Verschiebung in der xy-Ebene darstellen, wurden mit einem Finite-Difference Time-Domain Algorithmus bestimmt, auf den im nächsten Abschnitt ganz kurz eingegangen wird.

### 2.5.3. Finite-Difference Time-Domain Rechnungen

Zur Berechnung der Zustandsbänder von Defektstrukturen werden meist Superzellen-Algorithmen verwendet. Um jedoch die realistische Transmission von Defektstrukturen als auch die zeitliche Entwicklung der Defektmoden (z. B. von Wellenleitern und Kavitäten) zu studieren, hat sich die Methode der V-FDTD-Simulationen (*engl.* vector finite-difference time-domain) als zweckmäßig erwiesen [9, 47, 48]. Darin werden die Maxwell-Gleichungen (cgs) der Form

$$\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\vec{H}(\vec{r},t) = -\vec{\nabla} \times \vec{E}(\vec{r},t), \text{ sowie}$$
(2.53)

$$\frac{\varepsilon(\vec{r})}{c}\frac{\partial}{\partial t}\vec{E}(\vec{r},t) = \nabla \times \vec{H}(\vec{r},t)$$
(2.54)

im Realraum gelöst, um deren Zeitabhängigkeit explizit zu erhalten. Dazu wird entweder ein oszillierender Punktdipol [49] oder eine in ihrer lateralen Ausdehnung begrenzte Front ebener Wellen der Frequenz  $\omega$  (vgl. Abb. 6.3) als elektromagnetische Quelle herangezogen. Die geometrische Struktur des Defektkristalls wird mit einem feinmaschigen Netz von Raum-Zeit-Punkten überzogen und schließlich wird, beginnend bei t = 0, in endlichen (finite difference) Zeitschritten (time-domain) jeweils das vollständige Vektorproblem gelöst. Dies beinhaltet meist einen enormen numerischen Aufwand.

Auf diese Weise könnte man beispielsweise die zeitliche Verzögerung nach Einschalten der Quelle berechnen, mit der die erste Welle den Detektor in Abb. 6.3 erreicht. Wenn man die Frequenz  $\omega$  der ebenen Wellen durchstimmt, erhält man durch Messen der Intensität I am Detektorort ein Transmissionsspektrum  $I(\omega)$ , das für Frequenzen in der Bandlücke des Kristalls das Transmissionsspektrum der geführten Moden der Defektstruktur widerspiegelt (vgl. Abb. 6.4 und 6.8). Unterbricht man zur Zeit t die Rechnung so erhält man einen Schnappschuß der Modenstruktur im Kristall und insbesondere in den Defektstrukturen (vgl. Abb. 6.9 und 6.11).

## 2.6. Defektstrukturen in 2D Photonischen Kristallen

In diesem Abschnitt wird auf grundlegende Merkmale eingegangen, die beim Einbau von Defektstrukturen unterschiedlicher Geometrie in Photonische Kristalle wichtig sind. Durch lokale Manipulationen am Gitter, d. h. durch Brechung der Translationssymmetrie des Kristalls, können Zustände erzeugt werden, deren Eigenfrequenzen innerhalb der photonischen Bandlücken zu liegen kommen. Eine solche Manipulation ist beispielsweise die Veränderung des Radius eines zylindrischen Loches oder die vollständige Auslassung eines solchen. Die detaillierte Geometrie des Defektes wirkt sich dabei auf die Frequenzen der erzeugten Zustände aus. Diese Defektstrukturen können, im Spezialfall, aus einem vereinzelt liegenden Defekt (vgl. Abschn. 2.6.2) oder aus einer Verkettung solcher Einzeldefekte bestehen (vgl. Abschn. 2.6.1). Sie stellen Störungen des Translationsgitters dar, die sich durch Schaffung von wohldefinierten Zuständen oder Bändern von Zuständen innerhalb der photonischen Bandlücke ausdrücken. Der gezielte Einbau derartiger Defektstrukturen ermöglicht es somit, die Modenstruktur der ursprünglich modenfreien photonischen Bandlücke maßzuschneidern.

#### 2.6.1. Wellenleiterstrukturen

#### 2.6.1.1. Aktuelles Beispiel aus der Literatur

Erst kürzlich wurden Messungen an Wellenleiterstrukturen veröffentlicht, die in ein quadratisches Gitter von Aluminiumoxidstäbchen eingebaut wurden [20]. Da diese Stäbchen einen Durchmesser von 0,5 mm besaßen und die Gitterkonstante bei 1,27 mm lag, fanden die Untersuchungen im Mikrowellenbereich statt, da sich dort die photonische Bandlücke dieser Struktur befindet. Die Anordnung



Abbildung 2.12.: Wellenleiterstruktur in (links) und Transmissionsmessung an (rechts) einem zweidimensionalen Kristall aus Aluminiumoxidstäbchen. Aus [20].

der Stäbchen ist in Abb. 2.12 (links) zu erkennen. Für den Einbau der Wellenleiterstrukturen wurden einzelne Reihen der Stäbchen entfernt. Der Vergleich der Transmissionsmessungen für gerade und abgewinkelte Wellenleiter deutet an, daß es Frequenzen gibt, für welche die Transmissionsintensität für beide Wellenleiterarten gleich ist. Die Mitte der Bandlücke liegt bei ca. 90 GHz, also einer Wellenlänge von ca. 0,33 cm. Im Gegensatz dazu sollen in dieser Arbeit Wellenleiterstrukturen für den infraroten Spektralbereich hergestellt und untersucht werden (vgl. Kap. 6).



#### 2.6.1.2. Bandstrukturen und Geometrien

**Abbildung 2.13.:** REM-Aufnahmen linienartiger Defektstrukturen in Makroporösem Si. Durch eine Verkettung von Punktdefekten können gerade und geknickte (a,b) Strukturen eingebaut werden. Durch Kombination können bereits Funktionselemente, wie z. B. ein integrierter Strahlteiler (c) verwirklicht werden. Diese Strukturen werden im Ergebnisteil wieder aufgegriffen, um Transmissionsexperimente oder Feldverteilungen zu diskutieren.

Eine Verkettung von Punktdefekten führt zur Ausbildung eines Defektbandes innerhalb der Bandlücke und somit zu einer Möglichkeit, Wellenleiterstrukturen nahezu beliebiger Form zu realisieren [50]. Beispielhaft ist dies in Abbildung 2.13(a)-(c) wiedergegeben. Die lineare Defektstruktur



Abbildung 2.14.: Bandstruktur eines Kristalls mit integrierten Wellenleitern. Die schwarzen Bänder stammen vom Kristall selbst. Die roten Bänder beschreiben Moden gerader Symmetrie, die grünen Bänder beschreiben Moden ungerader Symmetrie. Innerhalb der photonischen Bandlücke, markiert durch die beiden nahezu horizontal verlaufenden schwarzen Bänder, gibt es sowohl für gerade als auch für ungerade Moden jeweils Bandlücken. Das Band mit den offenen Quadraten erscheint zusätzlich aufgrund des herstellungsbedingt leicht vergrößerten Durchmessers der an die Defektstrukturen angrenzenden Poren.

erfüllt die Funktion eines Wellenleiters, jedoch ohne auf die interne Totalreflexion konventioneller

Wellenleiter angewiesen zu sein. Insbesondere kann die Effizienz für die Leitung um einen Wellenleiterknick, selbst bei Krümmungsradien in der Größenordnung der betrachteten Wellenlänge, gegen Eins gehen [49].

In Abb. 2.14 sind in die Bandstruktur eines Kristalls (schwarze Kurven) die Bänder der in diesen eingebauten Wellenleiterstrukturen eingezeichnet. Da der Kristall außerhalb der Bandlücke öffnet, sind im wesentlichen die Defektbänder innerhalb der Bandlücke des Kristalls von Interesse, da diese beobachtbar sind. Sie werden nach ihrer Symmetrie entlang der Ausbreitungsrichtung in gerade und ungerade Moden klassifiziert. Es ist bemerkenswert, daß es durch die unterschiedliche Lage der einzelnen Defektbänder Frequenzbereiche gibt, in denen nur ein Band existiert, während in wieder anderen teilweise mehrere Bänder im gleichen Bereich liegen. Es ist anzunehmen, daß dies bei der Interpretation der Transmissionsmessungen in Kap. 6 eine wichtige Rolle spielen wird.

#### 2.6.2. Integrierte Mikrokavität

#### 2.6.2.1. Aktuelles Beispiel aus der Literatur

Neben der eindimensionalen Mikrokavität in Abb. 2.2 sei im folgenden auf ein aktuelles Beispiel eingegangen, in dem erstmals eine Multi-Quantenwell-Schicht und ein zweidimensionaler Photonischer Kristall miteinander kombiniert wurden (Abb. 2.15). Die Mode des Punktdefektes erfährt durch



**Abbildung 2.15.:** Aufsicht auf eine dünne Membrane mit hexagonal angeordneten Löchern und einem Punktdefekt. Die beiden Löcher links und rechts des Punktdefektes wurden zwecks Feineinstellung von Modenfrequenz und Güte und zur Aufhebung der Quadrupolentartung leicht vergrößert. Die Gitterkonstante beträgt  $a=0,51 \ \mu m$ . Die normalen Lochradien liegen bei 0,18  $\mu m$ , die der vergrößerten Löcher bei 0,24  $\mu m$ . Rechts: Zweidimensionaler Schnitt durch die Mitte der Membrane mit farbig kodierter Feldstärkenverteilung der resonanten Mode. Die Feldstärke nimmt von grün über gelb nach rot zu [51,52].

das Lochgitter eine starke Beschränkung in der Bildebene, während der Brechungsindexkontrast an den Grenzflächen der Quantenwellschicht eine Einschränkung in Richtung senkrecht zur Bildebene bewirkt. Pumpt man Energie in die Quantentröge aus InGaAsP und regt damit Exzitonen an, so können diese nur rekombinieren, indem sie ein Photon in die durch die Gitterstruktur vorgegebene Defektmode emittieren, da nur diese erlaubte Zustände anbietet. Auf diese Weise gelang es, einen sehr kompakten, optisch gepumpten Mikrolaser zu realisieren, der bei 1,5  $\mu$ m Wellenlänge mit einer Linienbreite unter 0,2 nm emittiert. Dazu muß die Struktur auf ca. 140 K abgekühlt werden, um die Quantisierung der Exzitonenzustände, und damit die intensive Emission mit scharf definierter Wellenlänge nicht zu verlieren [51, 52].

#### 2.6.2.2. Geometrie einer Mikrokavität in makroporösem Silizium



Abbildung 2.16.: Rasterelektronenmikroskopaufnahme einer Punktdefektstruktur, die durch Auslassung eines einzelnen Luftzylinders entstanden ist. Dies geschieht dadurch, daß bei der photolithographischen Vordefinierung der Porenkeime ein einzelner Keim ausgelassen wird. Die Abbildung ist eine Vergrößerung des umrahmten Bereiches in Abb. 7.1.

Für die Ankopplung an die Resonatormode des Punktdefektes in Abb. 2.16 wurden Wellenleiter gewählt, die ein breites Band von Moden führen können. Die beiden Hauptgründe für die Wahl der Wellenleiter sind

- 1. Erlangung mechanischer Stabilität: Ein Punktdefekt der nach der Mikrostrukturierung entlang der Transmissionsrichtung auf beiden Seiten von je drei Kristallreihen umschlossen ist, ergibt einen porösen Streifen mit ca. 10  $\mu$ m Breite und 100  $\mu$ m Höhe. Um die mechanische Stabilität dieses Streifens zu erhöhen, wurden auf beiden Seiten des Punktdefektes in entsprechendem Abstand (vgl. Abb. 2.17) Wellenleiterstrukturen in den Kristall eingebaut Durch die Wellenleiter erhöht sich die Breite des 100  $\mu$ m hohen porösen Streifens im Bereich der Mikrokavität auf ca. 25  $\mu$ m, so daß die Struktur deutlich stabiler und somit leichter für die Messung zu präparieren ist (vgl. Abb. 4.1).
- 2. Unempfindlichkeit gegen Unterätzungen beim Mikrostrukturierungsverfahren: Beim Mikrostrukturierungsverfahren wird die geometrische Information auf dem Reticle (Lithographiemaske) sequentiell auf Vermittlerschichten, nämlich in eine Photolackschicht und danach auf die aufgesputterte Aluminiummaske, übertragen (vgl. Abb. 3.6). Durch die Dicke dieser

Vermittlerschichten (Alu, ca. 2-3  $\mu$ m) ergeben sich durch Unterätzungen aufgrund des isotropen Ätzschrittes bei der Strukturierung zwangsläufig Abweichungen von den Sollwerten, die die Abschneidelinie und damit die Kanten der Porenstreifen verschieben. Da die Wellenleiter relativ lang gewählt wurden, ist eine Durchtrennung im Bereich der Wellenleiter justageunkritisch, während man ohne die vorhandenen Wellenleiter definiert bei einer bestimmten Porenreihe abschneiden müßte.



**Abbildung 2.17.:** Rasterelektronenmikroskopische Bestimmung der tatsächlichen geometrischen Daten einer integrierten Mikrokavität. Die eingetragenen Werte geben den Porendurchmesser in  $\mu$ m wieder. Diese wurden mit einer speziellen Porenauswertungssoftware [35] ermittelt, wobei die Angaben lediglich die Zahlenwerte des Auswerteprogrammes wiedergeben. Der Durchmesser wurde bestimmt, in dem die Porenfläche ermittelt wurde und diese einer kreisförmigen Fläche zugeordnet wurde. Die Genauigkeit der Wertangaben liegt bei ca.  $\pm 15$  nm.

#### 2.6.2.3. Bandstruktur und Güte

Betrachten wir einen Punktdefekt, wie er im Abschnitt 2.6.2.2 bereits angesprochenen wurde. Dieser sei ein einzelner Luftzylinder (eine Pore) an einem bestimmten Gitterplatz, dessen Durchmesser variiert wurde. Mit dieser Variation ist eine Brechung der Translationssymmetrie durch Veränderung der lokalen effektiven Dielektrizitätskonstante verbunden, welche neue Zustände innerhalb der Bandlücke schaffen kann. Dabei entstehen donator(akzeptor)-artige Zustände, die sich aus dem photonischen Leitungsband (Valenzband) in die Bandlücke hineinschieben, wenn der Radius des Luftzylinders verringert (erhöht) und damit die lokale effektive Dielektrizitätskonstante erhöht (verringert) wird (vgl. Abb. 2.18) [53].

An der Auftragung in Abb. 2.18 kann man ablesen, wie die Geometrie der Einzeldefektstelle gewählt werden muß, wenn man die Resonanzfrequenz auf einen bestimmten Wert einstellen will. Dabei muß noch beachtet werden, daß es aus Symmetriegründen nicht selbstverständlich ist, daß an diese Moden von außen angekoppelt werden kann. Die Rechnung geht weiterhin davon aus, daß alle Luftzylinder des 2D-Gitters denselben Durchmesser besitzen und daß nur der Durchmesser der Einzeldefektstelle verändert wird. Daher kann diese Betrachtung nur als Näherung angesehen werden, denn beim Makroporenätzen bringt die Einbringung eines Einzeldefektes gleichzeitig eine leichte



Abbildung 2.18.: Veränderung der Resonanzfrequenzen lokalisierter Moden (H-Pol.) eines Punktdefektes in einem hexagonalen Gitter aus Luftsäulen bei sukzessiver Erhöhung des lokalen effektiven Brechungsindex an der Defektstelle. Mit zunehmendem, lokalem effektivem Brechungsindex schieben sich ab r/a = 0,4 Zustandsbänder mit Donator-artigen Zuständen aus dem photonischen Leitungsband in die Bandlücke und hin zu niedrigeren Frequenzen. Für r/a = 0 ist die Luftsäule an der Defektstelle vollständig durch das Grundmaterial ausgefüllt (vgl. rechte Einfügung). Für r/a = 0,4 unterscheidet sich die Defektstelle nahezu nicht mehr von den Gitterplätzen des umgebenden Kristalls, deren Füllverhältnis bei r/a = 0,42 liegt. Die Bandkanten des umgebenden Photonischen Kristalls sind mit Pfeilen hervorgehoben. Die herkömmlichen Bezeichnungen der Moden sind angegeben [10, 53].

Erhöhung der angrenzenden Porendurchmesser mit sich (vgl. 2.17), da die Porösität eines Bereichs mit ca.  $(10 a)^2$ , aufgrund der homogenen Beleuchtungsdichte bei der Herstellung, bei einem Substrat als Konstante betrachtet werden kann. Ein weiterer, wichtiger Punkt ist, daß die Entartung der beiden Quadrupolmoden (vgl. 2.19) dazu führt, daß man die beiden Moden nicht getrennt voneinander untersuchen kann, obwohl man mit unterschiedlichen Ankoppel-Effizienzen zu rechnen hat. Um diese Entartung aufzuheben und auch um die Frequenz der Defektmoden feineinzustellen, kann man die Poren in der Umgebung der Defektstelle gezielt deplazieren. In Abb. 2.17 wurden zu diesem Zweck die beiden Poren links und rechts des Punktdefektes um 0,075 a vom Punktdefekt weggerückt.

Die Güte eines Resonators wird allgemein definiert als

$$Q = \frac{\omega E}{P} = -\frac{\omega E}{\mathrm{d}E/\mathrm{d}t}.$$
(2.55)

dabei ist E die im Resonator gespeicherte Energie,  $\omega$  die Resonanzfrequenz und P = -dE/dtdie abfließende Energie pro Zeiteinheit, also die Verlustleistung des Resonators [54]. Anschaulich bedeutet die Güte, daß eine eingekoppelte Welle Q Oszillationen im Resonator durchmacht, bevor ihre Energie auf  $e^{-2\pi} = 0,186\%$  abgefallen ist. In eben dieser Weise wird bei den numerischen (time-domain) Berechnungen die Güte bestimmt: Man "stopft" in die Kavität eine resonante Welle der Energie E und zählt die Zahl der Oszillationen, bis sich die Energie dieser Welle um den Faktor  $e^{-2\pi}$  reduziert hat.

Die Güte gibt ein Maß für die Feldüberhöhung in einer Kavität an. Diese Feldüberhöhung führt einerseits zur verstärkten Wechselwirkung mit dem Wirtsdielektrikum und erleichtert somit die Beobachtung nicht-linear optischer Effekte. Andererseits können elektronische Übergänge von Leuchtzentren unterdrückt bzw. verstärkt werden, wenn deren Übergangsfrequenz in der Bandlücke zu liegen kommt bzw. zusätzlich mit der Resonanzfrequenz einer Mikrokavität überlappt.

#### Allgemeine Struktur der Grundmoden 2.6.2.4.

Wir beschränken uns ab jetzt auf den Fall der Erzeugung von Einzeldefekten durch vollständig entfernte Luftsäulen. Dies entspricht dem Fall r/a = 0 in Abb. 2.18, für den man vier verschiedene Resonatormoden der Eigenfrequenzen 0,31, 0,39, 0,42 und 0,46 (konsequent in Einheiten von  $\omega a/2\pi c$  bezeichnet) erkennen kann. Abb. 2.19 zeigt die Verteilung des magnetischen Vektorfeldes



## zweifach entartete Quadrupol-Moden

Abbildung 2.19.: Intensitätsverteilung des magnetischen Feldvektors der Grundmoden eines Einzeldefektes, wie in Abb. 2.16 dargestellt. Nach [10].

im Falle der drei Grundmoden einer Einzeldefektstelle gemäß Abb. 2.16 mit Frequenzen bei 0,39 (Quadrupolmode), 0,42 (Monopolmode) und 0,46 (Hexapolmode). Die Moden sind fast vollständig am Ort der Gitterfehlstelle lokalisiert, ihre Ausläufer, und damit auch ihre Empfindlichkeit hinsichtlich Feldstörungen in der näheren Umgebung, reichen nur wenige Gitterkonstanten weit. Mit den ebenen Wellen eines fokussierten, Gaußschen Laserlichtbündels kann nun beispielsweise die Quadrupolmode angeregt werden [55].

#### 2.6.2.5. Verlustmechanismen

Bei der experimentellen Untersuchung der Transmission von Wellenleiterstrukturen muß man sich einer Reihe von Verlustmechanismen bewußt werden, welche in den zugehörigen Transmissionsrechnungen aus Gründen der benötigten Rechenkapazität für die Berechnung dreidimensionaler Modelle meist nicht berücksichtigt werden. Dies gilt besonders für die relativ komplizierten Mikrokavitäten-Strukturen, welche im vorhergehenden Abschnitt eingeführt wurden. Bei dieser Struktur gilt im allgemeinen Fall, daß die experimentell ermittelte Güte des Mikroresonators,  $Q_{exp}$ , sich aus der theoretisch maximal möglichen und daher idealen Güte,  $Q_{guide}$ , und einer Reihe von "Verlustgüten" zusammensetzt wie

$$1/Q_{\rm exp} = 1/Q_{\rm guide} + 1/Q_{\rm rad} + 1/Q_{\rm diel}$$
. (2.56)

Dabei beschreibt  $Q_{guide}$  die gewollte Kopplung des Einzeldefektes an die beiden an diesen angrenzenden Wellenleiter,  $Q_{rad}$  gibt die Kopplung an das Strahlungsfeld an und  $Q_{diel}$  enthält die dielektrischen Verluste. Für die Erzielung hoher Güten können Abstrahlverluste in vertikaler Richtung, bedingt durch das fehlende Confinement in axialer Richtung, besonders störend sein.

Beim hier betrachteten Basismaterial Silizium darf man  $Q_{\text{diel}}$  vernachlässigen, solange man sich spektral deutlich unterhalb der elektronischen Bandlücke von Silizium ( $E_{\text{gap}}^{\text{Si}} = 1,11 \text{ eV}$ ) befindet. In diesem Fall liegt der Absorptionskoeffizient im Bereich um  $10^{-7} - 10^{-8} \text{ cm}^{-1}$ . Bei den hier durchleuchteten summierten Schichtdicken von etwa 10  $\mu$ m spielen Absorptionseinflüsse folglich keine Rolle.

## 2.7. Fabry-Perot-Interferenzen

Da bei optischen Transmissionsuntersuchungen an dielektrischen Körpern mit planparallelen Durchstrahlungsflächen Interferenzerscheinungen derart, wie sie von Fabry-Perot(FP)-Interferometern bekannt sind, eine wichtige Rolle spielen, wird hier kurz auf einige grundlegende Merkmale dieser Interferenzerscheinungen eingegangen. FP-Interferometer dienen zum einen als äußerst hochauflösende,



**Abbildung 2.20.:** Fabry-Perot-Etalon, bestehend aus zwei planparallel orientierten Glassubstraten mit hochreflektierenden, zugewandten Oberflächen. Nach [34].

spektroskopische Untersuchungseinheiten, andererseits stellen sie die grundlegende Form gängiger

Laserresonatoren dar. Wie in Abb. 2.20 zu sehen, besteht die einfachste Bauform, das sog. FP-Etalon, aus planparallelen, hochreflektierenden Oberflächen, die im Abstand *d* voneinander angeordnet sind. Die hochreflektierenden Oberflächen werden meist durch Bedampfung geeignet transparenter Substrate mit einem teiltransparenten Metallfilm aus Aluminium oder Silber hergestellt. In besonders hochwertigen Systemen verwendet man dielektrische Multischichten, um die Reflektivität der Spiegel noch weiter zu steigern und gleichzeitig Absorptionsverluste durch die Metallfilme zu vermeiden. Macht man einen der beiden Spiegel beweglich (bzw. sorgt auf andere Weise für Veränderbarkeit des optischen Abstands der Spiegel, wie z. B. durch eine Manipulation des Gasdrucks im Spiegelzwischenraum), so entsteht aus dem Etalon ein Interferometer. Durchleuchtet man das Etalon mit einer monochromatischen, diffusen Strahlungsquelle, so entsteht auf dem Schirm ein Muster von konzentrisch angeordneten Ringen, deren radialer Verlauf in Abb. 2.21 beispielhaft wiedergegeben ist.



Abbildung 2.21.: Intensitätsverteilung der Vielstrahlinterferenz an Etalons mit Spiegelabstand d und verschiedenen Finess-Koeffizienten F als Funktion des Phasenunterschieds  $\delta$ .

Alle Teilstrahlen, die in den Luftspalt unter einem Winkel  $\theta$  eintreten, tragen zur Ausbildung eines einzelnen Beugungsringes gleichförmiger Helligkeit bei. Ist *d* bekannt, so kann man den Phasenunterschied zweier benachbarter Teilwellen,  $\delta$  berechnen gemäß

$$\delta = \frac{4\pi}{\lambda_0} nd\cos\theta. \tag{2.57}$$
Dabei ist  $\lambda_0$  die Vakuumwellenlänge des monochromatischen Lichtes und *n* der Brechungsindex des Mediums im Spiegelzwischenraum. Der Anteil der transmittierten Lichtintensität,  $I_T$ , zur einfallenden,  $I_E$ , läßt sich schreiben als

$$\frac{I_T}{I_E} = \frac{T^2}{1 + R^2 - 2R\cos\delta} =$$
(2.58)

$$= \left(\frac{T}{1-R}\right)^{2} \frac{1}{1+\left[4R/(1-R)^{2}\right]\sin^{2}(\delta/2)} =$$
(2.59)

$$= \left[1 - \frac{A}{1 - R}\right]^{2} \mathcal{A}(\theta), \qquad (2.60)$$

$$\mathcal{A}(\theta) = \frac{1}{\left[1 + F \sin^2(\delta/2)\right]} \quad (\text{Airy} - \text{Funktion}). \tag{2.61}$$

A ist der von der Oberflächenverspiegelung absorbierte Lichtanteil, die Absorptanz, und F ist der Finess-Koeffizient, definiert als  $F = 4R/(1-R)^2$ . Schließlich gibt die Finesse  $\mathcal{F}$  an, wie stark benachbarte Ringe separiert sind im Vergleich zur Halbwertsbreite dieser Ringe:

$$\mathcal{F} = \frac{\pi\sqrt{F}}{2} = \frac{\pi\sqrt{R}}{1-R} \,. \tag{2.62}$$

Da bei den hier untersuchten Strukturen  $\theta \approx 0$  gilt, findet jetzt eine Beschränkung auf  $\theta = 0$  statt. Somit können wir den Begriff des "Freien Spektralbereichs"  $(\lambda_0)_{\text{fsr}}$  (fsr: *engl.* free spectral range) einführen, d. h. des Wellenlängenabstandes, der einem Phasenunterschied von  $2\pi$  entspricht,

$$(\lambda_0)_{\rm fsr} = \frac{\lambda_0^2}{2nd}.$$
(2.63)

 $(\lambda_0)_{\rm fsr}$  läßt sich auch im Sinne eines Modenabstandes  $(\Delta \nu)_{\rm fsr} =$  im Frequenzbereich interpretieren:

$$(\Delta\nu)_{\rm fsr} = \frac{c}{2nd} \,. \tag{2.64}$$

Beschränkt man die Airy-Funktion der Abb. 2.21 auf die Grundperiode,  $-\pi \le \delta \le \pi$  und macht eine Reihenentwicklung der Airy-Funktion, so findet man, daß diese sich in sehr guter Näherung von einer Lorentz-Funktion anfitten läßt. Dies soll benutzt werden, um die Eigenschaften der gefundenen FP-Resonanzen zu quantifizieren.

Es soll noch darauf hingewiesen werden, daß in obigem Formalismus der Brechungsindex n und damit auch  $\varepsilon$  als Konstanten betrachtet werden. In anderen Worten: Das Medium zwischen den Resonatorspiegeln wird als solches linearer Dispersion gemäß Gl. 2.27 betrachtet. Die Näherung linearer Disperion kann bei Photonischen Kristallen jedoch nur für im Frequenzraum lokale Betrachtungen, z. B. bzgl. des Abstandes zweier benachbarter Resonanzen, Verwendung finden.

## 2.8. Anwendungen Photonischer Kristalle

Die beiden grundlegenden Prinzipien, auf denen nach jetzigem Kenntnisstand der überwiegende Teil des Anwendungspotentials Photonischer Kristalle basiert, sind

- die vollständige Unterdrückung der spontanen Emission eingebauter Leuchtzentren für Übergangsfrequenzen innerhalb der Photonischen Bandlücke [3],
- die räumliche Lokalisierung von Licht für Zeiträume, die um viele Größenordnungen über den in der Photonik sonst üblichen Zeitskalen liegen [2, 56].

Fußend auf diesen beiden Prinzipien wurden innerhalb der zurückliegenden zwölf Jahre eine Reihe von neuartigen Effekten vorhergesagt wie beispielsweise die Möglichkeit

- "gebundene" Zustände von Photonen und Atomen zu erzeugen [57],
- der Erzeugung von Quanten-Gap Solitonen [58],
- optischen Schaltens mit niedriger Schwelle [59],
- von Bandkanten-Lasing mit niedriger Schwelle [60],
- der Realisierung einer einmodigen Leuchtdiode [7].

Diese Reihe ließe sich noch bedeutend erweitern. Einige wenige Grundzüge dieser Anwendungen sollen in den beiden nachfolgenden Abschnitten umrissen werden.

#### 2.8.1. Klassische Elektrodynamik

Elektromagnetische Wellen, deren Frequenz in einer Bandlücke des Photonischen Kristalls liegt, können sich darin nicht ausbreiten, werden also zu 100% reflektiert. Demzufolge wurden z. B. Miniatur-Antennen auf Photonische Kristalle montiert, was deren Abstrahlcharakteristika stark verbesserte [8, 61]. Weitere Einsatzfelder, besonders für zweidimensionale Photonische Kristalle, sind die Frequenz-, Richtungs- und/oder Polarisationsfilterung, wie bereits überzeugend nachgewiesen wurde[12, 62].

Elektromagnetische Wellen werden konventionell entweder in metallenen Hohlleitern (Mikrowellen) oder in dielektrischen Wellenleitern (Optischer Bereich) geführt. Dabei ist der Integration dielektrischer Wellenleiter, die gewöhnlich auf der Basis von Totalreflexion arbeiten, durch die Strahlungsverluste an stärker gekrümmten Wellenleitern eine Grenze gesetzt, welche von Wellenleitern in Photonischen Kristallen durchbrochen werden kann [49]. Es gibt zwar erfolgreiche Versuche, winzige Spiegelflächen für geknickte, integriert-optische Wellenleiter zu verwenden [63]. Der technologische Aufwand hierfür ist jedoch enorm.

In Analogie zu elektronischen Halbleitern kann man, wie bereits erwähnt, durch den Einbau von Defektstrukturen lokal die Zustandsdichte innerhalb der Bandlücke modifizieren. In Makroporösem Silizium sind die einfachsten denkbaren Defektstrukturen durch fehlende Porenzylinder im Sinne von Punkten und Linien zu realisieren (vgl. Abb. 2.13,2.16). Ein Punktdefekt führt zu definierten, lokalisierten Zuständen in der Bandlücke: Ein Wellenpaket, das zur Eigenfrequenz eines solchen

Punktdefektes resonant ist und das sich am Ort eines Punktdefekts befindet, kann diesen in Richtung senkrecht zu den Porenachsen nicht verlassen, d. h. es wird innerhalb der ersten Porenebenen, in die es eindringt, wieder zurückgestreut. Aus diesem Grund kann dieses Wellenpaket als "um den Ort des Punktdefekts lokalisiert" betrachtet werden.

Nach einem Vorschlag Yablonovitchs [7] könnte man den aktiven Bereich einer LED und die Eigenschaften eines mit einem Punktdefekt entsprechend "dotierten" Photonischen Kristalls derart verknüpfen, daß die LED nur in diese Resonatormode abstrahlen kann, da alle anderen relevanten Frequenzen in photonischen Bandlücken zu liegen kommen. Mit solch einer "Single Mode Light Emitting Diode" (SMLED) ließen sich laserähnliche Kohärenz mit extremer Robustheit und vor allem einer dramatisch verbesserten Lichtauskoppeleffizienz aus dem aktiven Chip kostengünstig kombinieren. Dies ist ein alternatives Konzept zu dem bereits in der Einleitung erwähnten [4].

#### 2.8.2. Nicht-lineare- und Quantenoptik

Die Kontrolle der Lichtausbreitung mittels Photonischer Kristalle eröffnet auch außerhalb der klassischen Elektrodynamik gänzlich neue Möglichkeiten, besonders in den Bereichen der nicht-linearen Optik und der Quantenoptik. Ein mittlerweile wohlbekanntes Phänomen, nicht nur im Bereich der Optik, stellen Solitonen dar: Solitonen sind Lösungen nichtlinearer Wellengleichungen und können beispielsweise in der Natur bei starkem Regenguß auf abfallenden Straßen in Form von stufenartigen Wellen beobachtet werden. Charakeristisch für Solitonen ist dabei, daß sie ihre Form während der Ausbreitung nicht verändern. Sie sind dispersionsfrei. In einem nicht-linearen Dielektrikum, d. h. bei intensitätsabhängigem Brechungsindex, kann das Zerfließen eines Wellenpaketes während seiner Ausbreitung aufgrund von Dispersion durch Selbstfokussierungseffekte kompensiert werden. In diesem Fall formiert sich wiederum ein Soliton. Die zeitliche Stabilität macht diesen Wellentyp z. B. besonders attraktiv für die Nutzung als Informationsträger, weil man mittels Solitonen Signale extrem hoher Pulsraten über weite Strecken schicken kann, ohne ein Verwaschen von aufeinanderfolgenden Pulsen befürchten zu müssen.

In eindimensionalen Photonischen Kristallen studiert man schon seit geraumer Zeit die Ausbreitung eines neuen Typs von Solitonen, der sogenannten Gap-Solitonen. Dabei geht man von einem Puls aus, dessen Trägerfrequenz in der Bandlücke eines Photonischen Kristalls liegt. Aufgrund eines intensitätsabhängigen Brechungsindex mindestens einer der Komponenten des Kristalls kann ein energiereicher Puls die photonische Bandstruktur lokal so weit "verbiegen", daß seine Trägerfrequenz sich außerhalb der Bandlücke wiederfindet. Der Puls schafft sich also, während er sich ausbreitet, einen eigenen Transmissionskanal. Das Studium von Gap-Solitonen in zwei- bzw. dreidimensionalen Photonischen Kristallen befindet sich noch ganz am Anfang, verspricht aber eine Fülle von interessanten Phänomenen. Verglichen mit eindimensionalen Strukturen bietet die Bandstruktur höherdimensionaler Kristalle qualitativ neue Eigenschaften, deren Nutzung an dieser Stelle nur angedeutet werden kann. Beispielsweise ist i. a. die Bandlücke in einer Hochsymmetrierichtung gegen die einer anderen leicht verschoben und die zugehörigen Moden des Photonischen Kristalls besitzen verschiedene Symmetrien. Dadurch ergibt sich eine Vielzahl von Solitontypen mit unterschiedlichen Schwellenintensitäten und Ausbreitungsgeschwindigkeiten [19, 64]. Es ist also denkbar, mit einem Soliton ein zweites Soliton zu schalten oder es in eine andere Richtung umzuleiten. Dabei kann man sich das erste Soliton als eine Art Eisbrecher für ein zweites Soliton derart vorstellen, daß es aufgrund seiner Intensität dem zweiten Soliton einen zuvor verwehrten Kanal durch das "Eis" der Photonischen Bandlücke bricht, wobei die Richtung des Kanals durch das erste Photon vorgegeben ist. Da die Eisrinne in unserem Gedankenexperiment auf einer Zeitskala von Pikosekunden wieder zufriert, hat man es hier mit ultraschnellen Phänomenen zu tun. Der Gedanke an einen optischen Transistor ist nicht abwegig. Generell sind den Ideen hier fast keine Grenzen gesetzt. Dies gilt noch mehr für das praktisch unerforschte Gebiet der Frequenzvervielfachung in photonischen Kristallen [65].

Die Quantenoptik ist ein weiteres Arbeitsgebiet, in dem Photonische Kristalle qualitativ neue Möglichkeiten bieten: Vereinfacht ausgedrückt erlaubt ein Maßschneidern der photonischen Zustandsdichte mittels Photonischer Kristalle eine weitgehende Kontrolle der Emissioncharakteristika entsprechender Leuchtzentren. Zur Illustration wollen wir das qualitative Verhalten eines idealisierten Zwei-Niveau-Atoms in einem Photonischen Kristall diskutieren. Liegt die Relaxationsfrequenz des angeregten Atoms in einer photonischen Bandlücke so kann es nicht durch einen Ein-Photon-Prozess in den Grundzustand zurückfallen. Vielmehr bildet sich ein gebundener Atom-Photon Zustand. Sofern man sich für die Relaxation des Atoms auf Zwei-Photonen-Prozesse beschränkt, ergeben Modellrechnungen für Frequenzen tief in der Bandlücke Lebenszeiten des angeregten Zustands von mehreren Tagen [57, 66]. Aufgrund der für quantenoptische Rechnungen typischen Idealisierungen ist diese Lebensdauer für reale Systeme sicher um einiges zu hoch. Es darf aber erwartet werden, daß die Lebensdauer angeregter Atome und Moleküle in geeigneten Photonischen Kristallen um Größenordnungen über ihrer Vakuumlebensdauer liegen wird. Allein diese Möglichkeit zur Kontrolle der spontanen Emission mittels maßgeschneideter Zustandsdichten wäre bereits für die experimentelle Quantenoptik von enormer Bedeutung [12].

## 3. Herstellung 2D Photonischer Kristalle

Da kristallines Silizium das dominierende Material der Halbleitertechnologie ist, wurde es über Jahrzehnte sehr intensiv sowohl von industrieller als auch von wissenschaftlicher Seite untersucht. Seine grundlegenden Eigenschaften gelten als sehr gut verstanden, auch wenn einige Siliziumsysteme selbst in jüngster Zeit noch für Überraschungen sorgen. So wurden Anfang der 90er Jahre die veränderten optischen Eigenschaften von mikroporösem Silizium entdeckt, welches effiziente Photolumineszenz [67] im sichtbaren Spektralbereich und eine vergrößerte elektronische Bandlücke [68] zeigt. Darauf basierend wurden optoelektronische Bauelemente entwickelt, welche bislang aber entweder in der Effizienz ihrer Elektrolumineszenz oder in ihrer Lebensdauer stark begrenzt sind [69].

Bei veränderten Prozeßparametern lassen sich außer den ungeordneten mikroporösen Strukturen auch mesoporöse (2 nm < Strukturgröße < 50 nm) und makroporöse (Strukturgröße > 50 nm) Gebilde realisieren. Letztere können sogar gitterperiodisch aufgebaut sein und dann die Eigenschaften eines Photonischen Kristalls besitzen [5, 6]. Auf dieser Erkenntnis wurzelt diese Arbeit, weshalb in den folgenden Kapiteln etwas in die Elektrochemie des Silizium-Flußsäure-Systems eingeführt wird. Dabei wird auf das anodische Ätzen von makroporösem Silizium, auf eine lithographische Vorprozessierung, um die Makroporen regelmäßig anzuordnen, und schließlich auf eine mikrotechnische Nachprozessierung, um die erhaltenen Strukturen optisch charakterisieren zu können, eingegangen werden.

## 3.1. Grundlagen

In Halbleitern erfolgt der Ladungstransport durch freie Elektronen im Leitungsband bzw. Löcher im Valenzband, während in Elektrolyten Ionen diese Aufgabe erfüllen. Soll über die Grenzfläche eines Halbleiters mit einem Elektrolyten Strom fließen, so muß ein Austausch von Ladungsträgern, also eine chemische Redox-Reaktion, stattfinden.

Zur Beschreibung der Vorgänge, die bei der Kontaktierung verschiedenartiger Materialien auftreten, zieht man das elektrochemische Potential heran. So führt an einer Kontaktfläche die Differenz der elektrochemischen Potentiale so lange zu einer Verschiebung der Ladungsträger in der Grenzschicht, bis die Potentialdifferenz an der Grenzfläche durch eine geladene Grenzschicht kompensiert wird. Dabei weisen Kontakte von Halbleitern mit Metallen oder Elektrolyten viele Ähnlichkeiten auf. An der Grenzfläche von Metallen sammeln sich freie Elektronen, während sich im Elektrolyten an der Grenzfläche eine geladene Doppelschicht aus Ionen ausbildet. In Kontakt mit einem Halbleiter wird die Ladung des Kontaktpartners durch eine ebenso große Ladung entgegengesetzten Vorzeichens kompensiert. Dies kann durch Ansammlung von Majoritätsladungsträgern oder Minoritätsladungsträgern an der Grenzfläche oder durch eine Schicht von ionisierten Dotieratomen erfolgen. Da letztere unbeweglich sind, kann sich die damit verbundene Raumladungszone über mehrere Mikrometer ausdehnen.

Die Redox-Reaktion verläuft im anodischen Fall entweder so, daß Elektronen in den Halbleiter injiziert werden oder, daß Löcher an die chemischen Spezies im Elektrolyten abgegeben werden [14]. An der Oberfläche des Halbleiters wird ein Defektelektron zu einer gebrochenen Bindung. Elektroneninjektion und Locheinfang gehen mit der Oxidation der Halbleiteroberfläche einher. Bei anodischer Polung in sauren Lösungen wird eine Siliziumelektrode oxidiert, wobei die entstehende Oxidschicht die Reaktion schließlich unterbindet. Im Gegensatz zu flußsäurehaltigen Lösungen, in denen die Oxidschicht nicht stabil ist, so daß es zur allmählichen Auflösung der anodisch gepolten Siliziumelektrode kommt. In Abhängigkeit vom anodischen Potential erfolgt diese Auflösung in einer divalenten (Gl. 3.1) oder tetravalenten (Gl. 3.2) Auflösungsreaktion, welche also durch zwei oder vier Löcher initiiert werden muß:

$$Si + 6HF + (2 - \delta)e^+ \rightarrow SiF_6^{2-} + H_2 + 4H^+ + \delta e^-, \quad \delta < 2.$$
 (3.1)

$$Si + 6HF + (4 - \delta)e^+ \rightarrow SiF_6^{2-} + 6H^+ + \delta e^-, \quad \delta < 4.$$
 (3.2)

Dabei können zahlreiche Zwischenschritte auftreten, so daß hier nur die bekannten Summengleichungen angegeben sind. Im Falle der tetravalenten Auflösung geht man von einer Zwischenoxidbildung aus. Eine mögliche Injektion von Elektronen wird durch den Parameter  $\delta$  berücksichtigt. Weiterführende Literaturverweise hierzu findet man in [70, 71]. Insbesondere zur Elektrochemie von Silizium sei auf [72] verwiesen.

Die komplexen Auflösungsmechanismen des Silizium-Elektrolyt-Systems, die je nach Substratund Elektrolytwahl zu einer Vielzahl von Porenformen führen können, versucht man derzeit in einem vielversprechenden Gesamtmodell zu erfassen [73, 74].

## 3.2. Elektrochemisches Ätzen von Makroporösem Silizium

Halbleiter-Elektrolyt-Systeme zeigen in erster Näherung ein Verhalten, das dem eines Schottky-Kontaktes (Halbleiter-Metall-Kontakt) ähnlich ist. Für die hier betrachtete Makroporenätzung ist vor allem der anodische Bereich der Strom-Spannungs-Kennlinie des Silizium-Flußsäure-Systems von Bedeutung. In diesem Bereich ist für die chemische Reaktion ein Fluß von Löchern (vgl. Gl. 3.1,3.2) nötig, so daß eine p-dotierte Siliziumelektrode Durchlaßverhalten zeigt, während eine n-dotierte sperrt, solange sie unbeleuchtet bleibt. Durch Beleuchtung mit Photonen einer Energie oberhalb der elektronischen Bandlücke von Silizium werden durch Absorption Elektron-Loch-Paare erzeugt, so daß bei ausreichend intensiver Beleuchtung Löcher zur Initiierung einer chemischen Auflösungsreaktion an der Grenzfläche Silizium-Flußsäure zur Verfügung stehen können. Die Siliziumelektrode wird dabei korrodiert. Die Morphologie der korrodierten Oberfläche wird im wesentlichen von der anodischen Spannung bestimmt. Während bei hohen Spannungen ein Elektropoliervorgang beobachtet wird und eine relativ glatte Oberfläche entsteht, setzen bei niedrigeren Spannungen Porenbildungsmechanismen ein. Die Morphologie der entstehenden Poren hängt stark von den Ätzparametern, wie Elektrolytkonzentration und -temperatur, Substratdotierung, Beleuchtungsintensität und wellenlänge und einigen weiteren Details ab. Dabei entstehen entweder räumlich ungeordnete, schwammförmige Strukturen oder Porenkanäle mit starker Anisotropie, wie im Fall der Makroporen. Wie man in Abb. 3.1 erkennt, sperren unbe-

leuchtete, n-dotierte Siliziumelektroden im anodischen Bereich. Dieses Verhalten ändert sich, falls durch einen Mechanismus Löcher generiert werden. Dies kann z. B. durch anodische Spannungen im Durchbruchsbereich oder durch die erwähnte Photogeneration von Löchern geschehen. Bei sehr intensiver Photogeneration verläuft die Kennlinie für n-Silizium ähnlich einer für p-Silizium. Sie ist gekennzeichnet durch ein lokales Maximum bei der Stromdichte  $J_{ps}$ , die den Übergang vom Auflösungsmechanismus der Porenbildung zu dem des Elektropolierens kennzeichnet. Dabei verschiebt sich der Reaktionsmechanismus von der divalenten Auflösung unter Wasserstoffbildung zur tetravalenten Auflösung. Die elektrochemische Valenz, d. h. die zur Ablösung eines Siliziumatoms nötige Anzahl von



Abbildung 3.1.: Strom-Spannungs-Kennlinie von pund n-Silizium in einem Flußsäure-Elektrolyten im anodischen Bereich. Im Gegensatz zu p-Silizium unterscheiden sich für n-Silizium die Kennlinien im beleuchteten bzw. unbeleuchteten Fall deutlich.

Löchern liegt im Porenbildungsbereich, in dem der Nachschub an Löchern die Reaktion limitiert, bei n = 2 und steigt im Elektropolierbereich, in dem der Nachschub an Reaktanten die Reaktion begrenzt, auf n = 4. Die Verschiebung der Kennlinien zwischen p- und n-dotiertem Silizium von ca. 0,5 V ist durch die dotierungsabhängige Einsatzspannung, d. h. durch die unterschiedliche Lage des Redox-Potentials zum Ferminiveau des Halbleiters, bedingt.

Eine der Grundaussagen der in der Literatur vorhandenen Porenbildungsmodelle ist, daß die Verfügbarkeit von Löchern an der Grenzfläche von Silizium und Elektrolyt bestimmt, an welchen Stellen Porenbildung stattfindet. Damit wird die Brücke geschlagen zur dotierungsabhängigen Morphologie von porösem Silizium, da die Dotierung die Ausdehnung der Raumladungszone bei gegebenem anodischen Potential bestimmt. Für einen Überblick über die bestehenden Modelle zur Porenbildung in n-Silizium sei an dieser Stelle auf den Übersichtsartikel von Smith und Collins verwiesen [75].



**Abbildung 3.2.:** Strom-Spannungs-Kennlinie des Systems n-Silizium in wäßriger Flußsäure bei Beleuchtung. Schraffiert dargestellt ist der für die Makroporenätzung wichtige Bereich, in dem stabiles Porenwachstum für den Spannungsbereich rechts des lokalen Strompeaks bei  $J_{ps}$  beobachtet wird. Der Zusammenhang von Ätzstromdichte und erzeugtem Porendurchmesser ist bei drei verschiedenen Stromdichtewerten skizziert. Analog [6].

Im folgenden wird das für diese Arbeit zutreffende Modell von Lehmann [14] für die Bildung von Makroporen in n-Silizium unter Beleuchtung beschrieben. Dieses Modell zeichnet sich durch seine unmittelbare technologische Umsetzbarkeit aus. Es basiert auf der Erkenntnis, daß man bei n-Silizium einen zusätzlichen Freiheitsgrad zur Regelung des anodischen Stromes bekommt, wenn man sich der Photogeneration von Löchern bedient. Durch Regelung der Beleuchtungsintensität kann die Stromdichte unterhalb der oben eingeführten kritischen Stromdichte  $J_{ps}$  gehalten werden, so daß auch für Spannungen rechts dieses lokalen Maximums Porenbildung erhalten werden kann. In Abb. 3.2 ist skizziert, wie im Porenbildungsbereich von n-Silizium sich der Durchmesser der erzeugten Poren mit der Ätzstromdichte verändert. Da der Löcherstrom und die Auflösungsrate von Siliziumatomen an der Porenätzfront über die elektrochemische Valenz n verknüpft sind, ist die Porösität an der Ätzfront direkt proportional zur gewählten Stromdichte.

Damit Makroporenwachstum stattfinden kann, ist es wichtig, die Löcher definiert der Grenzfläche zuzuführen und insbesondere darauf zu achten, daß der Bereich der Porenzwischenwände an Löchern verarmt bleibt, damit bestehende Porenwände nicht weiter aufgelöst werden. In Abb. 3.3 ist wiedergegeben, wie man durch geschickte Wahl des Löcherstroms diese Bedingung erfüllen kann. Voraussetzung ist die Verwendung von n-Typ Silizium, in dem Löcher die Minoritätsladungsträger darstellen, also vorerst verarmt sind. Durch Beleuchtung der Probenseite, die der Grenzfläche zum Elektrolyten abgewandt ist, mit sichtbarem oder infrarotem Licht ( $\lambda < 1,2 \mu$ m) werden durch Absorption Elektron-Loch-Paare erzeugt. Angetrieben durch den Konzentrationsgradienten der Löcher zwischen grenzflächenabgewandter Seite (Quelle) und Grenzfläche (Senke) diffundieren die Löcher durch das Volumen des Substrates zur Auflösungsgrenzfläche und werden dort von den um die Porenspitzen stark gekrümmten Raumladungszonen in Richtung der Porenspitzen gelenkt. Dadurch bleiben bestehende Porenwände an Löchern verarmt. Diese Art "Absaugung" der Löcher durch die Raumla-



Abbildung 3.3.: Schematische Darstellung der Makroporenätzung in n-Typ Silizium niedriger Dotierung. Durch Rückseitenbeleuchtung mit sichtbarem Licht werden im Wafer Elektron-Loch-Paare erzeugt. Die Elektronen werden durch die anodische Polung abgesaugt, während die Löcher in den Wafer diffundieren und so zur Grenzfläche Silizium-Elektrolyt gelangen. Dort werden sie bei der Auflösung von Silizium verbraucht. Bei Wahl geeigneter Ätzparameter (Wafer-Dotierung, Ätzspannung, Beleuchtungswellenlänge, Gitterkonstante, Porendurchmesser) können keine Löcher in die Porenzwischenwände eindringen, da die gekrümmte Raumladungszone diese gewissermaßen lokal in Richtung der nächstgelegenen Porenspitze fokussiert, wo sie beim Auflösungsprozeß konsumiert werden. Das rechte Teilbild zeigt eine Vergrößerung des umkreisten Bereichs des linken Bildes. Die rote Wellenlinie deutet den unteren Rand der geladenen Raumladungszone (RLZ) an. In dieser verlaufen elektrische Feldlinien von den ortsfesten Donatorenrümpfen zu den an der Si-Oberfläche "anhaftenden" Fluorionen.

dungszonen an den Porenspitzen ist deshalb so effektiv, weil innerhalb der Raumladungszonen die elektrischen Feldlinien in Richtung der Porenspitzen fokussiert sind, und somit zur Diffusionskomponente plötzlich eine dominante Driftkomponente kommt. Um diesen Prozeß bei einem polierten Si-wafer definiert zu starten, ist eine Vorbekeimung sinnvoll (vgl. Abb. 3.4).

Lehmann legte nun der Makroporenbildung in beleuchtetem n-Silizium die Hypothese zu Grunde, daß während des Porenwachstums lokal an der Porenspitze über dem Querschnitt jeder Pore die kritische Ätzstromdichte  $J_{ps}$  vorliegt. Die Porenspitzen befinden sich also in einem Gleichgewicht aus Löchertransfer und Elektrolyttransfer, so daß alle Löcher in der Auflösungsreaktion verbraucht werden. Verändert man z. B. während eines Wachstumsprozesses die Gesamtstromdichte, so bleibt diese Hypothese dadurch erhalten, daß sich



Abbildung 3.4.: Schematische Darstellung der Erzeugung von Porenkeimen an der Substratoberfläche, welche die Startpositionen der Makroporen vorgeben.

der Querschnitt der wachsenden Poren anpaßt. Auf diese Weise können gezielte Durchmesservariationen beim Porenwachstum durch Anpassung der Beleuchtungsdichte erreicht werden.

Der pro Flächeneinheit fließende Ätzstrom läßt sich über die elektrochemische Valenz n und die Porenwachstumsgeschwindigkeit v mit dem für diese Flächeneinheit verbundenen Materialverlust pro Zeiteinheit verknüpfen:

$$J = N_{\rm Si} \, n \, e \, v$$
 wobei  $N_{\rm Si} = 5, 0 \times 10^{22}, \, e = 1,6022 \times 10^{-19} {\rm C} \,.$ 
  
(3.3)

Die elektrochemische Valenz liegt meist bei n = 2,6 und verändert sich für Stromdichten um  $J_{ps}$  derart, daß sich für  $J = J_{ps}$  die maximale Porenätzgeschwindigkeit einstellt. Zudem ist  $J_{ps}$  von der Kristallrichtung abhängig, in die das Porenwachstum stattfindet. Für die  $\langle 100 \rangle$ -Richtung des kubischen Siliziumgitters wird dieser Wert maximal. Aus diesem Grund dienen meist (100)orientierte Siliziumsubstrate als Ausgangsmaterial.

Nach dem Porenätzmodell von Lehmann [14] findet der Stromfluß ausschließlich über die Porenböden statt. Der Gesamtstrom ergibt sich also als Summe der über alle Porenböden fließenden Teilströme. Geht man von gitterperiodisch angeordneten Poren aus mit einer Pore pro Einheitszelle (EZ), so ergibt sich die Stromdichte J als

$$J = \frac{A_{\rm p}}{A_{\rm EZ}} J_{\rm ps}$$
 mit  $J_{\rm ps} = C c^{1.5} {\rm e}^{-\frac{E_{\rm a}}{k_{\rm B}T}}$ . (3.4)



Abbildung 3.5.: Schräger Anschliff einer Probe aus Makroporösem Silizium mit quadratischem Raster. Die Einfügung zeigt die durch Photolithographie in eine dünne Siliziumoxidschicht und durch anschließende Ätzung in einer KOH-Lauge in das daruntergelegene Siliziumsubstrat übertragenen Strukturen der Porenätzkeime.

Die Konstanten der empirisch ermittelten Beziehung für  $J_{ps}$  sind  $C = 3, 3A/cm^{-2}(Gew - \%)^{-1,5}$ ,  $E_a = 343 \text{ meV}$  und der Boltzmann-Konstante  $k_B$ . Die Flußsäurekonzentration c ist in Gewichtsprozent (Gew-%) und die Temperatur T in Kelvin einzusetzen. In dieser Arbeit werden hexagonale Anordnungen von Poren mit einer Gitterkonstante a um 1,5  $\mu$ m untersucht. Die Fläche der Einheitszelle ergibt sich demzufolge zu  $A_{EZ} = \sqrt{3}/2 a^2$ . Beschreibt man den Porenquerschnitt nun noch durch eine Kreisfläche, so ergibt sich folgender Zusammenhang zwischen dem Radius der wachsenden Poren und der durch die Beleuchtungsdichte eingestellten Ätzstromdichte:

$$R = \sqrt{\frac{\sqrt{3}}{2\pi}} \sqrt{\frac{J}{J_{\rm ps}}} a \,. \tag{3.5}$$

Mit diesem Zusammenhang können großvolumige makroporöse Strukturen mit definiertem Porenradius erzeugt werden, wie dies in Abb. 3.5 für ein quadratisches Gitter angedeutet ist.

## 3.3. Mikrostrukturierung

Bei einer transmissionsoptischen Untersuchung von Photonischen Kristallen strahlt man in der Regel parallel zu einer Periodizitätslinie oder -ebene des Kristalls ein, um die Auswirkungen der periodischen Schwankungen der Dielektrizitätskonstante auf das Transmissionssignal zu untersuchen (vgl. Abb. 2.1). Die Länge der hier untersuchten Makroporen (ca. 100  $\mu$ m) entspricht somit der maximalen Höhe des zu durchstrahlenden Probenbereichs. Um zu gewährleisten, daß ein transmittiertes Signal von der geringen Höhe der Strukturen nichts spürt, ist es daher sinnvoll, die Dicke der durchstrahlten Probe deutlich unter 100  $\mu$ m zu halten (vgl. Abb. 4.1). Da eine direkte mechanische Präparation nicht möglich ist, wurde das von Ottow entwickelte mikrotechnische Verfahren verwendet [6, 22, 76]. Dieses basiert auf der selektiven Ätzung von Si gegen SiO<sub>2</sub> durch ein reaktives CF<sub>4</sub>+O<sub>2</sub> Plasma. Die Prozeßabfolge ist in Abb. 3.6 skizziert. Nach der Ätzung der großflächigen Makroporenfelder wird ein passivierendes SiO<sub>2</sub> (ca. 20 nm dick) auf dem Wafer, d. h. auf allen Oberlächen, aufgewachsen. Da die thermische Oxidation von Silizium mit einer Volumenausdehnung um ca. 100% verbunden ist, entsteht eine merkliche Verbiegung des Wafers, welche durch eine nachfolgende Abscheidung eines Siliziumnitrides (Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>, ca. 30 nm dick) kompensiert wird. Im nächsten Schritt wird eine ca. 2 µm dicke Aluminiumschicht aufgesputtert, welche die Porenöffnungen flächig wie ein Deckel abschließt. Nach einer mechanischen Planarisierung wird die Aluminiumschicht durch Photolithographie und naßchemischem Ätzen in Phosphorsäure strukturiert. Es entstehen geöffnete Fenster im Aluminiumdeckel. Durch einen weiteren naßchemischen Ätzschritt werden die



Abbildung 3.6.: Prinzip der Mikrostrukturierungstechnik für die Herauspräparation definierter Makroporenbereiche. passivierenden Schichten aus SiO<sub>2</sub> und Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> in den Bereichen entfernt, in denen der Aluminiumdeckel offen ist. Der nächste Prozeßschritt besteht aus der eigentlichen Mikrostrukturierung: In einem reaktiven Plasma aus CF<sub>4</sub> und O<sub>2</sub> werden die ungeschützten Makroporenbereiche geätzt, d. h. der O<sub>2</sub>-Anteil sorgt für eine Bildung von SiO<sub>2</sub>, welches von aus CF<sub>4</sub> entstandenen, reaktiven Fluorverbindungen in ein flüchtiges Produkt umgewandelt wird. Auf diese Weise werden die ungeschützten Makroporenwände geätzt. Schließlich bleiben nur die passivierten Bereiche stehen. Auf diese Weise



**Abbildung 3.7.:** REM-Aufnahme eines breitenmodulierten Streifens von Makroporösem Si auf Si-Substrat (a). Die 100  $\mu$ m hohen Porenwände sind in Transmissionsrichtung ca. 18  $\mu$ m breit (b). Durch Auslassung von Poren wurde eine Wellenleiterstruktur eingebaut (c). Bedingt durch die hier gewählte Abschneidelinie im hexagonalen Raster bekommt die Seitenwand eine gitterartige Oberfläche (d) [11].

können Makroporenbereiche mit beliebiger lateraler Geometrie geformt werden, wie dies in Abb. 3.7 zu erkennen ist. Sogar die Präparation einer einzelnen, freistehenden Reihe von Makroporen ist möglich (vgl. Abb. 5.17).

# 4. Probenpräparation, Untersuchungsmethoden

## 4.1. Probenpräparation für optische Messungen

Nach erfolgreicher Durchführung des in Abschnitt 3.3 aufgeführten Mikrostrukturierungsverfahrens liegen die zu untersuchenden Probenbereiche in Form von 100  $\mu$ m hohen und 1-100  $\mu$ m breiten Streifen vor. Diese sind noch mit dem Restsubstrat, welches im Makroporenätzprozeß nicht porös geätzt wurde, verbunden. Da alle hier aufgeführten Charakterisierungsmethoden auf Transmissionsmessungen beruhen, ist es folglich wichtig, den transmittierenden Bereich auf den porösen Bereich einzuschränken. In anderen Worten: Lecklichtpfade müssen vermieden werden, damit man eine Signaldynamik von einigen Größenordnungen erzielen kann. Die wichtigsten Leckpfade verlaufen

- durch das Restsubstrat,
- über den porösen Streifen bzw. an diesem seitlich vorbei,
- durch mögliche Ausbruchstellen im porösen Streifen.

Das Restsubstrat läßt sich dadurch blocken, daß man die Bruchkanten mit Leitsilber optisch verschließt. Dies wird dadurch erleichtert, daß das Restsubstrat ca.  $20 \times$  breiter ist als der poröse Streifen, so daß das Restsubstrat also seitlich übersteht.

Naheliegend ist es, eine Klinge auf den porösen Bereich zu setzen, damit sich kein Licht darüber hinweg ausbreiten und den Detektor erreichen kann. In dieser Arbeit wurde ausschließlich ein Messinghalter mit einer breiten und einer spitz zulaufenden Kontaktfläche (vgl. Abb. 4.1) verwendet. Auf dem unteren Teil des Halters wurde mit einer feinen Pinzette das Probenstück aufgesetzt, mittig ausgerichtet und mittels Leitsilber fixiert. Anschließend konnte der obere Teil des Halters, geführt von zwei feingewindigen Edelstahlschrauben, auf den porösen Teil aufgesetzt werden. Um diesen Lecklichtpfad völlig zu verschließen, mußte man die Messingklinge einige  $\mu$ m tief in den porösen Streifen hineindrücken, wodurch dieser meist stärker beschädigt wurde. Es hat sich als sehr hilfreich erwiesen, diese Messingklinge mit einem Stück Schrumpfschlauch zu ummanteln, um solche Beschädigungen zu verhindern. Da die verwendeten Schrumpfschläuche ihrerseits schmale Transmissionsfenster im



Abbildung 4.1.: Probenhalter für die optische Charakterisierung

Infraroten besitzen, erwieß es sich als sinnvoll, 100-200 nm Gold oder Aluminium auf den Schrumpfschlauch aufzusputtern. Bei Proben, die auf diese Weise für die optische Charakterisierung präpariert waren, wurden keine Lecklichtanteile mehr gefunden.

## 4.2. Meßaufbauten für Transmissionsmessungen

In diesem Abschnitt soll kurz auf die wichtigsten Kenngrößen der verwendeten infrarot-optischen Meßsysteme eingegangen werden, welche für die Charakterisierung der in dieser Arbeit vorgestellten Probenstrukturen herangezogen wurden.

#### 4.2.1. Fourier-Transform-Infrarotspektrometer

Fourier-Transform(FT)-Spektroskopie ist eine Methode, bei der man mit einer einfachen, breitbandigen Anregungslichtquelle spektral aufgelöste Messungen durchführen kann. Spektrales Auflösungsvermögen wird dadurch erzielt, daß das Anregungslicht in einem gescannten Michelson-Interferometer einer Art Fourier-Transformation unterzogen wird (vgl. Abb. 4.2): Es entsteht eine Beziehung zwischen dem Stellweg des bewegten Spiegels und der konstruktiv das Interferometer passierenden Frequenz. Das ursprünglich kontinuierliche Anregungsspektrum wird zerhackt. Bei den Nulldurchgängen eines Referenzlaserstrahls (typ. HeNe), der ebenfalls das Interferometer durchläuft, nimmt ein Rechner das Transmissionssignal des Detektors auf, welcher der Probe nachgeschaltet ist. Dadurch wird ein Datensatz von äquidistanten Stützstellen der Fouriertransformierten des gesuchten Spektrums erfaßt. Dieser wird abschließend vom Rechner rücktransformiert und ergibt so das gewünschte Spektrum der Probe bereits nach einem Scan des Interferometers.

Besonders vorteilhaft erweist sich FT-Spektroskopie im infraroten Spektralbereich (FT-IR), da man hier auf Basis eines SiC-globars als Anregungslichtquelle das Fehlen von kommerziellen, über große Frequenzbereiche durchstimmbaren Quellen teilweise umgehen kann.



**Abbildung 4.2.:** Schematischer Aufbau eines Fourier-Transform Spektrometers. Das Michelson-Interferometer zerhackt das kontinuierliche Spektrum der Quelle in seine Fourieranteile. An den Nullstellen des Helium-Neon-Referenzlasers wird das Transmissionssignal gemessen (Stützstellen der Fourier-Transformierten des gesuchten Spektrums) und schließlich von einem Rechner rücktransformiert.

In dieser Arbeit wurde das FT-IR Spektrometer Bruker IFS166 mit lN2-gekühltem HgCdTe-Detektor und einer spektralen Auflösung von 4 cm<sup>-1</sup> verwendet. Um den Einfluß der störenden Absorptionslinien der Luftfeuchte und von Kohlendioxid möglichst gering zu halten, wurde das gesamte Spektrometer fortwährend mit getrockneter und CO<sub>2</sub>-gefilterter Luft gespült. Vor Beginn einer Meßreihe wurde ein Referenzspektrum bei offenem Strahlengang (ohne eingesetzte Probe) aufgenommen, welches das Spektrum der Strahlquelle und etwaiger überlagerter Absorptionslinien widerspiegelte. Auf dieses Referenzspektrum wurden alle Folgespektren normiert.

### 4.2.2. Gepulstes Differenzfrequenz(DFG)-System

Die Verwendung des im Abschnitt 4.2.1 vorgestellten Spektrometers stieß an Grenzen, als Wellenleiterstrukturen (Breite ca. 1  $\mu$ m), die in die Kristalle eingebaut waren, untersucht werden sollten. Durch die schlechte Fokussierbarkeit des IR Strahles thermischen Ursprungs ist es bereits aus geometrischen Gründen prinzipiell unmöglich, einen signifikanten Anteil des später den Detektor erreichenden Lichtes an die in dieser Arbeit vorgestellten Wellenleiter einzukoppeln. Das Verhältnis zwischen beleuchteter "Einkoppelfläche" des Wellenleiters, d. h. des geometrischen Modenquerschnitts, und der insgesamt beleuchteten Fläche geht gegen Null, so daß kaum Signalhub zu erwarten war, wie in mehreren Vorversuchen bestätigt wurde. Aus diesem Grund wurde die Verwendung von Meßsystemen nötig, die folgende Mindestanforderungen aufweisen:

• Fokussierbarkeit in der Nähe der Beugungsgrenze

- hohe spektrale Intensität
- Durchstimmbereich zwischen 3  $\mu$ m  $< \lambda < 5 \mu$ m
- keine Strahlauswanderung beim Durchstimmen
- hohe spektrale Auflösung im nm -Bereich



Abbildung 4.3.: Schematischer Aufbau des Differenzfrequenz-Lasersystems, mit dem mittel-infrarotes Laserlicht des Wellenlängenbereiches von 3-5  $\mu$ m erzeugt werden kann. Die beiden infraroten Laserstrahlen eines kommerziellen Optisch-Parametrischen Verstärkers unterschiedlicher Frequenz werden in einem Kerr-aktiven Medium aus AgGaS<sub>2</sub> gemischt um die dazugehörige Differenzfrequenz zu erzeugen. Die Bandbreite der generierten 200 fs-Pulse liegt etwas unter 150 nm. Sie werden mit einer Repetitionsfrequenz von 250 kHz erzeugt und liefern eine mittlere Leistung von ca. 5 mW. Mittels sphärischer Linsen wird der Strahl auf einen Spot-Durchmesser von ca. 20  $\mu$ m auf die Oberfläche der Probe fokussiert. Das transmittierte Licht wird von einem pyroelektrischen Detektor erfaßt und mittels Lock-In-Technik aufbereitet.

Der in Abb. 4.3 skizzierte Differenzfrequenz(DFG)-Laseraufbau erfüllt diese Bedingungen, bis auf die der hohen spektralen Auflösung, sehr gut. Durch die zeitliche Pulslänge von wenigen Pikosekunden ist eine spektrale Breite der Meßpulse von 50-150 nm zu begründen. Die Funktionsweise des Aufbaus beruht auf den Prinzipien der Abkonversion (*engl.* down-conversion) und Differenzfrequenzbildung (*engl.* difference frequency generation) von hochenergetischen Laserpulsen in nichtlinear-optischen Medien.

Als eigentliche Ausgangslaserquelle für den DFG-Prozeß dient ein konventioneller Optisch-Parametrischer Verstärker (*engl.* optical parametric amplifier, OPA) der Firma Coherent. Dieser wird von einem vorgeschalteten Regenerativen Verstärker geseedet, der das Laserlicht eines vorgeschalteten, Argonionen-Laser-gepumpten Ti:Saphir-Lasers abkonvertiert. Der OPA liefert zwei Laserlichtstrahlen der Frequenzen  $\omega_1$  und  $\omega_2$ , die in einem AgGaS<sub>2</sub>-Kristall gemischt werden. Durch die hohen Kerr-Koeffizienten dieses Materials wird die Differenzfrequenz  $\omega_{DFG} = \omega_2 - \omega_1$  mit Leistungen von einigen mW erzeugt.  $\omega_2$  ist fest und  $\omega_1$  kann im OPA parametrisch durchgestimmt werden, so daß Der Laserstrahl des DFG-Systems wird durch eine sphärische Linse aus ZnSe mit einer Fokallänge von 19 mm auf die Oberfläche der zu untersuchenden Probe fokussiert, wobei ein Spot-Durchmesser von ungefähr 20  $\mu$ m erreicht wird. Mittels eines pyroelektrischen Detektors wird das transmittierte Signal gemessen. Der nachgeschaltete Lock-In-Verstärker nutzt die frequenzkonstante Modulation des Ausgangssignals zur Signalverbesserung. Durch eine Referenzmessung der Ausgangssignalintensität vor der Probe wird die beim Durchstimmen schwankende Signalintensität ausgeglichen.

Bei den im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Untersuchungen spielt die kurze Pulsdauer noch keine für das Experiment wichtige Rolle, ja sie schadet sogar durch die durch die Fourier-Relation auferzwungene große Bandbreite von bis zu 150 nm. Die kurzen Pulse sind jedoch wichtig, um bei den Abkonvertierungen nennenswerte Ausbeute zu erzielen. Bei den geplanten Untersuchungen z. B. zur Ausbreitung von Solitonen in Photonischen Kristallen werden die kurzen Pulse auch von experimentellem Nutzen sein.

#### 4.2.3. Dauerstrich Optisch Parametrischer Oszillator (OPO)

Ein optisch parametrischer Oszillator (OPO) eignet sich dazu, breitbandig abstimmbare Laserstrahlung zu erzeugen. Insbesondere in Kombination mit einem diodengepumpten Festkörperlaser, wie z. B. einem Nd:YAG-Laser, ist man mittlerweile in der Lage, Lichtleistungen von mehreren Watt bei einer Linienbreite im kHz-Bereich für den effizienten Betrieb von OPOs im Dauerstrichmodus zu liefern. Der hier verwendete OPO (Abb. 4.4) ist eine Neuentwicklung, bei der im parametrischen Oszillator eine größere Reihe von periodisch gepolten Lithiumniobatkristallen (PPLN) unterschiedlicher Periodenlänge (um 30  $\mu$ m) sitzt. Die Kristalle werden beidseitig von Peltiers auf eine gewünschte Temperatur eingestellt. Dieser OPO deckt den bis dato unerreichten Durchstimmbereich von ca. 1,45  $\mu$ m bis 4,0  $\mu$ m fast vollständig ab [77]. Die technologischen Grenzen dieses Modells werden, bei Verwendung eines frequenzverdoppelten Nd:YAG-Lasers, bei 0,6  $\mu$ m (OPO-Emission nicht kurzwelliger als Pumpwelle bei 532 nm) und 4,8  $\mu$ m (LiNbO<sub>3</sub> absorbiert langwellig hiervon) gesehen.

Die Durchstimmung kann prinzipiell erfolgen durch (Durchstimmweite bzw. -bereich in Klammern)

- Variation der Pumpfrequenz um maximal 10 GHz (einige GHz)
- Durchstimmung der Kristalltemperatur von 100...150°C. (einige  $10^{-2} \ \mu m$ )
- Wechseln der Periodenlänge des PPLN-Kristalls (1,45...4, 0  $\mu$ m).

Die Ermittlung der aktuellen Wellenlänge des "Idler"-Strahles erfolgt über einen Monochromator<sup>1</sup>, mit dem die Wellenlänge des nah-infraroten "Signal"-Strahles bestimmt wird. Da die Summe aus

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>ugs. "Hamschderkischdle"



Einfachresonanter OPO mit Pumpwellenüberhöhung

Abbildung 4.4.: Schematische Darstellung des Meßaufbaus mit Optisch-Parametrischem Oszillator (OPO). Als optische Pumpquelle dient ein diodengepumpter Nd:YAG-Laser (DPSS, Mephisto 800, Fa. Innolight), der im Dauerstrichbetrieb ca. 800 mW Lichtleistung bei einer Wellenlänge von 1064 nm liefert. Diese Quelle pumpt den eigentlichen Laserresonator, dessen Hauptbestandteil ein periodisch gepolter Lithiumniobat-Einkristall (PPLN) ist, in welchem die parametrische Oszillation stattfindet. Bei diesem Prozeß entstehen ab einer Pumpschwelle von ca. 200 mW aus einem Pumpphoton der Frequenz  $\omega_p$  ein Idler- ( $\omega_i$ ) und ein Signal-Photon  $\omega_s$ , wobei  $\omega_p = \omega_s + \omega_i$ . Die Ausgangsleistung der Idlerwelle kann gut 200 mW erreichen, während die Signalwelle eine Leistung von nur wenige mW hat. Quelle und Laserresonator sind über eine optische Diode (Faraday-Isolator) entkoppelt. Das aus dem Faraday-Isolator herausreflektierte Licht wird zur Strahlstabilisie-rung genutzt. Mit einem Monochromator wird  $\omega_s$  bestimmt, so daß auf  $\omega_i$  zurückgerechnet werden kann. Die Idlerwelle wird über einen Satz von sphärischen Saphirlinsen auf die Eintrittsfläche eines Wellenleiters der zu untersuchenden Mikrokavität fokussiert. Besonders erschwert wird das Experiment dadurch, daß die Idlerwelle sich in einem Wellenlängenbereich befindet, der selbst für Justagezwecke nicht mehr sichtbar gemacht werden kann. Die Detektion erfolgt mittels Bleiselenid-Photodioden.

"Signal"-Frequenz und "Idler"-Frequenz gleich der Pumpfrequenz sein muß, kann man folglich auf die "Idler"-Wellenlänge zurückrechnen. Auf diese Weise kann Meßpunkt für Meßpunkt aufgenommen werden.

# 5. IR-optische Messungen an defektfreien Kristallen

Im folgenden werden Untersuchungen dargestellt, die mit einer Reihe von infrarot-optischen Meßaufbauten (vgl. Abschn. 4.2) durchgeführt wurden. Die Verwendung verschiedener Aufbauten ist aufgrund der unterschiedlichen Problemstellungen nötig. So ist bei der Untersuchung des Transmissionsverhaltens in Abhängigkeit vom Wellenvektor  $\vec{k}$ , der Polarisation  $\sigma$  und des Füllkoeffizienten für den Grad der Porösität r/a ein sehr großer spektraler Abtastbereich von ca. 10  $\mu$ m bis herab zu 2  $\mu$ m Wellenlänge wünschenswert. Da man mit der hier vorgestellten Probenherstellungsmethode relativ große Probenquerschnittsflächen (0,1-0,2 mm<sup>2</sup>) für Transmissionsmessungen nutzbar machen kann, bieten sich Fourier-Transform Methoden (z. B. FT-Spektrometer mit thermischer Quelle) an.

Bei den Untersuchungen an den in die Kristalle integrierten Wellenleiterstrukturen schlugen FT-Methoden (FT-Spektrometer mit thermischer oder Synchrotronquelle) fehl, da mit diesen kein gezieltes Ankoppeln an diese Strukturen erreicht werden kann. Es wurde innerhalb der Photonischen Bandlücke kein Signal gefunden, das man den theoretisch vorhergesagten Wellenleitermoden zuordnen hätte können. Aus diesem Grund wurde ein Differenzfrequenz(DFG)-Lasersystem, das zwischen 3  $\mu$ m und 5  $\mu$ m durchstimmbar war, herangezogen. Mit diesem konnte man ein intensives Strahlenbündel auf die Eintrittsfläche von Wellenleiterstrukturen abbilden, deren Modenstrukturen innerhalb der Photonischen Bandlücken damit erstmals im infrarot-optischen Spektralbereich zugänglich gemacht werden konnten. Messungen hierzu werden im Abschnitt 5.2 und im Kapitel 6 vorgestellt.

Das DFG-System emittiert Pulse mit einer kurzen Pulslänge im Bereich von wenigen Pikosekunden. Aufgrund der Fourierbedingung  $\Delta \nu \cdot \Delta t \geq 1$  folgt aus der Pulsdauer eine spektrale Pulsbreite um 150 nm. Deshalb konnten die von den Mikrokavitäten erwarteten, schmalen Resonanzen (geschätzte Breite um 10 nm) hiermit prinzipiell nicht vermessen werden<sup>1</sup>. Als drittes System fand deshalb ein Optisch-Parametrischer-Oszillator (OPO) Anwendung, der im Dauerstrichbetrieb lief, eine sehr schmale Linienbreite von unter 5 MHz sowohl in der Signal- als auch in der Idlerwelle besaß und im Spektralbereich um die Bandlücke sehr gut fokussierbares Infrarotlicht bei Ausgangsleistungen um 100 mW lieferte. Dieses OPO System ist eine Neuentwicklung der Universität Konstanz und

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>Da man sich im optisch linearen Regime befindet, kann man im Prinzip die Auflösung in einem der durchstrahlten Probe nachgeschalteten Monochromator weiter erhöhen. Dies stellte sich jedoch aufgrund verschwindend geringer Signalintensität im Falle der Mikrokavitäten als wenig aussichtsreich dar.

wurde kürzlich unter dem Begriff "Optischer Synthesizer" in der Literatur bekannt [77, 78]. Die OPO-Messungen werden im Kapitel 7 dargestellt.

Analog zu Halbleitern wird vereinfachend und im Einklang mit der Verwendung in der Literatur nachfolgend der Begriff "Leitungsband" ("Valenzband") verwendet, wenn das sogenannte Luft-Band (dielektrische Band) gemeint ist.

Bei Messungen wird die Wellenzahlen- bzw. Wellenlängenskala in cm<sup>-1</sup> bzw.  $\mu$ m angegeben. Um einen Vergleich mit Transmissionsrechnungen anstellen zu können, wird meist deren natürliche Einheit, die dimensionslose Frequenz  $\omega^* = \omega a/2\pi c$  verwendet. Zur Umrechnung zwischen den verschiedenen Einheiten dient die Tabelle im Anhang B.

## 5.1. Fourier-Transform IR Untersuchungen

### 5.1.1. Transmissionsmessungen T( $\vec{k}, \sigma, r/a$ )

Wir beziehen uns im weiteren auf den in Abb. 3.7 dargestellen Kristall und betrachten Licht, das diesen Kristall senkrecht zur Ausrichtung der Porenachsen durchdringt. Das elektromagnetische Vektorfeld entkoppelt, wie bereits in Abschn. 2.3.2 erklärt, in diesem Spezialfall in die beiden Polarisationen E ( $\vec{E} \parallel \hat{z}$ ) und H ( $\vec{H} \parallel \hat{z}$ ). Für beide Polarisationsrichtungen existieren, unabhängig von der Ausbreitungsrichtung in der Ebene der Gitterperiodizität, Bandlücken, welche sich in den entsprechenden Rechnungen zur photonischen Zustandsdichte widerspiegeln (vgl. Abb. 2.10(rechts)). Zur Abschätzung der Mittenwellenlänge  $\lambda_c$  der Bandlücke kann man diese mit der doppelten optischen Ausdehnung der Einheitszelle für die betrachtete Richtung im Gitter gleichsetzen. Bei einem bestimmten Füllkoeffizienten r/a (r: Porenradius) ist die Bandlücke somit um

$$\lambda_{\rm c} = 2a \left[ 1 + n \left( 1 - 2\frac{r}{a} \right) \right] \tag{5.1}$$

zentriert. Dabei ist *a* die Gitterkonstante des Photonischen Kristalls und *n* der Brechungsindex des Dielektrikums, aus dem er aufgebaut ist. Gl. 5.1 berücksichtigt dabei lediglich den optischen Abstand zwischen zwei Gitterpunkten entlang  $\Gamma$  – K-Richtung und ordnet diesem  $\lambda/2$  zu. Da die Bereiche zwischen zwei Kristallreihen einen höheren Anteil von Dielektrikum aufweisen, liefert diese Abschätzung lediglich eine untere Schranke für die optische Ausdehnung und damit auch der Mittenwellenlänge der Bandlücke. Da jedoch für die Lage und Breite der Bandlücke der Einfluß des Leitungsbandes (Luftbandes) den des Valenzbandes (dielektrischen Bandes) bei weitem dominiert (vgl. z. B. Abb. 5.8 bzw. Abb. 5.10) und gleichzeitig die Moden des Leitungsbandes ihre Feldmaxima in den Luftbereichen besitzen, folglich nur gering vom vorhandenen Dielektrikum beeinflußt werden, ist Gl. 5.1 eine sinnvolle Abschätzung.

Der beispielhafte Vergleich einer Transmissionsrechnung, die auf der Methode der Entwicklung nach ebenen Wellen beruht (vgl. Abschn. 2.5.2), mit einer Transmissionsmessung in Abb. 5.1 zeigt, daß die theoretisch vorhergesagte Lage der Bandlücke, die sich hier naturgemäß in Form fehlender



**Abbildung 5.1.:** Gegenüberstellung von Transmissionrechnung und FT-IR Transmissionsmessung in  $\Gamma$ -M Richtung für H-Polarisation. Die beiden gestrichelten Linien markieren das Frequenzintervall der vollständigen Bandlücke, in der es unabhängig von Polarisation und Richtung in der *xy*-Ebene keine Ausbreitung in diesem Kristall gibt. Die senkrechten Pfeile deuten auf lokale Signalüberhöhungen hin, die auf Reflexionen an den Strukturgrenzflächen zurückgeführt werden konnten. [79]

Transmission ausdrückt, im Experiment sehr gut bestätigt werden kann. Absorption kann hier vernachlässigt werden, da im betrachteten Spektralbereich die Absorptionslänge  $\gg 1$  m ist [37] und die integrale Dicke der Siliziumschichten bei ca. 10  $\mu$ m liegt. Angegeben ist auch der Bereich der vollständigen Bandlücke, der sich durch die Überlagerung der polarisations- und richtungsabhängigen Messungen ergibt.

Die gezeigte Messung wurde mittels Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie durchgeführt. Das ermittelte Verhältnis der Transmissionsintensität zwischen den transparenten Bereichen und der Bandlücke selbst liegt mit knapp 3 Größenordnungen bei der Nachweisgrenze dieser Meßmethode. Die Probe hatte in Durchstrahlrichtung die Länge von 11 Einheitszellen (Kristallreihen), was auch in der Rechnung berücksichtigt wurde. Durch die herstellungsbedingt gitterartige Oberfläche der porösen Seitenwand ergibt sich eine leicht frequenzabhängige Einkopplung, die sich in einem Amplitudenunterschied zwischen Rechnung und Messung auf beiden Seiten der Bandlücke ausdrückt, da diese Frequenzabhängigkeit in der Rechnung nicht berücksichtigt ist. Die Bandlücke wird sehr gut reproduziert. Besonders hervorzuheben ist, daß es durch den großen Brechungsindexkontrast an den Ein-/Auskoppelflächen zu Teilreflektionen kommt, die zu Fabry-Perot-artigen Resonanzen (vgl. Abschn. 2.7) führen. Diese verursachen eine leichte Welligkeit der Kurven mit auf den ersten Blick äquidistanten Wellenbergen, welche sowohl in der Rechnung als auch in der Messung im Bereich um die Bandkanten auffällig sind. Diese werden im Abschnitt 5.1.5 näher untersucht. In Abbil-



Abbildung 5.2.: Gegenüberstellung von Transmissionrechnung (gestrichelt) und FT-IR Transmissionsmessung auf logarithmischer Skala für beide Vorzugsrichtungen im Reziproken Gitter,  $\Gamma - M$  und  $\Gamma - K$ , und für beide Lichtpolarisationen, H und E. Die Struktur besaß einen Füllfaktor r/a = 0,46 bei einer Gitterkonstante von  $a = 1,5 \ \mu m$  und einer Dicke von 13 ( $\Gamma - M$ ) bzw. 11 ( $\Gamma - K$ ) Kristallreihen. Die Mitte der vollständigen Bandlücke liegt bei  $\lambda_c = 3,22 \ \mu m$ . Ihre relativen Breite ist  $\Delta \lambda / \lambda_c = 12,9\%$ . Innerhalb der Bandlücke ist die Signalintensität um bis zu drei Größenordnungen reduziert.

dung 5.2 sind, in logarithmischer Darstellung, Transmissionsmessungen für beide Kristallrichtungen und beide Polarisationen mit entsprechenden Rechnungen verglichen. Die Mitte der vollständigen Bandlücke liegt bei 3,22  $\mu$ m Wellenlänge. Die Positionen der Bandkanten in Rechnungen und Messungen decken sich sehr gut. Der Unterschied in Signalintensität von hochgradig transparenten Bereichen und undurchlässigen Bereichen (Signaldynamik) ist bei der verwendeten Fourier-Methode durch Rauschprobleme auf etwa drei Größenordnungen beschränkt [35]. Deshalb kann die von der Rechnung für elf Kristallreihen vorhergesagte Signaldynamik von mindestens acht Größenordnungen mit diesem Spektrometer prinzipiell nicht erreicht werden. An den niedrigen Untergrundsignalen innerhalb der Bandlücken sind zwei Dinge besonders auffällig:

- 1. Die Signalintensität direkt an den Bandkanten liegt deutlich niedriger als durchschnittlich innerhalb der Bandlücke.
- 2. Die Intensität des Untergrundsignals steigt zu kleinen Wellenlängen hin an.

Dies kann man so interpretieren, daß Streuung an leichten Abweichungen der tatsächlichen Porenform von der idealen Zylinderform (Durchmesserschwankungen während des Porenwachstums) eine, wenn auch stark untergeordnete, Rolle spielt. Für Wellen, deren Frequenzen innerhalb der Bandlücke liegen, und die beim Eindringen in das Porengitter aus dessen Periodizitätsebene etwas herausgestreut werden, erscheint das Gitter transparenter, so daß sie sich mit geringeren Verlusten durch die dünnen aber hohen Strukturen ausbreiten können. Ein Teil dieser *out-of-plane* Anteile wird von der Optik des Fourier-Spektrometers eingesammelt und erreicht den Detektor, trägt also somit zu einem Untergrundanteil innerhalb der Bandlücke bei. Direkt an den Bandkanten treten diese Streuanteile nicht so deutlich auf, da der Brechungsindex aufgrund der verringerten Phasengeschwindigkeit hier effektiv überhöht ist. Für Frequenzen an den Bandkanten ist das System folglich unempfindlicher gegen diese *out-of-plane* Streuanteile.

#### 5.1.2. Einfluß von dünnen Siliziumdioxidschichten

Insbesondere im Fall von Transmissionsmessungen unter E-Polarisation zeigte sich, daß Proben einige Monate nach ihrer Herstellung ein deutlich besseres Signal lieferten, als frisch hergestellte. Das Signal war in der Gesamtintensität um ca. einen Faktor 2 größer, während kurzwellig der Bandlücke die Signalverbesserung fast eine Größenordnung betrug und gleichzeitig die Rauschamplitude sich etwas verringerte. Dies ließ den Schluß zu, daß sich das gebildete natürliche Oxid (typischer Weise 1,5-2,0 nm) sehr positiv auf die Messung von im Frequenzraum ausgewogenen Spektren auswirkt, und zwar weniger für die Moden des Valenzbandes, welche im wesentlichen im Dielektrikum verlaufen, als für die Moden des Leitungsbandes, die Ihre Feldstärkeknoten überwiegend im Dielektrikum haben. Es wurde eine Reihe von Oxiddicken untersucht und festgestellt, daß sich bis zu einer Dicke von ca. 10 nm eine deutliche Signalverbesserung einstellt. Um den Einfluß der Siliziumdioxidschicht, welche in den Rechnungen bislang nicht berücksichtigt wird, mit ihrem relativ zu Silizium deutlich geringeren Brechungsindex (vgl. Tab. 2.5), so klein als möglich zu halten, wurde bei den Charakterisierungen entweder mit natürlicher Oxidbedeckung meist aber mit 10 nm thermischem Oxid gearbeitet.

In Abb. 5.3 sind Messungen an einer für 2h 10' bei 800°C an Luft getemperten (entspricht 10 nm SiO<sub>2</sub>, lt. [71]) Probe mit einer, bis auf das fehlende Oxid, nahezu baugleichen Probe gezeigt. Das Fehlen des kurzwelligen Teils des Spektrums und das gleichzeitige Auftreten des starken Rauschens legen den Schluß nahe, daß bei E-Polarisation dominante Streueffekte in Erscheinung treten, die das Licht geradezu diffus aus der Periodizitätsebene herausstreuen. Als mögliche Ursache können



**Abbildung 5.3.:** Gegenüberstellungen von Transmissionsmessungen für H- (links) und E-polarisiertes Licht (rechts) an einer frisch hergestellten, d. h. oxidfreien, Probe und einer baugleichen, deren Oberflächen mit einem 10 nm dicken thermischen Oxid bedeckt waren. Die Dynamik der Si-O-Absorptionsbanden bei 1075 cm<sup>-1</sup> (sog. Einteilchenmode der Si-O-Si Streckschwindung [33]) und 1200 cm<sup>-1</sup> kann man als Kennzeichen für die integrale Oxiddicke in Durchstrahlrichtung verwenden.



Abbildung 5.4.: Abschirmströme an der Oberfläche eines Makroporenkristalls [35].

Oberflächenrauhigkeiten angenommen werden, die sich im Fall von E-Polarisation viel deutlicher bemerkbar machen als für H-Polarisation. Dies könnte auf Abschirmströme zurückzuführen sein, die im Falle von E-Pol. entlang der Porenoberflächen in axialer Richtung fließen und dadurch die Oberflächenbeschaffenheit zu spüren bekommen [35]. Durch Aufoxidation der Oberfläche wird sowohl ein Glättungseffekt herbeigeführt, als auch den Abschirmströmen eine elektronisch viel bessere Grenzfläche angeboten. Gleichzeitig ist durch die Oxidation ein leichter Glättungseffekt, und damit eine Verringerung von Streueffekten zu erwarten. Diese Interpretation deckt sich mit dem Verlauf der Spektren in Abb. 5.3. Für H-Polarisation sind nur für Frequenzen oberhalb der Bandlücke deutliche Signalverbesserungen gefunden worden. Es ist deshalb anzunehmen, daß das SiO<sub>2</sub> nicht der Funktion der Brechungsindexanpassung zwischen Luft und Silizum dient. Zudem müßte hierfür die Oxiddicke gegen  $\lambda/(4n_{SiO_2})$  gehen, beträgt aber nur ca. 1% dieses Wertes, so daß diese Wirkung unwahrscheinlich ist.

Um dies zu überprüfen, kann man mittels der Fresnelschen Formeln [34] die Reflektivität einer Silizium-Oberfläche R<sub>Si</sub> mit der einer mit einer dünnen SiO<sub>2</sub>-Schicht bedeckten Silizium-Oberfläche R<sub>Oxid-Si</sub> vergleichen. Wir betrachten also zuerst den senkrechten Durchtritt durch die Grenzfläche Luft/Si und vergleichen diesen mit dem senkrechten Durchtritt durch die beiden Grenzflächen Luft/SiO<sub>2</sub> und SiO<sub>2</sub>/Si:

$$R_{\rm Si} = \frac{(n_{\rm Luft} - n_{Si})^2}{(n_{\rm Luft} + n_{Si})^2} = 0,300888157, \qquad n_{\rm Luft} = 1, n_{\rm Si} = 3,43, \tag{5.2}$$

$$R_{\text{Oxid-Si}} = \frac{n_{\text{SiO}_2}^2 (n_{\text{Luft}} - n_{\text{Si}})^2 \cos^2(k_0 h) + (n_{\text{Luft}} n_{\text{Si}} - n_{\text{SiO}_2})^2 \sin^2(k_0 h)}{n_{\text{SiO}_2}^2 (n_{\text{Luft}} + n_{\text{Si}})^2 \cos^2(k_0 h) + (n_{\text{Luft}} n_{\text{Si}} + n_{\text{SiO}_2})^2 \sin^2(k_0 h)} = 0.300883261$$
(5.4)

$$= 0,300883261 \tag{5.4}$$

Dabei wird die Phasenverschiebung beim Durchlaufen der dünnen SiO<sub>2</sub>-Schicht durch  $k_0h$  :=  $2k_0 n_{\text{SiO}_2} d\cos\theta$ ,  $k_0 = 2\pi/\lambda_0$  bestimmt. Die weiteren Parameter sind:  $n_{\text{SiO}_2} = 1.4$ ,  $\lambda_0 = 5.0 \ \mu\text{m}$ , d = 10 nm und  $\theta = 0$  (Zwischenwinkel zwischen Einfallwinkel und Oberflächennormale) [34]. Die Absenkung der Reflektivität der Si-Schicht durch die aufgebrachte, dünne SiO<sub>2</sub>-Schicht liegt bei ca.  $4,90 \times 10^{-6}$ , so daß erst bei einer Gesamtzahl von ca. 618 durchstrahlten Kristallreihen das Transmissionssignal um 1% ansteigt, wenn die Struktur mit 10 nm SiO<sub>2</sub> bedeckt ist. Bei den in dieser Arbeit untersuchten Strukturen liegt die Zahl der Kristallreihen bei ca. 10-30, so daß die Hypothese, die drastische Signalverbesserung in Abb. 5.3 basiere auf Indexanpassung, hiermit widerlegt ist.

#### 5.1.3. Bestimmung der Bandkanten im Experiment



Abbildung 5.5.: Bestimmung der Lage der Bandkante durch den Vergleich einer Bandstrukturrechnung und einer zugehörigen Transmissionsrechnung. Die Bandkante wird hiermit als diejenige Frequenz definiert, bei der das Transmissionssignal sich im Mittel um 3 dB gegenüber dem Signal an den Bandkanten abgesenkt hat.

Für die Auswertung der spektralen Lage der Photonischen Bandkanten in einer Transmissionsmessung soll nun eine empirische Methode aufgezeigt werden (Abb. 5.5). Es wird dazu eine zweidimensionale Bandstrukturrechnung mit der zugehörigen Transmissionsmessung überlagert und verglichen. Daraus ersieht man, daß die Bandkanten im Mittel bei einem Signal liegen, das um 3 dB im Vergleich zum Signal am Maximum der zugehörigen Transmissionsbande reduziert ist. Demzufolge wird dieser 3 dB-Punkt für die Auswertung der nachfolgenden Transmissionsspektren verwendet.

#### 5.1.4. Erstellung einer Gap map

Aufgrund der offensichtlich starken Veränderung der Zustandsbänder bei Erhöhung der Porösität der Strukturen in Abb. 5.6 soll in den folgenden Abschnitten der Einfluß des Füllkoeffizienten auf die Spektren Photonischer Kristalle systematisch untersucht werden. Spektroskopiert man für die vier Kombinationen der beiden Polarisationen und der beiden Kristallrichtungen die Verschiebung der Transmissionsbänder, so kann man eine Art Karte erstellen, in der die Bandlücken, für H- und E-Moden separat, über dem Füllkoeffizienten r/a aufgetragen sind. Diese Bandlücken erscheinen dann als geschlossene Flächen. Der Überlapp der Flächen für beide Moden ergibt die vollständigen Bandlücken. Eine Auftragung dieser Art nennt man gewöhnlich gap map [42, 80].



**Abbildung 5.6.:** Verschiebung der Bänder einer Photonischen Bandstruktur ( $\Gamma$  – K, H-Polarisation) bei Veränderung des Füllkoeffizienten r/a.

Für die Erstellung einer gap map basierend auf experimentellen Daten wurde für beide Kristallrichtungen,  $\Gamma - M$  und  $\Gamma - K$ , eine Reihe von Proben mit äquidistanten r/a-Werten von 0, 36 bis 0, 49

r/a	$k_{\rm gap, low}^{\rm H}$	$k_{ m gap,high}^{ m H}$	$k_{ m gap,low}^{ m E}$	$k_{\rm gap, low}^{\rm E}$
0,36	1398	2158		
0,368	1444	2260		
0,376	1518	2374		
0,384	1556	2509		
0,392	1558	2592		
0,40	1645	2643		
0,408	1602	2710	2328	2355
0,416	1599	2746	2349	2378
0,424	1674	2846	2404	2476
0,432	1704	2909	2420	2549
0,44	1727	3011	2494	2589
0,448	1773	3082	2562	2699
0,456	1830	3116	2702	3088
0,464	1846	3185	2626	3282
0,472	2045	3219	2829	3357
0,48	2215	3343	2818	3491
0,488	2227	3321	2841	3321

**Tabelle 5.1.:** Wellenzahlen der Bandkanten für H- und E-Polarisation bei einer Gitterkonstante  $a = 1,58 \ \mu \text{m}$ in  $\text{cm}^{-1}$ .

hergestellt<sup>2</sup>. Die Probenoberflächen waren mit ca. 10 nm dickem  $SiO_2$  überzogen, um ein möglichst gleichmäßiges Signal im betrachteten Spektralbereich zu bekommen (vgl. Abschn. 5.1.2).

In Abb. 5.7 ist die gap map eines zweidimensionalen Photonischen Kristalls aus makroporösem Silizium dargestellt, wobei die linke Ordinate in Einheiten von dimensionslosen Frequenzen  $\omega a/(2\pi c)$ skaliert, die je nach tatsächlicher Gitterkonstante a in dimensionsbehaftete Frequenzen umgerechnet werden können. Dies wurde auf der rechten Ordinate für  $a = 1,58 \ \mu m$  durchgeführt, um die entsprechenden Frequenzen der Struktur aus Abb. 3.7 bzw. Abb. 5.16 anzugeben.

Für Füllkoeffizienten von r/a < 0, 45 decken sich die berechneten und gemessenen Werte für die Bandkanten beider Polarisationen. Bei größeren r/a-Werten liegt die Valenzbandkante für H-Moden im Experiment etwas tiefer, gleichzeitig die Leitungsbandkante für E-Moden etwas höher als erwartet. Im letzteren Fall liegt die Ursache darin, daß die Leitungsbandkante für  $\Gamma - K$  aufgrund des nahezu im Rauschen untergehenden Signals nicht mehr eindeutig bestimmt werden konnte, so daß die Leitungsbandkante für die  $\Gamma - M$  -Richtung den angegebenen Meßwert dominierte. Für H-Moden findet sich für alle dargestellten r/a-Werte eine relativ große Bandlücke, deren Mittenfrequenz sich erwartungsgemäß mit steigendem r/a nahezu gleichmäßig zu höheren Frequenzen verschiebt. Bei ca. r/a = 0,43 wechselt die Krümmung der oberen Bandkante ihr Vorzeichen, der Verlauf verflacht zunehmend. Im Gegensatz dazu nimmt die Steigung der unteren Bandkante bei

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup>Füllkoeffizienten ab 0,5 führen dazu, daß die Zwischenwände benachbarter Poren durchbrochen werden, so daß man nicht mehr Luftzylinder in Silizium sondern isolierte Nadeln aus Silizium mit dreieckigem Querschnitt mit nach innen gewölbten Begrenzungen erhält. Solche Proben konnten mit der in Abb. 4.1 geschilderten Methode aufgrund fehlender mechanischer Stabilität nicht mehr für optische Untersuchungen präpariert werden.



Abbildung 5.7.: Gap map des betrachteten Photonischen Kristalls aus makroporösem Silizium. Die Energieachse ist sowohl in der in der Bandstrukturrechnung üblichen dimensionslosen Frequenz  $\omega^*$  (links) als auch in Wellenzahlen angegeben. Die Kreuze sind Meßwerte, die Linien entsprechen den Vorhersagen aus den Bandstrukturrechnungen. Die schraffierten Bereiche stellen die Bandlücken dar. Die vertikale, gestrichelte Linie markiert denjenigen r/a-Wert, bei dem die Theorie die größte, vollständige Bandlücke voraussagt. Diese liegt bei r/a = 0,478 und wurde experimentell zu r/a = 0,48 bestimmt. Die experimentell (theoretisch) evaluierte dimensionslose Mittenfrequenz dieser Bandlücke ist  $\omega^*_{exp} = 0,4863$  ( $\omega^*_{theor} = 0,4867$ ) (entspricht bei  $a = 1,58 \ \mu m$  einer Wellenlänge von  $\lambda = 3,25 \ \mu m$ ) bei einer relativen Breite von  $\Delta \omega^* / \omega^* = 17\%$  [79]. Diese Bandlücke erstreckt sich von  $\lambda = 2,99 \ \mu m$  bis  $\lambda = 3,55 \ \mu m$ .

 $r/a \approx 0,47$  drastisch zu, so daß die Bandlücke von H-Moden bei r/a = 0,5 schon fast kollabiert ist. Für E-Moden wurde auch in höheren Bändern eine Bandlücke bei dimensionslosen Frequenzen um r/a = 0,4 und  $0,38 \le r/a \le 0,42$  gefunden. Die niedrigste Bandlücke erscheint bei r/a = 0,4. Sie verbreitert sich gleichmäßig bei steigendem r/a und verschiebt sich ebenfalls zu höheren Frequenzen. Der Füllkoeffizient, der zu einer größtmöglichen vollständigen Bandlücke führt, ist durch den Schnittpunkt der beiden oberen Bandkanten für H- und E-Moden definiert. Er wurde experimentell zu r/a = 0,48 bestimmt. Die Bandstrukturrechnungen sagen einen Wert von r/a = 0,478voraus. Die in Abb. 5.7 gezeigten Theoriekurven wurden durch Bandstrukturrechnungen nach der im Theorieteil dieser Arbeit (vgl. Abschn. 2.5.1) vorgestellten Ebene-Wellen-Methode ermittelt. Die ermittelten Werte der Bandkanten sind in Tabelle 5.1 zusammengefaßt.

Trägt man Spektren unterschiedlicher Füllkoeffizienten gleichzeitig gegen r/a auf, so ergeben sich Darstellungen, aus denen sich bei gegebener Kristallrichtung und Polarisation sowohl der Verlauf des Bereiches fehlender Transmission als auch die relativen Intensitätsverhältnisse der transmittierenden Bereiche und das Verhalten der im nächsten Abschnitt näher erläuterten Fabry-Perotartigen Resonanzen unter variierendem Füllkoeffizienten ablesen lassen. Da bei dieser Probenserie präparationsbedingt die transmittierten Probenbereiche nicht immer gleich waren, wurden die Intensitäten benachbarter Spektren so angepaßt, daß eine möglichst gleichmäßige Verteilung der Intensitäten der einzelnen Spektren erreicht wurde. Dazu wurden die Intensitäten der einzelnen Spektren im Bereich von jeweils  $\pm 15\%$  normiert.



**Abbildung 5.8.:** Dreidimensionale Darstellung der Veränderung des Transmissionsverhaltens bei Variation des Füllparameters r/a. Messungen unter H-Polarisation in  $\Gamma$  – M-Richtung. Die Darstellung beginnt bei einer Frequenz von 1200 cm<sup>-1</sup>, so daß die starken Si-O Absorptionsbanden im Valenzband nicht dargestellt werden.

Bei Auftragung der Spektren für H-Polarisation und  $\Gamma$  – M-Richtung gegen r/a (Abb. 5.8) findet man ein Höhenrelief, das von zwei durchgehenden Tälern durchzogen wird. Die Bandkante des Valenzbandes beginnt in dieser Darstellung bei ca. 1300 cm<sup>-1</sup> und verschiebt sich bei wachsendem r/a anfangs nur sehr langsam zu höheren Frequenzen. Ab  $r/a \approx 0,45$  verschiebt sich diese Kante beschleunigt, während die Leitungsbandkante, welche bei ca. 2100 cm<sup>-1</sup> beginnt, sich in etwa gegenteilig verhält. Das Tal zwischen diesen beiden Kanten wird von der ersten Bandlücke gebildet. Zwischen ca. 2200 cm<sup>-1</sup> und 3200 cm<sup>-1</sup> erstreckt sich ein breites Transmissionsintervall, welches selbst aus zwei oder drei schmäleren Transmissionsbereichen aufgebaut ist, die sich mit Durchstimmung von r/a sowohl in ihrer Breite als auch in ihrer relativen Lage ändern. Diese Transmissionsbanden zeigen sich bei hohen r/a-Werten stark verbreitert im Vergleich zu r/a = 0, 36. Dadurch erhöht sich der Überlapp bei hohen Füllkoeffizienten, was noch dadurch verstärkt wird, daß die Maxima der Transmissionsbanden offenbar näher zusammenwandern. Die zweite Bandlücke beginnt zwischen ca. 3200 cm<sup>-1</sup> und 3800 cm<sup>-1</sup>. Kurzwellig grenzen Transmissionsbereiche an, die mit zunehmendem r/a schnell an Intensität verlieren. Der möglichen Ursache hierfür soll im Abschn. 5.1.6 weiter nachgegangen werden.



**Abbildung 5.9.:** Dreidimensionale Darstellung der Veränderung des Transmissionsverhaltens bei Variation des Füllparameters r/a. Messungen unter H-Polarisation in  $\Gamma$  – K-Richtung.

Betrachten wir nun die Spektren für die Kristallrichtung  $\Gamma - K$ , H-Polarisation (Abb. 5.9), so findet man ein ähnlich stark strukturiertes Relief, welches von der breiten Bandlücke dominiert ist, die ihre Ausläufer zwischen ca. 1500 cm<sup>-1</sup> und 2200 cm<sup>-1</sup> hat. Am linken Rand des Plots befindet sich wiederum das Valenzband. Rechts der Bandlücke grenzt ein Transmissionsbereich an, welcher weniger deutlich strukturiert erscheint, als für  $\Gamma$ -M. Wiederum findet man höhere Transmissionsbereiche, die bei ca. 4500 cm<sup>-1</sup> und 5500 cm<sup>-1</sup> beginnen. Diese sind jedoch bei Füllkoeffizienten um r/a = 0, 4bereits verschwunden.

In Abb. 5.10 sind die Spektren für E-Polarisation und  $\Gamma$  – M aufgetragen. Diese Spektren besitzen die charakteristische Eigenart, daß sie bei recht niedrigen Frequenzen bereits eine schmale Bandlücke



Abbildung 5.10.: Dreidimensionale Darstellung der Veränderung des Transmissionsverhaltens bei Variation des Füllparameters r/a. Messungen unter E-Polarisation in  $\Gamma$  – M-Richtung.

ausbilden (vgl. Abb. 2.10 und 5.2). Diese bildet sich zwischen ca. 1300 cm<sup>-1</sup> und 1400 cm<sup>-1</sup> aus, verschiebt sich bei Erhöhung von r/a nur geringfügig und verbreitert sich lediglich bei hohen r/a-Werten merklich. Diese Bandlücke zeigt jedoch keinen Überlapp mit den Bandlücken der Konstellationen in Abb. 5.8, 5.9 und 5.11, so daß dieser hinsichtlich der vollständigen Bandlücke in der gap map Darstellung von Abb. 5.7 keinerlei Bedeutung zukommt. Dies ist anders bei der Bandlücke, die bei ca. 2200 cm<sup>-1</sup> bis 2300 cm<sup>-1</sup> beginnt. Diese wird zu höheren Frequenzen von einem schmalen Transmissionsbereich begrenzt, der seine Ausläufer bei 2300 cm<sup>-1</sup> bis 2500 cm<sup>-1</sup> hat, sich jedoch mit wachsendem r/a verliert. Die Leitungsbandkante ist nur noch in logarithmischer Darstellung eindeutig abzulesen. Daran grenzt sich eine weitere Bandlücke an. Hochfrequent von ca. 3200 cm<sup>-1</sup> erkennt man mehrere streifenartige Bereiche, die sich wie unscheinbare Transmissionskämme durch das Relief ziehen.

Wechseln wir nochmals die Kristallrichtung zu  $\Gamma$  – K, so erkennt man die Bandlücke, die bei ca. 1600 cm<sup>-1</sup> bis 2000 cm<sup>-1</sup> ihre Ausläufer hat. Die höhreren Transmissionsbereiche sind nur für kleine r/a-Werte noch klar zu erkennen. Bei hohen Porösitäten und hohen Frequenzen geht die Transmission dieser Struktur gegen Null, obwohl in der Bandstruktur Moden vorhanden sind. Hierin bestätigt sich, daß makroporöses Silizium, das in der hier untersuchten Form aus Bereichen verbundener Dielektrika besteht, insbesondere für Licht in H-Polarisation "optisch leitend" ist, während



Abbildung 5.11.: Dreidimensionale Darstellung der Veränderung des Transmissionsverhaltens bei Variation des Füllparameters r/a. Messungen unter E-Polarisation in  $\Gamma$  – K-Richtung.

die E-polarisierten Moden insbesondere im Falle hoher Frequenzen, sehr effektiv unterdrückt werden, d. h. der Kristall wird "optisch nichtleitend" trotz vorhandener Zustandsbänder. Dies ist eine Eigenschaft, die bei Photonischen Kristallen verschiedenster Bauformen, welche aus mechanisch miteinander verbundenen "Photonischen Atomen" aufgebaut sind, beobachtet wurde [10].

#### 5.1.5. Auswertung der Fabry-Perot-Resonanzen

Wie bereits in Abschnitt 5.1.1 angedeutet, sind an den Bandkanten, vor allem bei Messung in H-Polarisation, leichte Signalüberhöhungen zu erkennen, die auf den ersten Blick äquidistant zu sein scheinen. Für das Zustandekommen solcher resonanten Überhöhungen ist eine sehr hohe Qualität der Photonischen Kristalle erforderlich. Aus diesem Grund wurden solche Strukturen bislang in der Literatur erst einmal an 2D Kristallen beobachtet [81].

Die gleichzeitige Verschiebung der Fabry-Perot-artigen Resonanzen und der Transmissionsbanden beim Durchfahren des Füllkoeffizienten läßt den Schluß zu, daß für die Interpretation des Verlaufes der transmittierenden Bereiche das Bild von Bloch-Wellen gültig ist. Demnach treten die überlagerten Resonanzen nur deshalb in Erscheinung, weil eine kleine, diskrete Anzahl von Einheitszellen  $11 \le N \le 13$  durchleuchtet wird. Nach dem Bild von Bloch-Wellen in einem periodischen Potential verschiebt sich die Phase von Bloch-Wellen um ka von Einheitszelle zu Einheitszelle. Um bei einer Transmissionsmessung an N Einheitszellen eine Resonanz zu sehen, muß bei einem Umlauf die Phase der Wellen sich um ein ganzzahliges Vielfaches von  $2\pi$  verschieben. Sei  $m \in \mathbb{N}_0^+$ , so gilt also

$$2Nka = 2m\pi \tag{5.5}$$

Wenn man also ein einzelnes Band durchfährt, findet man aufeinanderfolgende Transmissionsmaxima, die den Wellenvektorwerten

$$k_0 = 0, \ k_1 = \frac{\pi}{Na}, \ k_2 = 2\frac{\pi}{Na}, \ \dots, \ k_{N-1} = (N-1)\frac{\pi}{Na}, \ k_N = \frac{\pi}{a}$$
 (5.6)

zugeordnet werden können. Die zugehörigen Frequenzen ergeben sich aus

$$\nu_m = a/\lambda_m = \omega(k_m) \frac{a}{2\pi c},\tag{5.7}$$

wobei c die Lichtgeschwindigkeit ist. Nach dem letzten Transmissionsmaximum gilt  $k = \pi/a$ , womit das Band vollständig durchgefahren ist und sich entweder ein neues Band oder eine Bandlücke angrenzt. Diese Betrachtung gilt für die  $\Gamma - K$ -Richtung. In  $\Gamma - M$ -Richtung muß anstatt  $\pi/a$  der Faktor  $\frac{2\pi}{\sqrt{3}}a$  berücksichtigt werden.



Abbildung 5.12.: Signalüberhöhungen im Bereich um eine Leitungsbandkante bei einer Transmissionsmessung in H-Polarisation und  $\Gamma$  – M-Richtung (vgl. Abb. 5.1), nach Separation des Untergrundsignals. Der Abstand der Signalüberhöhungen verringert sich von  $\Delta k = 81 \text{ cm}^{-1}$  ( $\Delta \lambda = 0,058 \mu \text{m}$ ) im Leitungsband zu  $\Delta k = 48 \text{ cm}^{-1}$  ( $\Delta \lambda = 0,042 \mu \text{m}$ ) dicht an der Leitungsbandkante.

An die Leitungsbandkante für H-Pol. und  $\Gamma$  – M -Richtung (vgl. Abb. 5.1) wurde im Bereich zwischen 3320 cm<sup>-1</sup> und 3920 cm<sup>-1</sup> ein Polynom dritter Ordnung angefittet und dieses vom Signal abgezogen, um die Fabry-Perot-Resonanzen vom schrägen Untergrund der Bandkante zu separieren. Anschließend wurde der Nullpunkt der Abszisse in das absolute Minimum der erhaltenen Wellenlinie gelegt. An diese ließ sich nun eine Vielfach-Lorentzfunktion anfitten (vgl. Abb. 5.12). An der spektralen Position der Maxima dieser Vielfachfunktion kann man sehr zuverlässig die Resonanzfrequenzen ablesen, bei denen die Signalüberhöhungen tatsächlich liegen. Die daraus bestimmten Modenabstände verschieben sich von 0,058  $\mu$ m (im Leitungsband) bis hin zu 0,042  $\mu$ m (dicht an der Bandkante des Leitungsbandes).

Der Frequenzunterschied benachbarter Signalüberhöhungen ist gleich dem lokalen Modenabstand  $\Delta \nu$  der Fabry-Perot-Resonanzen. Folglich hängt der Frequenzunterschied sowohl von der Anzahl der Kristallreihen der durchstrahlten Schicht als auch vom Dispersionsverhalten ab. Um den Frequenzunterschied quantitativ zu erfassen, greifen wir Gl. 2.64 erneut auf und definieren *nd* als Resonatorlänge *L*:

$$\Delta \nu = \frac{c}{2nd} = \frac{c}{2L} \,. \tag{5.8}$$

Dabei ist c die Vakuumlichtgeschwindigkeit. Um eine einfache Abschätzung für  $\Delta \omega$  zu machen denke man sich bei einer Struktur des Füllkoeffizienten r/a entlang  $\Gamma$  – M-Richtung eine Linie, die mittig durch N Porenachsen im Abstand der Gitterkonstante a läuft. Die optische Ausdehnung L der Struktur entlang dieser Linie kann analog Gl. 5.1 bestimmt werden und der Modenabstand  $\Delta \omega$  in 0,01 cm<sup>-1</sup> ergibt sich aus

$$\Delta\omega = \frac{\Delta\nu}{c} = \frac{1}{2Na(1+n-2nr/a)}.$$
(5.9)

Für den Brechungsindex von Silizium gilt bei 4  $\mu$ m Wellenlänge: n=3,43 [37]. Die Zahl der Kristall-



**Abbildung 5.13.:** Signalüberhöhungen für  $\Gamma$  – M-Richtung, H-Polarisation im Leitungsband (rechts) im Vergleich zur zugehörigen photonischen Bandstruktur (links). Projeziert man die FP-Resonanzmaxima auf die Bandstruktur, so findet man Zustände, deren k-Werte äquidistant sind.

ebenen in  $\Gamma$ -M-Richtung liegt bei dem hier untersuchten Kristall bei N = 23. Für ein Füllverhältnis

von r/a = 0, 46 und  $a = 1, 58 \ \mu m$  ergibt sich entlang der oben angedachten Linie ein Modenabstand benachbarter FP-Resonanzen von  $\Delta \omega = 108 \ \mathrm{cm}^{-1}$ . Wenn man die Lage der Linie durch Parallelverschiebung leicht variiert, ergibt sich eine größere optische Ausdehnung, und damit ein geringerer Modenabstand, so daß der in Gl. 5.9 ermittelte Wert als obere Schranke für den Modenabstand dieser Struktur bei gegebenem Füllkoeffizienten r/a gelten kann. In etwaiger Übereinstimmung damit traten in der Messung Modenabstände bis zu 81 cm<sup>-1</sup> auf.

In Abb. 5.13 ist eine Transmissionsmessung, bei der die FP-Resonanzen besonders deutlich zu sehen sind, in den Vergleich zur Bandstrukturrechnung derselben Struktur gesetzt. Wenn man die Mittenfrequenzen der FP-Resonanzen im Bereich der Bandkante auf das zugehörige Zustandsband in der Bandstrukturrechnung projiziert, die dadurch ausgewählten Zustände markiert und die Beträge deren Wellenvektoren ermittelt, so findet man diese äquidistant vor. Diese Darstellung belegt den unmittelbaren Zusammenhang zwischen den in der Messung ermittelten Transmissionsbanden und den von der Theorie bereitgestellten Zustandsbändern. Gleichzeitig erkennt man den Einfluß der geometrisch bedingten Dispersion des Kristalls auf die Moden der aufgetretenen FP-Resonanzen. Aufgrund dieser Erkenntnis soll im nachfolgenden Abschnitt eine tiefergehende Identifizierung der Transmissionsbanden urd werden.

Die vorangegangene Interpretation des Modenabstandes im Sinne linearer Dispersion ist, wie man an den Bandstrukturdarstellungen unmittelbar sehen kann, nur mit großer Vorsicht zu gebrauchen. Für im Frequenzraum lokale Betrachtungen ist es aus Gründen der Anschaulichkeit sinnvoll und meist quantitativ aussagekräftig und vertretbar, diese lineare Näherung zu verwenden.

#### 5.1.6. Identifizierung der Transmissionsbanden

Um den Ursprung der verschiedenen Transmissionsbanden in den Relief-Plots von Abschn. 5.1.4 zu beleuchten, werden im folgenden drei Transmissionsmessungen für H-Polarisation und  $\Gamma$  – M-Richtung mit den Füllkoeffizienten a = 0,36, 0,424 und 0,472 ausgewählt und mit den zugehörigen Bandstrukturrechnungen verglichen. In Abb. 5.14 läßt sich ein klarer Zusammenhang zwischen den dominanten Transmissionsbereichen und Zustandsbändern der Bandstrukturrechnung erkennen. Die Bandlücken aus Rechnung und Messung stimmen sehr genau überein. Die Messungen enden bei ca. 700 cm<sup>-1</sup>, da hier die elektronische Bandlücke des verwendeten MCT-Detektors liegt. Die Si-O-Absorptionsbanden um 1000 – 1200 cm<sup>-1</sup> sind deutlich zu erkennen, ebenso die FP-Überhöhungen.

In Abb. 5.15 sind die Bandlücken und Transmissionsbanden der Abb. 5.8 im Vergleich zu Bandstrukturrechnungen zweier verschiedener r/a-Werte farbig kodiert. Auf diese Weise kann man den Zusammenhang zwischen Transmissionsbanden und Bändern in der Bandstruktur unmittelbar erkennen. Anzumerken ist, daß die Bänder hochfrequent von 4000 cm<sup>-1</sup> mit zunehmendem Füllkoeffizienten in ihrer Intensität nachlassen und etwas oberhalb r/a = 0,41 nicht mehr in Erscheinung treten. Dieses Verhalten wurde bislang nicht beobachtet. Zwar gibt es unter bestimmten



**Abbildung 5.14.:** Vergleich von Transmissionsmessungen und zugehörigen Bandstrukturen für Kristalle mit r/a = 0,36, 0,424, 0,472. Gleiche Bänder sind in derselben Farbe dargestellt.

Konstellationen Bänder, an die aus Symmetriegründen nicht gekoppelt werden kann, dies wurde jedoch bislang nicht in Abhängigkeit vom Füllkoeffizient betrachtet.

#### 5.1.7. Diskussion

Die in dieser Arbeit, aufgrund der hohen Perfektion der hergestellten Strukturen, diskutierten Fabry-Perot-artigen Resonanzen in Transmissionsmessungen an 2D Photonischen Kristallen konnten insbesondere unter folgenden Bedingungen gefunden werden:

- Transmissionsmessung in H-Polarisation
- Strukturen mit Siliziumdioxid-bedeckten Oberflächen

Da das Auftreten dieser Resonanzen den Schluß zuläßt, daß die Lichtausbreitung innerhalb des resonatorartigen Gebildes mit sehr geringen Verlusten erfolgt, folgt daraus, daß Photonische Kristalle dieser Bauart aufgrund Ihrer relativ geringen Streuverluste Anwendungspotential z. B. in Filterelementen haben.

Es wurden vergleichende Transmissionsmessungen an der Infrarot-beamline "LURE" des SIRLOIN-Synchrotrons in Orly/Paris angestellt. Durch die Verwendung der Infrarotstrahlung aus einem Wiggler des Elektronen-Synchrotrons erhält man eine hochgradig brilliante und breitbandige Strahlungsquelle für spektroskopische Untersuchungen, wobei die spektrale Auflösung wiederum durch ein FT-Spektrometer erzielt wird. Diese Vergleichsmessungen führten weder zu Verbesserungen hinsichtlich der Signalabschwächung innerhalb der Bandlücke noch zu Signalen bei Messungen


Abbildung 5.15.: Dreidimensionale Darstellung der Veränderung des Transmissionsverhaltens bei Variation des Füllparameters r/a. Messungen unter H-Polarisation in  $\Gamma$ -M Richtung. Die Bereiche der Bandlücken und auch die den Bändern der Bandstruktur zuordenbaren Transmissionsbanden sind farbig hervorgehoben.

an Proben mit integrierten Defektstrukturen. Deshalb erschien eine Verbesserung der gezielten Ankopplung an die Wellenleiterstrukturen z. B. durch Verwendung von durchstimmbaren Laserquellen<sup>3</sup> als unumgänglich.

## 5.1.8. Ausblick

Messung der Transmission ist eine naheliegende Charakterisierungsmethode. Viel aussagekräftiger sind Lebensdaueruntersuchungen an angeregten Zuständen von solchen Leuchtzentren sein, bei denen die Wellenlänge des bevorzugten, strahlenden Relaxationskanals mit der photonischen Bandlücke des

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup>Um die Ankopplung zu verbessern, käme prinzipiell auch die Verwendung von Glasfasern in Betracht. Die für den hier betrachteten Spektralbereich erhältlichen Fasern, z. B. aus Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, besitzen jedoch Faserdurchmesser, welche mit ca. 100 μm um etwa zwei Größenordnungen über dem der zu untersuchenden Wellenleiterstrukturen liegen.

Wirtsmaterials überlappt. In der Generation von 2D Kristallen aus makroporösem Silizium, welche derzeit vorbereitet wird, werden die Strukturen um einen Faktor 3 verkleinert. Damit wird die photonische Bandlücke ins Nahe Infrarot verschoben, wo aus einer großen Zahl interessanter organischer und anorganischer Leuchtzentren ausgewählt werden kann. Zudem wird man in der Lage sein, von den drei kommerziell interessanten "Telekommunikationsfenstern" die beiden langwellig gelegenen (bei 1,3  $\mu$ m und 1,55  $\mu$ m Wellenlänge) abzudecken. Dadurch steigt einerseits die Anwendungsrelevanz der Strukturen. Gleichzeitig wird sowohl auf Seiten der Laserquellen (hinsichtlich Durchstimmbarkeit, Auflösungsvermögen, Stabilität und Intensität) als auch auf Seiten der verfügbaren Detektoren (Empfindlichkeit) die Untersuchung erleichtert werden.

Auch die Untersuchung von gekoppelten Photon-Phonon-Zuständen (Polaritonen), deren optische Frequenzen in der Bandlücke liegen, kann ins Auge gefaßt werden.

## 5.2. Signalabschwächung bei Transmission weniger Kristallreihen

Photonische Bandstrukturrechnungen gehen gewöhnlich von unendlich ausgedehnten Kristallen aus. Im Gegensatz dazu interessiert man sich für möglichst kompakte Strukturen, wenn es um den Aufbau integrierter Wellenleiterstrukturen geht. Hier ist z. B. experimentell bislang nicht überprüft worden, wie dicht man Wellenleiterstrukturen setzen darf, so daß deren Moden sich gegenseitig gerade nicht beeinflussen, d. h. so daß bei zwei identischen Wellenleitern in geringem Abstand kein resonantes Tunneln auftritt. Zur Beantwortung dieser Frage soll in diesem Abschnitt eine Abschätzung gemacht werden.

#### 5.2.1. Probengeometrie

Durch das in Abschnitt 3.3 vorgestellte Mikrostrukturierungsverfahren können aus einem Feld von Poren bestimmte Bereiche herauspräpariert werden, wobei die geometrische Auflösung dieser Strukturierung (Pixelgröße) durch die Fläche der Einheitszelle  $A_{EZ}$  des zugrundeliegenden Gitters gegeben ist. Bei einem hexagonalen Gitter der Gitterkonstante a ist  $A_{EZ} = \sqrt{3}/2a^2$ , mit  $a = 1,5 \ \mu m$ wird  $A_{EZ} \approx 1,95 \ \mu m^2$ . Diese Technik ist geeignet, um einzelne Porenreihen (Abb. 5.16) oder sogar eine einzige Reihe herauszustrukturieren (vgl. Abb. 5.17). Dadurch erhält man ein bemerkenswertes Verfahren, um Strukturen mit hohem Aspektverhältnis aus Silizium herzustellen.

Es wurde eine Reihe von Proben mit diskret variierenden Anzahlen von Porenreihen für Transmissionsexperimente entlang  $\Gamma$  – K-Richtung des hexagonalen Gitters hergestellt, um die Dämpfung eines wenige Kristallreihen durchlaufenden Laserstrahles in Abhängigkeit von der Wellenlänge des Strahles und der Anzahl der Kristallreihen zu messen [82]. Für dieses Experiment wurden Proben mit ca. 1, 2, 3 und 4 Kristallreihen ausgewählt. Die Definition des Begriffes "Kristallreihe" wird aus Abb. 5.19 ersichtlich: Damit ist der Dickenbereich gemeint, der sich ergibt wenn man senkrecht zur



**Abbildung 5.16.:** Rasterelektronenmikroskop-Aufnahme von Kristallbereichen, die wenige Porenreihen breit sind. Diese wurden mittels Mikrostrukturierung hergestellt.



**Abbildung 5.17.:** Kristallbereich mit der Dicke einer einzigen Kristallreihe in Transmissionrichtung  $\Gamma$  – K. Diese Porenreihe ist, ähnlich einem Vorhang, zwischen zwei größeren Bereichen aus makroporösem Material aufgespannt. Die Höhe bzw. Länge des "Vorhangs" betragen 100  $\mu$ m bzw. 120  $\mu$ m. Die Dicke der Siliziumwände, aus denen die einzelnen Poren bestehen, liegt im Bereich von etwa 250 nm. Diese Struktur bleibt selbst dann noch mechanisch stabil, wenn man die Wanddicke auf deutlich unter 100 nm verringert.

Durchstrahlrichtung eine einzelne Porenreihe "herausschneidet". Unabhängig von der Orientierung im hexagonalen Gitter ( $\Gamma - M$  oder  $\Gamma - K$ ) haben die Kristallreihen zwar unterschiedliches Aussehen aber dieselbe Ausdehnung in Transmissionsrichtung.

Da herstellungsbedingt die Anzahl der Kristallreihen über die Ausdehnung des Laserspots von typisch 20  $\mu$ m nicht vollkommen konstant war, wurde ein gewichteter Mittelwert für die Zahl der Po-

renlagen bestimmt. Dabei wurde erstens die sich aus dieser Messung ergebende Information über die Signalabschwächung pro Porenreihe für die Gewichtung des Signalbeitrags an Probenstellen mit einer hinzukommenden oder einer wegfallenden Porenreihe herangezogen. Zweitens wurde das Gaußsche Intensitätsprofil des Laserstrahls berücksichtigt.

### 5.2.2. Messung der Signalabschwächung

Für Messungen an Proben einer Dicke von mehreren Kristallreihen mußte bereits mit hohen Dämpfungswerten für Frequenzen innerhalb der Bandlücke und damit mit verschwindend kleinen Signalintensitäten gerechnet werden. Da die Kristallreihen mit konstanter Anzahl von Porenreihen nur auf einer Länge von ca. 120  $\mu$ m vorlagen, war die Verwendung eines Laserstrahles, der mittig auf einem kleinen Bereich der Porenwand ausgerichtet werden konnte, sehr vorteilhaft.

Die Füllparameter r/a der Proben wurde so eingestellt, daß deren Bandlücke für H-Polarisation zu einem möglichst großen Teil vom Durchstimmbereich des DFG-Lasers abgedeckt wurde. Die Bandlücke erstreckte sich etwa von 3,1-5,5  $\mu$ m.



Abbildung 5.18.: Gemessene und errechnete Transmissionsintensität als Funktion der Wellenlänge innerhalb der H-Pol. Bandlücke eines Kristalls mit einer Dicke von wenigen Kristallreihen. Die gestrichelten Linien stellen das für 1, 2, 3 und 4 Kristallreihen errechnete Transmissionssignal dar. Die Punkte repräsentieren den Signalverlauf für unterschiedliche Anzahlen von Kristallreihen im Experiment:  $0, 89 \pm 0, 04(\blacksquare), 1, 8 \pm 0, 1(\bullet), 2, 9 \pm 0, 1(\bullet)$  und  $4, 2 \pm 0, 2(\triangledown)$ [82].

Die in Abb. 5.18 dargestellten Rechnungen wurden nach der Methode von Sakoda (vgl. Abschn. 2.5.2) durchgeführt. Diese Methode stellt eine Erweiterung der Bandstrukturrechnungen nach der Ebene-Wellen-Methode dar und ermöglicht es, das Transmissionsverhalten dünner Probenbereiche zu berechnen. Um die spektrale Breite des Meßpulses von ca. 150 nm zu berücksichtigen, wurden die gerechneten Spektren mit der entsprechenden Fensterfunktion gefaltet. Die nicht perfekt konstante Dicke der im Experiment untersuchten Probenbereiche wurden dadurch in der Rechnung berücksichtigt, daß über Spektren mit geringfügig variierender Anzahl an Kristallreihen gemittelt wurde. Die Übereinstimmung von Transmissionsrechnung und -messung ist durchwegs gut. Hinsichtlich der Lage der kurzwelligen Bandkante zeigt sich eine Abweichung, die darauf zurückgeführt werden kann, daß der Füllkoeffizient der gemessenen Struktur r/a nur bis auf eine Unsicherheit von  $\pm 0,005$  bestimmt werden konnte. Die langwellige Bandkante liegt rechts außerhalb des Spektrums. Im Bereich um 3,8  $\mu$ m Wellenlänge wurde die größte Signalabschwächung von ca. 10 dB/Kristallreihe gemessen.



#### 5.2.3. Diskussion

Abbildung 5.19.: Auftragung der Signalabschwächung innerhalb der Bandlücke gegen die Anzahl der Kristallreihen eines Photonischen Kristalls. Die eingezeichnete Gerade ist an die vier Meßwerte nach dem least square Verfahren angefittet. Aus der Steigung der Gerade kann man eine Signaldämpfung in der Größe von 10 dB/Kristallreihe entnehmen. Schematisch ist die Geometrie einer einzelnen Kristallreihe für Transmission entlang  $\Gamma$  – K-Richtung eingezeichnet.

In der Mitte der Bandlücke schwächt sich das transmittierte Signal pro Kristallreihe um etwa 10 dB, d. h. um eine Größenordnung, ab. Die Signalabschwächung um einen konstanten Faktor pro Kristallreihe ist typisch für ein evaneszentes, d. h. exponentiell abklingendes Feld. Bei nur vier Kristallreihen wurde eine maximale Signalunterdrückung von 40 dB in der Mitte der Photonischen Bandlücke gemessen (vgl. Abb. 5.18 und Abb. 5.19). Damit läßt sich ein Koeffizient  $\overline{\alpha^{PBG}}$  definieren, welcher die mittlere Signalunterdrückung für Frequenzen in der Mitte der Photonischen Bandlücke angibt:

$$I(l) = I_0 e^{-\overline{\alpha^{PBG}l}}.$$
(5.10)

$$\overline{\alpha^{PBG}} = 1,54 \times 10^4 \text{cm}^{-1} \stackrel{\circ}{=} 2,3/\text{a}.$$
 (5.11)

Der Dämpfungskoeffizient kann somit unabhängig von der genauen Wahl der Gitterkonstante *a* angegeben werden. Für  $a = 1,5 \,\mu\text{m}$  gilt, daß nach Durchlaufen der Distanz  $\overline{\alpha^{PBG}}^{-1} = 0,65 \times 10^{-4} \,\text{cm}$  die Intensität im Mittel um den Faktor 1/e abgefallen ist. Durch die Mittelungsschreibweise wird die Tatsache berücksichtigt, daß Photonische Kristalle auf einer Skala von *a* keine homogenen Medien sind.

Durch die endliche Ausdehnung der untersuchten Kristalle und dem damit einhergehenden Verlust der Translationssymmetrie geht die unmittelbare und uneingeschränkte Anwendbarkeit der Konzepte der Brillouin-Zone und Bandlücke verloren. Jedoch zeigen die Untersuchungen in Abb. 5.18, daß die grundlegenden Eigenschaften des unendlich ausgedehnten Kristalls erhalten bleiben. Dieses Experiment bestätigt, daß selbst kleine Volumina bzw. wenige Kristallreihen Photonischer Kristalle praktisch nutzbare Eigenschaften entfalten.

Übertragen auf die Fragestellung zu Beginn des Abschn. 5.2 kann man zunächst feststellen, daß diejenigen Frequenzen die einer einmodigen Ausbreitung entsprechen, zentral in eine Bandlücke gelegt werden können. Dies wurde beispielsweise in der FD-TD-Rechnung in Abb. 6.4 für eine bestimmte Wellenleitergeometrie vorausbestimmt und in der Messung in Abb. 6.5 bestätigt. Da die Lichtwellen in zwei nebeneinander laufenden Wellenleitern nicht direkt miteinander wechselwirken können, und wir hier den Fall ausschließen, daß sie dies durch nicht-lineare Effekte tun, können wir als grobe Abschätzung angeben, daß bei zwei parallel verlaufenden, baugleichen und 20  $\mu$ m ( $\emptyset$  des Laserspots) langen Wellenleiterabschnitten, die durch vier Kristallreihen voneinander getrennt sind, eine Signaltrennung von ca. 30 – 40 dB erwartet werden kann.

# 6. Wellenleiter in Photonischen Kristallen

Im vorhergehenden Kapitel wurde bislang nur auf die Eigenschaften von ungestörten Photonischen Kristallen eingegangen. Besonderes Anwendungspotential erlangen diese neuartigen Materialien, wenn man die Eigenschaften der Bandlücke eines Photonischen Kristalls durch den gezielten Einbau von Moden maßschneidert. Analog dem elektronischen Fall geschieht dies durch den Einbau von Defekten, insbesondere von Wellenleiterstrukturen.

Es wurden verschiedenartige Wellenleiterstrukturen in den Kristall integriert. Untersuchungen an geraden (abgewinkelten) Wellenleiterstrukturen werden in Abschn. 6.1 (6.2) gezeigt. Nach einer Diskussion der Messungen wird in Abschn. 6.4 auf weitere Wellenleiterstrukturen, die sich gut in ein hexagonales Raster einpassen lassen, eingegangen.

## 6.1. Gerade Wellenleiter

# 6.1.1. Voruntersuchung: Transmissionsmessung an benachbarten Wellenleitern

Da es zu den spektralen Eigenschaften der zu untersuchenden Wellenleiterstrukturen nur wenige theoretische Informationen [54, 55, 83] und in letzter Zeit einige Erkenntnisse über Mikrowellenexperimente an Strukturen mit meist  $1000 \times$  größerer Gitterkonstante gibt [20, 84], soll zunächst in einer Voruntersuchung geklärt werden, ob man mit dem verfügbaren Differenzfrequenz(DFG)-System ein eindeutiges Meßsignal bekommen kann, nachdem dies mit Fourier-Transform-Methoden sich nicht als möglich erwies. Dazu wird eine Probe verwendet, in der parallel ausgerichtete Wellenleiterstrukturen in bekannten seitlichen Abständen eingebaut sind. Die Wellenleiter sind in  $\Gamma$  – K-Richtung des hexagonalen Gitters eingebaut, da sich diese, im Gegensatz zur  $\Gamma$  – M-Richtung, für lineare Defektstrukturen anbietet. Infolge von Abschneidetoleranzen in der Mikrostrukturierungsmaske besitzen die Defektlinien leicht unterschiedliche Längen (vgl. Abb. 6.1). Der Längenunterschied benachbarter Wellenleiter liegt bei ca.  $\pm$  1–2 Gitterkonstanten. Um das Meßsignal eindeutig der Transmission durch einen Wellenleiter zuordnen zu können, wird diese Probe durch den fokussierten Laserstrahl des DFG-Aufbaus bewegt. Ziel ist es, Transmissionssignale zu detektieren, deren Mittenabstände sich mit den seitlichen Abständen der Wellenleiter im Kristall decken. Die Wellenlänge des DFG-Aufbaus wird so gewählt, daß sie etwa mittig in der Bandlücke des Kristalls liegt, so daß der umgebende Kristall das Licht des DFG-Lasers sperrt. Die Fokussierung auf die Wellenleitereintrittsfläche



Abbildung 6.1.: Veranschaulichung des Experiments zur Voruntersuchung. Im Vergleich zur Ausdehnung des Wellenleiters ist der fokussierte Laserstrahl etwa maßstabsgetreu abgebildet. Dabei soll explizit auf das Gaußsche Intensitätsprofil, sowohl parallel zur Vorschubrichtung als auch senkrecht zur Bildebene hingewiesen werden. Der tatsächliche seitliche Abstand der Wellenleiter ist etwa zehnmal so groß. Die empflindliche Fläche des Detektors ist, im Vergleich zum Wellenleiter ca.  $250 \times$  größer als gezeichnet.

ist bei diesen Untersuchungen sehr wichtig. Da sie nicht visuell überprüft werden kann, wurde eine indirekte Vorgehensweise gewählt. Die genaue Fokuslänge, d. h. der ideale Abstand der Wellenleitereintrittsfläche von der letzten Abbildungslinse, wurde dadurch ermittelt, daß der Laserstrahl durch eine kleine Lochblende (engl. pinhole) gefädelt wurde, deren Position sich sowohl in Richtung der, als auch senkrecht zur Strahlachse durch Mikrometerschrauben einjustieren ließ. Um den unsichtbaren Strahl auf eine der Defektstrukturen auszurichten, wurde bei allen Untersuchungen mit einem Cutter manuell ein ca. 100  $\mu m$  breiter und ebenso hoher Durchbruch im porösen Streifen zwischen zwei Verbreiterungsstellen im Abstand von ca. 500  $\mu$ m von den zu untersuchenden Strukturen angelegt. Die Entfernung dieses Durchbruchsbereichs von den zu untersuchenden Wellenleitern konnte so unter dem Lichtmikroskop ausgezählt werden (da durch die bekannte Gitterkonstante ein Maßstab in die Struktur eingebaut ist). Der Durchbruch der Probe ließ sich, bei bekannter Fokuslänge, nun zum Laserstrahl derart ausrichten, daß maximales Transmissionssignal detektiert werden konnte. Durch seitliches Verschieben in Richtung senkrecht zu den Porenachsen konnten die Kanten des Durchbruchsbereichs abgetastet werden und schließlich die bekannte seitliche Entfernung der künstlichen Durchbruchstelle zu den Defektstrukturen herangezogen werden, um den Strahl auf eine Wellenleitereintrittsfläche zu positionieren. Der seitliche Vortrieb wurde wiederum mittels einer feingängigen Mikrometerschraube realisiert und die Vortriebsposition aufgezeichnet.

Die beiden Signale in Abb. 6.2 wurden mittels Gauß-Funktionen angefittet. Der Mittenabstand der beiden Signale liegt bei 222  $\mu$ m und deckt sich sehr gut mit dem Abstand der Wellenleiter im Kristall. Dieser beträgt N = 85 Kristallreihen entlang  $\Gamma$  – M-Richtung, bei  $a = 1,5 \mu$ m also  $\sqrt{3}Na = 221 \mu$ m. Die Breite der Signale ist nicht durch die Breite des Wellenleiters dominiert, sondern durch den deutlich größeren Durchmesser des Laserfokus ( $\emptyset \approx 20 \mu$ m, 1/e-Wert). Die Intensität der beiden Signale weicht deutlich voneinander ab. Da sich einige der Wellenleiterstrukturen



Abbildung 6.2.: Transmissionssignal durch zwei gerade Wellenleiter leicht unterschiedlicher Länge. Die Probe wurde seitlich durch einen Laserstrahl mit feststehender Wellenlänge gemäß der Skizze in Abb. 6.1 geschoben.

aufgrund von Toleranzen in der Herstellung nicht ganz bis zur Mikrostrukturierungskante erstrecken, sondern von wenigen Poren gewissermaßen abgekapselt werden, entstand zunächst die Annahme, daß dies die Ursache für den deutlichen Signalunterschied (Faktor 4, gemessen an den Fitkurven) darstellt. Diese Hypothese bestätigte sich in einer mikroskopischen Untersuchung nicht, und wurde zudem nach der Bestimmung des Signalabschwächungskoeffizienten (vgl. Abschn. 5.2) pro Porenreihe verworfen. Demzufolge sind bei Frequenzen in der Mitte der Bandlücke durch Abschirmung mittels einer diskreten, kleinen Anzahl von M Poren nur Abschwächungen von ca.  $M \times 10$  dB, also ganze Größenordnungen zu erzielen. Es wurde gefolgert, daß die Signalabweichungen infolge der geringfügig unterschiedlichen Länge der Wellenleiter und der somit etwas gegeneinander verschobenen Modenstruktur zustande kommen. Dies deutet darauf hin, daß die Wellenleitermoden einen komplizierten spektralen Verlauf besitzen, der relativ große Schwankungen bei leichten Frequenzänderungen aufweisen kann.

#### 6.1.2. Transmissionsrechnung

Für die Berechnung des spektralen Transmissionsverhaltens mikrophotonischer Defektstrukturen als auch zum Studium der zeitlichen Entwicklung der Feldverteilungen  $\vec{H}(\vec{r},t) = \vec{H}((0,0,H(x,y)),t)^1$ der Defektmoden von z. B. Wellenleitern und Kavitäten hat sich die Methode der V-FDTD-Simulationen als zweckmäßig erwiesen (vgl. Abschn. 2.5.3). Abb. 6.3 veranschaulicht die prinzipielle Vorgehensweise im Falle der hier untersuchten linearen Defektstrukturen. Es werden ebene

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>Bei Kristallen, die im wesentlichen aus isolierten dielektrischen Bereichen bestehen, betrachtet man stattdessen das Feld der dielektischen Verschiebung  $\vec{D}(\vec{r},t) = \vec{D}((0,0,D(x,y)),t)$ .

Wellen, deren Front so breit gewählt wird, daß auf jeder Seite der Defektstruktur je drei Kristallreihen berücksichtigt werden, auf den Kristall zentrisch zum Defekt eingestrahlt. Da die Frequenz der Wellen in der Bandlücke liegt, werden diese entweder reflektiert oder koppeln an eine Mode des Wellenleiters, durchlaufen diesen um schließlich an den freien Raum zu koppeln und vom Detektor registriert zu werden. Die Ausdehnung des theoretisch betrachteten Kristalls beträgt in Transmissionsrichtung ( $\Gamma - K$ ) 18 Kristallreihen. Abb. 6.4 zeigt das gerechnete Transmissionsspektrum gemäß



Abbildung 6.3.: Schematische Darstellung der Transmissionsrechnung (links): Ebene Wellen koppeln an die Bloch-Moden des Kristalls bzw. an die vom Wellenleiter geführten Moden an. Nach Durchlaufen des Kristalls koppeln diese wieder an ebene Wellen des freien Raumes, welche vom Detektor registriert werden. Rechts ist eine rasterelektronenmikroskopische Aufnahme einer realen Struktur gezeigt. Solche Strukturen lagen mit unterschiedlichen Wellenleiterlängen vor, wie man am Verlauf der Mikrostrukturierung in Abb. 3.7 erahnen kann. Der im folgenden charakterisierte Wellenleiter hatte eine Länge von 21 Gitterkonstanten.

der Anordnung in Abb. 6.3. Die blauen Pfeile markieren die Bandkanten des Kristalls bei 0, 26 und  $0,44 \ \mu m$  (Gitterkonstante  $a = 1,5 \ \mu m$ ). Außerhalb der Bandlücke erscheint die Signalintensität, im Vergleich zur Intensität innerhalb der Bandlücke, relativ gering zu sein. Die Ursache dafür liegt in der geführten Ausbreitung der Wellenleitermoden, welche erst dicht vor dem Detektor an den freien Raum koppeln und sich dort in Form von Zylinderwellen ausbreiten. Für Frequenzen innerhalb der Bandlücke sperrt der Kristall naturgemäß, so daß das Signal gänzlich von den Moden der linearen Defektstruktur getragen werden muß. Die Dispersionsrelationen der vorhandenen Moden sind in Abb. 2.14 dargestellt. Aufgrund der geraden Symmetrie des linearen Defektes in Ausbreitungsrichtung kann eine Kopplung nur an die Moden gerader Symmetrie (rote Bänder in 2.14) stattfinden. Zunächst wird das Frequenzintervall der Bandlücke von einer größeren Zahl von Resonanzen ausgefüllt, die man sich als eine Art stehender Wellen zwischen den Wellenleiterbegrenzungsflächen veranschaulichen kann. Im Bereich der dimensionslosen Frequenzen  $0,3 \le \omega^* \le 0,4$  ist nur ein Zustandsband in Abb. 2.14 vorhanden. Der Wellenleiter ist hier monomodig. Die einzelnen Resonanzen können klar voneinander abgegrenzt werden. Für  $\omega^* < 0,3$  sind in Abb. 2.14 überwiegend zwei Bänder vorhanden, wobei das Band mit den offenen Quadraten auf eine Herstellungseigenart des Makroporösen Siliziums zurückgeführt werden kann. In diesem Bereich überlappen die Resonanzen der beiden Zustandsbänder, so daß die einzelnen Resonanzen im Spektrum kaum mehr erkannt werden können. Schließlich findet sich ein schmaler Frequenzbereich,  $0,407 < \omega^* < 0,418$ , der nahezu keine Transmission aufweist, da gemäß Abb. 2.14 keine passenden Moden vorhanden sind.



Abbildung 6.4.: Transmissionsrechnung an einer geraden Wellenleiterstruktur gemäß Abb. 6.3. Auf der Abszisse ist die dimensionslose Frequenz  $\omega^* = \omega a/2\pi c$  aufgetragen. Am oberen Rand des Plots befindet sich die entsprechende Wellenlängenskala für  $a = 1, 5 \mu m$ . Die Bandkanten des umgebenden Kristalls sind durch Pfeile markiert. Innerhalb der Bandlücke findet sich ein breites spektrales Intervall von ca.  $0, 3 < \omega^* < 0, 4$ , in dem monomodige Ausbreitung entlang des Wellenleiters stattfindet, d. h. es wird laut Bandstrukturrechnung in Abb. 2.14 für eine Frequenz nur jeweils eine Mode angeboten. Diese besitzt gerade Symmetrie (even mode). An die grünen Bänder in Abb. 2.14 findet keine Ankopplung statt. Für  $\omega^* < 0, 3$  sind mehrere Bänder vorhanden. Von besonderen Interesse ist, daß um  $\omega^* = 0, 41$  ein schmaler Frequenzbereich existiert, in dem es nur eine Mode ungerader Symmetrie gibt (Abb. 2.14), an die nicht gekoppelt werden kann. Dies drückt sich in der Rechnung in Form eines Stoppbandes aus.

Geht man nun davon aus, daß

- der Brechungsindex des Kristalls für Frequenzen in der Bandlücke durch den bulk-Wert von Silizium unter Berücksichtigung der Porösität approximiert werden kann,
- zunächst die Eigenmoden des H-polarisierten Feldes vollständig im Dielektrikum konzentriert sind, d. h. sich nicht durch die Luftbereiche ausbreiten,

so kann man aus der bekannten geometrischen Länge  $d = 18 \times a$  des Wellenleitermodells in Abb. 6.3 die Abstände der longitudinalen Moden,  $\Delta \omega_{\text{Modell}}^*$ , wie folgt abschätzen:

$$\Delta \omega_{\text{Modell}}^* = \frac{\Delta \nu a}{c} \stackrel{\text{GL.5.8}}{=} \frac{a}{2nd} = 0,0081 \doteq 12,35 \left[\frac{\text{peaks}}{0,1[\omega^*]}\right].$$
(6.1)

Nach dieser Abschätzung sind also in einem einmodigen Intervall von  $\omega^*$  der Breite 0, 1 insgesamt 12, 35 Fabry-Perot-artige Resonanzen zu erwarten. Aus der Transmissionsrechnung in Abb. 6.4 kann man im Intervall 0,  $3 < \omega^* < 0, 4$  etwa 15 solche Resonanzen abzählen. Um eine bessere Übereinstimmung zwischen den beiden Zahlen zu erreichen, ist es sinnvoll, die Bedingung zu lockern, daß die H-Moden vollständig im Dielektrikum konzentriert sein müssen. Wir bezeichnen die Abweichung der Anzahl der Resonanzen mit p = 12,35/15 und gehen also davon aus, daß die Eigenmoden einen etwas reduzierten Brechungsindex  $n_{\text{eff}}$  sehen,

$$n_{\rm eff} = n_{\rm Si} \cdot p = b \cdot n_{\rm Si} + (1 - b) n_{\rm Luft}; \quad b = \frac{n_{\rm Si} \cdot p - n_{\rm Luft}}{n_{\rm Si} - n_{\rm Luft}} = 0,75.$$
(6.2)

Dieser einfachen Abschätzung nach würde ein Anteil von ca. b = 75% der H-Moden sich im Dielektrikum konzentrieren.

#### 6.1.3. Transmissionsmessungen mit Differenzfrequenz-System

Der Justagevorgang für diese Messung verlief analog der Beschreibung in Abschn. 6.1.1. Der Füllkoeffizient der Probe, deren Transmissionsrechnung in Abb. 6.4 dargestellt ist, wich geringfügig von dem der hier untersuchten Probe nach oben ab, so daß Moden leicht zu höheren Frequenzen verschoben sein sollten. Der Durchstimmbereich war auf  $0, 36 < \omega^* < 0, 46$  begrenzt. Die linke Hälfte der Abb. 6.5 zeigt Fabry-Perot-artige Resonanzen, auf die bereits bei der Transmissionsrechnung detailliert eingegangen wurde. In der Transmissionsrechnung Abb. 6.4 erkennt man etwa acht resonante Überhöhungen im Frequenzbereich  $0, 36 < \omega^* < 0, 40$ , welcher im vorhergehenden Abschnitt als einmodiger Bereich identifiziert wurde. Diese Anzahl findet sich auch in der Messung wieder, wobei jedoch die Tendenz des Gesamtsignals in beiden Untersuchungen unterschiedlich ist. In der Messung steigt das Gesamtsignal in diesem Frequenzintervall zu höheren Frequenzen hin an, während es in der Rechnung stetig abnimmt. Dies wird noch näher zu untersuchen sein, da die Dispersion des Kristalls sich auf die Modenabstände auswirken könnte. Das vorhergesagte Stopp-Band findet sich zentrisch um  $\omega^* \approx 0, 42$  und auch ein Bereich mehrmodiger Transmission für  $\omega^* \approx 0, 43$  ist klar zu erkennen.

Da die Dimensionen der gemessenen Wellenleiterstruktur (geometrische Länge: d = 21a) bekannt sind, kann man den Modenabstand wiederum dazu benutzen, um eine Abschätzung zu machen, wie groß der Anteil der Wellenleitermode ist, der auf das Dielektrikum beschränkt ist. Es gilt nun für die Messung:

$$\Delta \omega_{\text{Messung}}^* = \frac{\Delta \nu a}{c} \stackrel{\text{Gl. 5.8}}{=} \frac{a}{2nd} = 0,0069 \stackrel{\circ}{=} 14,4 \left[\frac{\text{peaks}}{0,1[\omega^*]}\right]. \tag{6.3}$$

Die Zahl der FP-Resonanzen pro Intervallbreite  $\Delta \omega^* = 0, 1$  liegt also bei ca. 14, 4. In der Messung zählt man 17 FP-peaks. Damit ist p = 14, 4/17 und der Anteil *b* der H-Mode im Dielektrikum schrumpft auf

$$b = \frac{n_{\rm Si} \cdot p - n_{\rm Luft}}{n_{\rm Si} - n_{\rm Luft}} = 0,78.$$
(6.4)



Abbildung 6.5.: Transmissionsmessung an einer geraden Wellenleiterstruktur. Der gemessene Frequenzbereich deckt sich etwa mit der rechten Hälfte der Transmissionsrechnung in Abb. 6.4. Der monomodige Frequenzbereich (bis  $\omega^* = 0, 4$ ) ist durch die Fabry-Perot-artigen Resonanzen an den Wellenleiterendflächen gekennzeichnet. Um  $\omega^* = 0, 42$  befindet sich ein Stoppband, das laut Rechnung auf das Fehlen von Bändern gerader Symmetrie zurückzuführen ist. Um  $\omega^* = 0, 43$  schließlich beginnen Frequenzbereiche mehrmodiger Transmission. Der blaue Pfeil kennzeichnet die obere Bandkante des umgebenden Kristalls. Die untere Kante liegt bei  $\omega^* = 0, 26$ .

Dieser groben Abschätzung nach würde ein Anteil von ca. b = 78% der H-Moden sich im Dielektrikum konzentrieren. Die Werte von Gl. 6.2 und Gl. 6.4 liegen sehr gut im Einklang.

Desweiteren ist noch zu überprüfen, ob die Modenabstände in Abb. 6.5 über der Frequenz variieren. In Abb. 6.6 sind die Mittenfrequenzen der FP-Resonanzen aufgetragen. Es wurden die Resonanzen der Abb. 6.5 im Bereich  $0, 3 < \omega^* < 0, 4$  herangezogen. Die Meßwerte ließen sich durch eine Gerade anfitten. Damit sind die Modenabstände in diesem Frequenzintervall konstant. Diese Beobachtung ist konsistent mit dem Verlauf der Wellenleitermoden in Abb. 2.14. Darin zeigen die Wellenleitermoden im Frequenzbereich  $0, 295 < \omega^* < 0, 385$  einen linearen Verlauf, also zeigen die zugehörigen Moden lineare Dispersion.

## 6.2. Abgewinkelte Wellenleiter

### 6.2.1. Transmissionsrechnung und Feldverteilung

In abgewinkelten Wellenleitern ist das Kopplungsverbot an Moden ungerader Parität aufgehoben. Folglich können die ebenen Wellen, von außen kommend, jetzt prinzipiell an alle Wellenleitermoden



Abbildung 6.6.: Auftragung der Mittenfrequenzen der FP-Resonanzen aus Abb. 6.5.

in Abb. 2.14 koppeln [55]. Dies ist schematisch in Abb. 6.7 wiedergegeben. Die Ausdehnung des Kristalls in Transmissionsrichtung beträgt im Modell in Abb. 6.7, genauso wie im geraden Fall in Abb. 6.3, 18 Kristallreihen. Durch die doppelt abgewinkelte Struktur des Wellenleiters ist dessen Gesamtlänge jedoch um genau vier Gitterkonstanten länger. Deshalb ist zu erwarten, daß die Abstände der longitudinalen Moden nach dem FP-Modell um ca. 20% geringer sind.



Abbildung 6.7.: Schematische Darstellung der Transmissionsrechnung: Ebene Wellen koppeln an die Bloch-Moden des Kristalls bzw. an die vom geknickten Wellenleiter geführten Moden ungerader Symmetrie an. Nach Durchlaufen des Kristalls koppeln diese wieder an den freien Raum, um schließlich vom Detektor registriert zu werden. Der Kristall im Modell hat eine Ausdehnung von 18 Kristallreihen, während der eingebaute Wellenleiter 22 Kristallreihen lang ist. Rechts ist beispielhaft eine reale Struktur abgebildet, die eine Ausdehnung von 20 Kristallreihen besitzt.

In Abb. 6.8 zeigt die zugehörige Transmissionsrechnung, daß im Frequenzbereich  $0,32 < \omega^* < 0,35$  noch ansatzweise einmodige Wellenleitung stattfindet. Diese Beobachtung ist mit der Bandstrukturdarstellung in Abb. 2.14 im Einklang, da dort für diese Frequenzen nur ein Band sich zur Ankopplung anbietet. In den angrenzenden Bereichen überlappen meist Bänder von Moden gerader und ungerader Symmetrie. Ein hohes Transmissionssignal ist lediglich im Bereich um  $\omega = 0, 3$  zu erkennen. Hierzu findet sich in der Bandstruktur ein sehr flach verlaufendes Band mit Moden ungerader



Symmetrie, das zu einer hohen Zustandsdichte führt und an welches offenbar effizient angekoppelt werden kann.

Abbildung 6.8.: Transmissionsspektrum eines abgewinkelten Wellenleiters nach einer vector-finite-differencetime-domain(V-DFTD) Rechnung gemäß Skizze 6.7. Die Bandkanten des umgebenden Kristalls sind mit Pfeilen markiert. Es existiert ein schmaler, monomodiger Bereich bei  $0, 32 < \omega^* < 0, 35$ . Die Wellenlängenskala am oberen Rand der Darstellung gilt für  $a = 1, 5 \mu m$ .

Abb. 6.9 zeigt die Feldverteilung einer V-FDTD-Rechnung bei einer beliebigen Frequenz  $\omega$  innerhalb der Bandlücke des Kristalls zu einem bestimmten Zeitpunkt *t*. Da der numerische Rechenaufwand für eine solche Feldverteilung enorm hoch ist, wurde noch keine Optimierung der Frequenz durchgeführt. Trotzdem sind diese Koeffizienten bereits recht hoch. Nach einer Optimierung sollten die Transmissionskoeffizienten an den Wellenleiterknicken gegen Eins gehen.

Da die Moden ihre Energie nicht in den Kristall abstrahlen können, kann eine Verminderung der Transmissionskoeffizienten nur durch Reflexion an den Wellenleiterknicken auftreten<sup>2</sup>. Dies führt zu einer rücklaufenden Welle. Der Bereich zwischen den Wellenleiterknicken funktioniert wie ein Resonator sehr niedriger Güte [55]. Deshalb weist Abb. 6.9 für diesen Bereich auch etwas stärkere Feldstärkekontraste aus, d. h. an den Bäuchen der Moden im schräg verlaufenden Wellenleiterabschnitt liegen deutlich höhere Feldstärken vor, als in den horizontalen Armen.

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup>Die Reflexionen an den Wellenleiterenden seien hier aus der Betrachtung ausgeschlossen, da es um die Wellenleitung innerhalb des Kristalls geht. Diese ist mit dessen abschirmenden Eigenschaften verknüpft.



Abbildung 6.9.: Gerechnete Feldverteilung von Moden, die von einer zweifach abgewinkelten Wellenleiterstruktur geführt werden. Analog der Skizze in Abb. 6.7 treffen von links ebene Wellen (z. B. Fokuspunkt eines Laserstrahls) auf die Wellenleitereintrittsfläche. Nach dem Knick wirkt die Intensitätsverteilung nahezu unverändert, da der Transmissionskoeffizient für die Wellenleitung um den Knick gegen Eins geht. Durch die vertikale (senkrecht zur Papierebene) Ausdehnung des Kristalls, und damit auch der Wellenleitermoden, koppeln die Moden im Grunde an Zylinderwellen. Die Farbkodierung ist so gewählt, daß die Feldstärke von Rot über Gelb und Grün nach Blau abnimmt.

#### 6.2.2. Transmissionsmessungen mit Differenzfrequenz-System

Die Transmission eines abgewinkelten Wellenleiters im Vergleich zur Transmission eines geraden Wellenleiters ist in Abb. 6.10 gezeigt. Da der spektrale Fingerprint der Moden abgewinkelter Wellenleiter aufgrund zu geringen Meßsignals bislang nicht eindeutig identifiziert ist, ist der Vergleich, z. B. der Transmissionseffizienzen gerader und abgewinkelter Wellenleiter zunächst nicht sinnvoll. Abb. 6.10 zeigt bei Messungen an zwei verschiedenen Wellenleitern etwas unterschiedlicher Gesamtlänge Transmissions-Peaks um  $\omega^* \approx 0, 34$ . Die Form dieser Signale ist typisch für monomodige Ausbreitung [55]. Dies ist im Einklang mit der Betrachtung im vorhergehenden Abschnitt, wonach in diesem Bereich prinzipiell einmodige Wellenleiter a, eine leichte Doppelstruktur. Um  $\omega^* \approx 0, 33$ tauchen weitere, weit weniger intensive Signale auf. Im Falle des Wellenleiters a sind deren Maxima mit roten Pfeilen markiert. Diese liegen in etwa äquidistant, wie die Einfügung zeigt. Der mittlere Modenabstand dieser vier Signale beträgt  $\Delta \omega^* = 0,00589$ . Die Zahl der Gitterkonstanten, die ein doppelt abgewinkelter Wellenleiter lang sein muß, um diesen Modenabstand hervorzurufen, ist etwa

$$\frac{d}{a} = \frac{1}{2n\Delta\omega^*} = 24,7.$$
 (6.5)

In Abb. 6.7 kann man insgesamt 25 Gitterkonstanten abzählen. Dies ist zum einen eine erneute Bestätigung dafür, daß das FP-Modell sehr gut für die Interpretation der Wellenleitereigenschaften verwendet werden kann. Zudem wird unterstrichen, daß dieses Modell auch für nicht-lineare Wellenleiterstrukturen physikalisch sinnvoll sein kann.



Abbildung 6.10.: Transmissionsmessung an zwei doppelt-abgewinkelten Wellenleitern leicht unterschiedlicher Länge, im Vergleich zur Transmission eines geraden Wellenleiters. Die roten Pfeile deuten auf Transmissionsmaxima des Wellenleiters a, deren Mittenfrequenzen in der Einfügung nochmal über der Frequenz aufgetragen sind. Die Wellenlängenskala am oberen Rand der Grafik basiert auf einer Gitterkonstante von  $a = 1,5 \mu m$ .

## 6.3. Diskussion

Es konnte gezeigt werden, daß man mit durchstimmbaren Lasersystemen integrierte Wellenleiterstrukturen charakterisieren kann. Der Vergleich von Transmissionsrechnungen und -messungen an solchen Strukturen bestätigt, daß Eigenmoden mit monomodigem Charakter durch eine Kette von Punktdefekten im Translationsgitter in die Bandlücke des Kristalls gezielt eingebaut werden können. Desweiteren konnte aus den Modenabständen die Konzentration der Moden auf den Wellenleiter abgeschätzt werden. Transmissionsmessungen an abgewinkelten Wellenleitern legen den Schluß nahe, daß sich auch in diesen Wellen monomodig ausbreiten können.

Wellenleiterkrümmungen und -knicke sind sehr wichtige Elemente integrierter, optischer Wellenleiter, welche derzeit kommerziell meist in Form von Streifenwellenleitern ausgeführt werden. In diesen wird die Welle von einem hoch- $\varepsilon$  Wellenleiterkern geführt, der von Material mit etwas niedrigerem (oftmals nur im Bereich von 1%) Brechungsindex umgeben ist. Bei kompakt aufgebauten Wellenleiterstrukturen sind Krümmungen grundsätzlich eine Verlustquelle [63]. Zwar gibt es auch in integrierten Streifenwellenleitern Konzepte, um verlustfreie Wellenleiterknicke zu realisieren, dazu muß aber ein enormer technologischer Aufwand getrieben werden [63]. Hier bieten Wellenleiterstrukturen mit Knicken, die in Photonische Kristalle integriert sind, einen neuen Ansatzpunkt [55].

## 6.4. Ausblick

Analog zu Abb. 6.9 wurde an einem Strahlteiler eine V-FDTD Rechnung durchgeführt, welche in Abb. 6.11 dargestellt ist. Die ebenen Wellen koppeln wiederum von links kommend an die Struktur





Abbildung 6.11.: Gerechnete Feldverteilung der geführten Moden eines Strahlteilers. Analog Abb. 6.9 koppeln von links ebene Wellen an. Am Verzweigungspunkt tritt eine teilweise Reflektion der geführten Moden auf, so daß man den Bereich zwischen Ankoppelpunkt und Verzweigungspunkt als Resonator sehr kleiner Güte betrachten kann. Der nicht-reflektierte Teil wird auf die beiden Verzweigerarme aufgeteilt. Bei der in der Rechnung gewählten Einkoppelfrequenz liegt der Transmissionskoeffizient für die Knicke deutlich unter Eins, so daß nur ein geringer Teil der eingekoppelten Welle schließlich wieder an den freien Raum koppelt. Die Farbkodierung ist so gewählt, daß die Feldstärke von Rot über Gelb und Grün nach Blau abnimmt.

an. Im Eingangskanal ist ein deutlich höherer Feldstärkekontrast zu sehen, als in den beiden Ausgangskanälen. Dies liegt überwiegend daran, daß am Verzweigungspunkt eine teilweise Reflexion des nicht-angepaßten Signales auftritt. Die reflektierte Welle überlagert sich mit der einlaufenden Welle und führt so zu dem verstärkten Kontrast. Die Welle wird auch an den beiden Knien der Ausgangskanäle erneut teilweise reflektiert, so daß auch hiervon Wellen wieder in den Eingangskanal zurücklaufen. Nur ein geringer Teil der eingekoppelten Intensität wird an den beiden Enden der Ausgangskanäle an den freien Raum angekoppelt. Dieses Verhalten ist typisch für Frequenzen, die nicht auf ideale Transmission an den Wellenleiterknicken hin optimiert wurden. Es gibt Frequenzen, bei denen diese Reflexionen verschwindend klein werden.

Durch die hexagonale Symmetrie des Porengitters lassen sich eine große Zahl weiterer Wellenleiterstrukturen, z. B. Mach-Zehnder-Interferometer und auch Kombinationen von Wellenleiterstrukturen in den Kristall integrieren.

# 7. Mikrokavitäten in 2D Photonischen Kristallen

Da Mikrokavitäten in der Photonik von ganz zentralem Interesse sind [48], werden im folgenden Transmissionsmessungen vorgestellt, die an einer, in einen Photonischen Kristall integrierte, Resonatorstruktur mittels des in Abschnitt 4.2.3 beschriebenen Optisch-Parametrischen Oszillators durchgeführt wurden. Dabei soll zunächst auf die Erwartungen aus der theoretischen Modellierung und den daraus folgenden Anforderungen an das Resonatordesign eingegangen werden. Anschließend wird auf die Problematik dieser Struktur, insbesondere hinsichtlich der Modenkopplungen eingegangen und die Messung diskutiert.

## 7.1. Transmissionsrechnung



Abbildung 7.1.: Schematische Darstellung zur Transmissionsrechnung (links): Ebene Wellen koppeln an die Bloch-Moden des Kristalls bzw. an die Moden der Mikrokavität an. Nach Durchlaufen des Kristalls koppeln diese wieder an den freien Raum, und werden schließlich vom Detektor registriert. Rechts ist eine rasterelektronenmikroskopische Aufnahme einer nach den theoretischen Vorgaben realisierte Mikrokavität abgebildet. Der Punktdefekt ist beidseitig von den Wellenleitern durch je drei Poren isoliert. Der weiß umrahmte Bildausschnitt ist in Abb. 2.16 vergrößert abgebildet.

Transmissionsrechnungen an der in Abschn. 2.6.2.3 vorgestellten Mikrokavität ergaben, daß fünf Moden meist unterschiedlicher Symmetrie im Einzeldefekt existieren [55]. Da die Ankopplung an die Moden des Einzeldefektes durch die Moden der umgebenden Wellenleiter gewährleistet wird, beschränken uns diese Wellenleiter auf die Betrachtung von Resonatormoden gerader Symmetrie, da nur solche von geraden Wellenleitern geführt werden. Desweiteren können nur diejenigen Resonatormoden beobachtet werden, die mit ihrer Resonanzfrequenz in der Bandlücke zu liegen kommen. Dies wird von den beiden Quadrupolmoden erfüllt. Desweiteren ist es wichtig, daß für die Resonanzfrequenz des Punktdefektes eine Monomode in den beiden angrenzenden Wellenleitern, idealer Weise ein Modenmaximum, vorhanden ist. Diese Bedingung wird am besten im Frequenzbereich  $0, 32 < \omega^* < 0, 37$  erfüllt [55] (vgl. Abb. 6.4). Bei einem Füllkoeffizienten von r/a = 0, 41müßte die Resonanz sowohl mittig im monomodigen Bereich des Wellenleiters als auch mittig in der Bandlücke des Kristalls zu liegen kommen. Es sei hier daran erinnert, daß zur Erzielung einer hohen Güte durch einen Punktdefekt der Photonische Kristall flächig sperren muß, d. h. sowohl in der Transmissionsrichtung  $\Gamma - K$ , als auch in  $\Gamma - M$  bzw. Linearkombinationen der k-Einheitsvektoren in diese Richtungen.



**Abbildung 7.2.:** Transmissionsrechnung für eine in einen Photonischen Kristall eingebettete Mikrokavität samt Wellenleitern zur Ankopplung (vgl. Abb. 2.16). Die Bandkanten des umgebenden Kristalls sind durch Pfeile angegeben. Außerhalb der photonischen Bandlücke liegt das Transmissionssignal im Mittel bei ca. 20% der Intensität des einfallenden Strahles. In der Bandlücke befinden sich Resonatormoden bei den dimensionslosen Frequenzen  $\omega_1^* = 0, 28 (\lambda_1 \approx 5, 4 \,\mu\text{m})$  und  $\omega_2^* = 0, 35 (\lambda_2 \approx 4, 3 \,\mu\text{m})$ . Durch ihre Nähe zur langwelligen Bandkante hat die resonante Mode 1 theoretisch eine ca. 5× niedrigere Güte als die Mode 2 [55].

Die Lage der Quadrupolmoden in der Bandlücke wird aus der Rechnung, welche gemäß dem Schema in Abb. 7.1 durchgeführt wurde, in Abb. 7.2 ersichtlich. Die Mittenwellenlängen der Resonatormoden liegen demnach bei ca. 5,4  $\mu$ m und 4,3  $\mu$ m. Von besonderem Interesse ist dabei die Mode bei 4,3  $\mu$ m, da diese für beide Kristallrichtungen zentral in der Bandlücke zu liegen kommt. Außerhalb der Bandlücke steigt die Transmissionsintensität auf durchschnittlich 20% der Intensität des einfallenden Strahles. Die Intensitätsverluste aus der Reflexion an den Silizium-Luft-Grenzflächen im Falle senkrechten Einfalles führt nach Fresnel [34] zu einer Verminderung der transmittierten Intensität um den Faktor

$$T = \frac{4n_{\rm Si}n_{\rm Luft}}{(n_{\rm Si} + n_{\rm Luft})^2}, \quad \approx 0,70 \, (n_{\rm Si} = 3,43; n_{\rm Luft} = 1) \tag{7.1}$$

pro Oberfläche. In dieser einfachen Abschätzung ist die Porösität der Siliziumprobe nicht berücksichtigt, die sich in der Effektiv-Medium-Theorie nach Maxwell-Garnett<sup>1</sup> durch die Einführung der effektiven Dielektrizitätskonstante  $\varepsilon_{\text{eff}}$ ,

$$\varepsilon_{\text{eff}} = \sum_{i} f_i \varepsilon_i, \tag{7.2}$$

mit dem Volumenanteil  $f_i$  der Komponente mit dem Brechungsindex  $\varepsilon_i$ , ausdrücken würde. Da diese Theorie das Probenvolumen als homogenes Medium betrachtet, würden z. B. die Einflüsse des regelmäßigen Porengitters als vernachlässigbar betrachtet werden. Davon kann man in diesem Fall aber gerade nicht ausgehen, weshalb wir Gl. 7.1 so bestehen lassen, aber lediglich als Abschätzung betrachten.

Vergleicht man diese Abschätzung mit der errechneten Transmission außerhalb der Bandlücke, so sieht man, daß durch die beiden Oberflächen ca. 51% des eingestrahlten Signales für die Transmission verloren gehen. Im Falle einer integrierten Ankopplung mittels geeigneter Fasern oder der weitergehenden Verwendung der bereits vorhandenen Wellenleiter für den Signaltransfer außerhalb des Resonators entfielen diese Verlustanteile unmittelbar.

#### 7.1.1. Feldverteilung

Zur Bestimmung der Feldverteilung der Resonatormode bei  $\omega^* = 0,35$  in Abb. 7.2 wurde eine FD-TD Rechnung mit eben dieser Resonanzfrequenz gemäß dem Schema in Abb. 7.1 durchgeführt (s. Abb. 7.3). Die Darstellung erfolgt mit den errechneten Feldkontrasten. Da durch die theoretische Güte  $Q_{\text{theor}} \approx 900$  dieser Feldkontrast an der Mode des Punktdefektes etwa  $Q \times$  höher ist, als beispielsweise in den Wellenleitern oder in der Umgebung des Kristalls, ist fast ausschließlich die Resonatormode zu erkennen, während der relative Kontrast in der gesamten Umgebung gegen Null geht. Die Resonatormode besitzt die Feldverteilung einer Quadrupolmode. Dadurch, daß die Wellenleiter die Parität der transmittierten Mode vorgeben, kann nur eine Mode gerader Symmetrie<sup>2</sup> anschwingen. Das Anschwingen nur einer Mode ist auch dadurch gewährleistet, daß entlang der Transmissionsachse die beiden dem Punktdefekt nächstgelegenen Poren etwas von der Defektmitte weg verschoben wurden. Dadurch wird die Entartung der beiden Quadrupolmoden aufgehoben.

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>Nur gültig, wenn Wellenlänge und Absorptionslänge ≫ typische Teilchengröße, und wenn Abschirmung durch Oberflächenladungen nicht berücksichtigt werden muß [33].

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup>d. h. spiegelsymmetrischer Feldverteilung aus der Sicht einer Mittelsenkrechten auf die Resonatoranordnung durch den Punktdefekt.



Abbildung 7.3.: Berechnete Feldverteilung der Resonatoranordnung bei der dimensionslosen Frequenz  $\omega^* = 0,35$  in der Transmissionsrechnung von Abb. 7.2. Die Mode besitzt eindeutig die Signatur einer Quadrupolmode nach Abb. 2.19 und zusätzlich die geforderte gerade Symmetrie für eine effiziente Kopplung an die angrenzenden Wellenleiter. Deren Modenverteilung ist ebenfalls dargestellt. Ebenso wie die Feldverteilung im freien Raum, ist diese jedoch kaum zu erkennen, da ihr Feldstärkekontrast um etwa die Güte Q des Punktdefektes in der Mitte niedriger ist. Die Quadrupolmode besitzt in Richtung der Wellenleiter auch zwei Gitterkonstanten vom Punktdefekt entfernt noch signifikante Feldstärken, so daß ein Überlapp mit den Moden der Wellenleiter gegeben ist.

#### 7.1.2. Meßproblematik

Die Wurzel der Meßproblematik ist darin zu sehen, daß eine Kette von Moden paarweise zum Koppeln gebracht werden muß, um das gewünschte Transmissionssignal zu detektieren. Dabei ist bereits die Ankopplung an die Wellenleitermode (vgl. Kap. 6) trickreich, da die Justage auf die Wellenleitereintrittsfläche mit dem Auge nicht direkt überprüft werden kann, folglich meist eine indirekte Methode gewählt werden muß. Es existieren breite Frequenzbereiche, in denen keine Resonatormode vorhanden ist. Vorhandene Resonatormoden müssen möglichst effizient an die Moden der Wellenleiter koppeln, damit die Resonatormoden prinzipiell meßbar werden. Desweiteren ist es, wie bereits angedeutet, für die Untersuchung von Vorteil, wenn die Resonanz sich möglichst mittig in der Bandlücke befindet. Dies ist in der Transmissionsrechnung Abb. 7.2 nur für die Resonanz bei  $\lambda = 4.3 \ \mu m$ erfüllt. Da der Durchstimmbereich des cw-OPOs langwellig bei ca. 4,0  $\mu$ m Wellenlänge endet, wird ein Satz mit Proben eines etwas größeren Füllkoeffizienten im Bereich von 0, 42 < r/a < 0, 45 zur Untersuchung verwendet. Im Vergleich zur Rechnung in Abb. 7.2 sind dadurch sowohl die Bandkanten, als auch die monomodigen Wellenleitermoden ins Blaue verschoben. Für die Donator-artige Defektmode bedeutet eine Erhöhung des Füllkoeffizienten eine Verschiebung ihrer Resonanzfrequenz zu höheren Werten (vgl. 2.18), so daß man erwarten kann, daß die Quadrupolmode aus Abb. 7.2 in den Durchstimmbereich des OPOs wandert.

Schließlich ist der bei der hier verwendeten Meßgeometrie erzielbare Signalhub auch durch das Flächenverhältnis von Wellenleitereintrittsfläche zur insgesamt durch den fokussierten Laserstrahl beleuchteter Fläche begrenzt. Dieses Flächenverhältnis wird auf ca. 1:10-15 geschätzt. Aufgrund der sehr guten Signalunterdrückung für Frequenzen innerhalb der Bandlücke um 10 dB/Kristallreihe (vgl.

Abschn. 5.2) wird diese Art der Untersuchung von Mikrokavitäten durch Ankopplung eines freien Laserstrahles erst ermöglicht. Ein ganz zentraler Gesichtspunkt ist die Unterdrückung verschiedener Lecklichtquellen (vgl. Abschn. 4.1).

# 7.2. Transmissionsmessung mit Optisch-Parametrischem Oszillator

Abb. 7.4 zeigt schematisch einen mehrachsigen Verschiebetisch, auf dem die Mikrokavitätenprobe für die OPO-Untersuchung gehaltert wird. Da der Durchstimmbereich des OPOs langwellig bei ca. 4  $\mu$ m



**Abbildung 7.4.:** Detaillierte Darstellung der Probenhalterung bei der OPO-Messung (vgl. Abb. 4.4) [85, 86]. Der Bleiselenid-Detektor wird auf den Idler-Strahl einjustiert, bevor die Probe mit einem xyz-Verschiebetisch in den Strahlengang gefahren wird.

endet, und daher nicht ausreichend ist, um den gesamten Bereich der Bandlücke für H-Polarisation und Transmission entlang  $\Gamma$  – K-Richtung zu untersuchen, wurde von einer mit dem OPO zu charakterisierenden Probe zunächst die Bandlücke im FT-IR-Spektrometer vermessen.

Abb. 7.5 zeigt das FT-IR-Spektrum einer Mikrokavitätenprobe mit einer Gitterkonstante von 1,5  $\mu$ m bei Untersuchung in  $\Gamma$  – K-Richtung und H-Polarisation. Die Bandlücke erstreckt sich gemäß der FT-IR-Messung von ca. 5,6-3,2  $\mu$ m und im FT-IR-Spektrum konnte auch bei Verwendung von Lock-In-Techniken zwecks Signalverbesserung keinerlei Modenstruktur innerhalb der Bandlücke gefunden werden. Bei Messung mit dem OPO zeigte sich kurzwellig von 4,0  $\mu$ m ein Signal, dessen Lorentz-Fit sein Maximum bei  $\lambda_c = 3,83 \ \mu$ m und eine Halbwertsbreite von  $\Delta \lambda_{\rm FWHM} = 200 \ nm$  besitzt. Die Güte dieser Lorentz-Funktion beträgt demnach

$$Q = \frac{\lambda_c}{\Delta \lambda_{\rm FWHM}} \approx 18 \tag{7.3}$$



Abbildung 7.5.: Vergleich von Transmissionsmessung mit Optisch-Parametrischem Oszillator (OPO) mit einer Transmissionsmessung mit dem Fourier-Transform-IR(FT-IR)-Spektrometer an der Probe "Niagara0" mit integrierter Mikrokavität. Bedingt durch den beschränkten Durchstimmbereich des OPOs dient eine Referenzmessung an derselben Probenstelle mit einem FT-IR-Spektrometer zur Einschätzung der Lage der gefundenen Resonanz in der Bandlücke. Die Güte der Resonanz bestimmt sich aus dem Verhältnis von Zentralwellenlänge und Halbwertsbreite zu  $Q \approx 18$ . Die beiden Meßkurven sind in keinem vergleichbaren Intensitätsverhältnis zueinander dargestellt [85].

Diese Messung wurde mehrfach reproduziert, wobei Q = 18 bislang nicht übertroffen wurde.

## 7.3. Diskussion

Vergleicht man die Messung an der Mikrokavitätenprobe mit dem errechneten Transmissionsspektrum (vgl. Abb. 7.6), so findet man, daß die Bandkanten des untersuchten Kristalls im Vergleich zu den Bandkanten, die der Rechnung zu entnehmen sind, wie beabsichtigt etwas kurzwellig verschoben liegen. Dabei sind die langwellig gelegenen Kanten mit  $\Delta \omega^* = 0,0077$  deutlich geringer gegeneinander verschoben, als die kurzwelligen ( $\Delta \omega^* = 0,0275$ ). Dieses Verhalten wurde bereits bei den Untersuchungen zu Abb. 5.7 angemerkt und drückt lediglich aus, daß in der Photonischen Bandstruktur das Valenzband für diesen Füllkoeffizienten deutlich flacher verläuft, als das photonische Leitungsband. Bei Betrachtung der Resonanzfrequenz findet man eine Blauverschiebung der OPO-Kurve, die mit  $\Delta \omega^* = 0,0471$  etwas größer ist, als die der kurzwelligen Bandkante mit  $\Delta \omega^* = 0,0275$ . Intuitiv wäre zu erwarten, daß die Resonanzfrequenz der Mikrokavität etwas empfindlicher auf Manipulationen des Füllkoeffizienten reagiert, als die Bandkanten des Kristalls selbst dies tun. Somit kann die Annahme aufrecht erhalten bleiben, daß es sich bei der mit dem OPO gemessenen Kurve um die gesuchte Resonanz der Quadrupolmode handelt. Betrachtet man Abb. 2.18, so sieht man, daß die Zustandsbänder der Donator-artigen Resonanzen für r/a = 0, d. h. für ideale Punktdefekte,



**Abbildung 7.6.:** Vergleich von Transmissionsmessung mit Optisch-Parametrischem Oszillator (rote Kurve) mit einer Transmissionsrechnung. Die Bandkanten beider Untersuchungen sind durch Pfeile markiert. Die zu untersuchende Probe besaß einen etwas größeren Füllfaktor, als dies laut Rechnung vorgesehen war, um die Resonatormode für den OPO sichtbar zu machen, d. h. in dessen Durchstimmbereich zu verschieben. Diese kurzwellige Verschiebung ist auch an den Verschiebungen der Bandkanten nachvollziehbar.

nahezu horizontal verlaufen. Bei einer leichten Variation von r/a ist also nicht mit einer drastischen Verschiebung der Resonanzfrequenz zu rechnen.

Der Unterschied von errechneter und gemessener Resonanzfrequenz in Abb. 7.6 beträgt  $\Delta \omega^* =$ 0,0471, und damit ca.  $1,7 \times$  bzw.  $6,1 \times$  so viel wie der Unterschied zwischen errechneter und gemessener kurzwelliger bzw. langwelliger Bandkante. Dies scheint im Widerspruch zu obiger Aussage zu stehen, daß die Resonanzfrequenz eines idealen Punktdefektes sich bei leichter Veränderung des Füllkoeffizienten r/a nur geringfügig verändert (vgl. Abb. 2.18). Durch die rasterelektronenmikroskopische Auswertung der tatsächlichen geometrischen Daten der Mikrokavität (vgl. Abb. 2.17) wurde festgestellt, daß die Verschiebung derjenigen Poren, die dem Punktdefekt am nächsten und in einer Linie mit den Wellenleitern liegen, von der Sollverschiebung  $\Delta R = \pm 0, 1 a$  infolge eines Fehlers im Design der Lithographiemaske abweicht und nur  $\Delta R = \pm 0,075~a$  beträgt. Dadurch kommt es zu einer deutlichen Verkleinerung des Defektvolumens. Beschränkt man sich auf die Verkleinerung der lateralen Ausdehnung des Silizium-Anteils des Punktdefektes in Richtung der Wellenleiter, so kann die Ausdehnung eines idealen Punktdefektes durch  $d_{cav} = 2(a - r) = 2a(1 - r/a)$  beschrieben werden. Unter den Voraussetzungen, daß r/a = 0, 42 und daß die Sollverschiebung von  $\Delta R = \pm 0, 1 a$ eingehalten würde, ergäbe sich eine Sollausdehnung des Punktdefektes von 1,36 a. Die tatsächliche Ausdehnung liegt aber lediglich bei 1,31 a, also ca. 3,8% niedriger. Dies wirkt sich etwa in demselben Maße in einer Erhöhung der Resonanzfrequenz aus, von einer rechnerischen Mittenfrequenz von  $\omega^* = 0,345$  hin zu  $\omega^* = 0,358$ . Somit sind ca. 30% des Unterschiedes der Resonanzfrequenz in Rechnung und Messung auf eine herstellungsbedingte Ursache zurückzuführen. Dabei wurde noch nicht berücksichtigt, daß die Durchmesser der Poren in unmittelbarer Nachbarschaft zum Punktdefekt leicht vergrößert sind, obige Abweichungen in  $\Delta R$  also tatsächlich noch größer sind.

Bislang wurde, ausgehend von den gerechneten Designdaten für die Mikrokavität auf die gemessenen Daten geschlossen bzw. diese interpretiert. Dies läßt sich umkehren, indem man mittels Rasterelektronenmikroskopie die tatsächlichen Strukturdaten ermittelt und auf Basis dieser eine erneute Transmissionsrechnung durchführt. Die Auswertung der Strukturdaten ist in Abb. 2.17 gezeigt. In dieser Abbildung sind die tatsächlichen Porendurchmesser am jeweiligen Porenort eingetragen. Eine Transmissionsrechnung auf Basis dieser Daten ist in Abb. 7.7 wiedergegeben. Darin zeigt sich, daß



Abbildung 7.7.: Transmissionrechnung für eine Mikrokavität der Geometrie in Abb. 2.17.

sich bei  $\omega^* = 0,392$  (entspricht  $\lambda = 3,83 \ \mu m$ ) eine resonante Mode befindet [87]. Zudem zeigt sich bei  $\omega^* = 0,291$  ( $\lambda = 5,15 \ \mu m$ ) wieder die Resonanz mit niedriger Güte. Beide Resonanzen liegen in der tatsächlichen Struktur also kurzwellig verschoben. Die gemessene Resonanz und auch deren Lage bei  $\lambda = 3,83$  ist somit bestätigt. Dabei wurden die evaluierten Strukturdaten direkt in eine Transmissionrechnung umgesetzt, d. h. es fanden keine Iterationsschritte statt, um möglichst gute Deckungsgleichheit von Theorie und Experiment zu erreichen.

Augenscheinlich ist, daß die Güten von gerechneter und gemessener Resonanz sich deutlich unterscheiden: Da bei der Rechnung keinerlei Verlustmechanismen, außer dem gewollten Verlust durch Modenkopplung von Punktdefekt und Wellenleitern, berücksichtigt wurden, ergab sich die Güte der Resonanz zu  $Q_{\text{theor}} \approx 900$ . In Abb. 7.6 liegt die errechnete Güte augenscheinlich deutlich unter diesem Wert und eher zwischen 150 und 200. Dies ist jedoch nur eine Folge der groben Rasterung der Frequenzwerte in der Rechnung, die dafür sorgt, daß der Maximalwert, der in der Nähe von Eins liegen sollte, nicht erfaßt wird. Die experimentell bestimmte Güte der Resonanz liegt bei Q = 18, so daß Verlustmechanismen vorhanden sein müssen. Als solche können in Erwägung gezogen werden

- Abstrahlung ins Grundsubstrat, auf dem die 100  $\mu$ m hohe Struktur sitzt,
- Streuverluste an Rauhigkeiten der Porenoberflächen
- Absorptionsverluste durch mögliche Verunreinigungen an den Oberflächen des Kristalls

Die Einfügung in Abb. 7.7 läßt erkennen, daß die resonante Mode einem etwas breiteren Signal überlagert zu sein scheint, welches selbst immer noch viel schmäler ist, als das der gemessen Resonanz. Die Ursachen hierfür gilt es in nachfolgenden Arbeiten näher zu studieren.

## 7.4. Ausblick



**Abbildung 7.8.:** Nahfeldmikroskopische (SNOM) Untersuchung des Punktdefektes eines zweidimensionalen Photonischen Kristalls. Einfang von Streulicht mit einer SNOM-Spitze mit dem Ziel, die Feldverteilung der Defektstruktur abzubilden [88].

In den vorangehenden Abschnitten wurden Messungen an Photonischen Kristallen mit und ohne Defekte gezeigt. Die Gitterkonstante dieser Kristalle lag bei ca. 1,5  $\mu$ m, so daß die Photonische Bandlücke etwa um 4,5  $\mu$ m Wellenlänge zu liegen kam. Durch eine Verkleinerung der Gitterkonstante auf 0,5  $\mu$ m kann man die Bandlücke um ca. 1,5  $\mu$ m Wellenlänge zentrieren, und damit in einem technologisch viel ergiebigeren und meßtechnisch deutlich besser erschlossenen Bereich Untersuchungen anstellen. So würden dann beispielsweise SNOM-Untersuchungen interessant, wie sie im Abb. 7.8 angedeutet sind. Darin sieht man die Spitze eines Nahfeldmikroskopes (*engl. scanning*  *near-field optical microscope*, SNOM) beim Abtasten der lokalen Verteilung des elektrischen Feldes eines in einen Photonischen Kristall eingebetteten Punktdefektes.

Um die Moden der Wellenleiterstrukturen vertikal einzuschränken, ist es denkbar, diese Strukturen auf einem SOI (*engl.* silicon on insulator)-Substrat zu realisieren. Auf solchen Substraten ist auf einem gewöhnlichen Silizium-Substrat eine dünne Schicht aus Siliziumdioxid und anschließend eine dünne Schicht aus Silizium aufgebracht, welche in diesem Fall ca. 1,0  $\mu$ m und 200-300 nm dick sein müßten.

# 8. Zusammenfassung

In dieser Arbeit wurde eine Reihe von Messungen gezeigt, die in dieser Form zum ersten Mal an Photonischen Kristallen durchgeführt werden konnten. Das liegt zum einen daran, daß mit dem System "Makroporöses Silizium" ein sehr vielseitiges, geometrisch hochgenaues und zudem technologisch sehr gut beherrschtes Herstellungsverfahren für 2D Photonische Kristalle zur Verfügung stand. Zum anderen hat aber auch die rasante Entwicklung von stabilen, durchstimmbaren IR-Lichtquellen, wie beispielsweise des einfachresonanten, pump-überhöhten Optisch-Parametrischen Oszillators, erst kürzlich ermöglicht, im sehr schwierigen Spektralbereich von  $3 - 5 \mu$ m Wellenlänge geometrische Strukturen mit Dimensionen an der Beugungsgrenze zu untersuchen.

Die Hauptzielsetzungen dieser Arbeit waren demzufolge

- erstens die Herstellung und Mikrostrukturierung von hexagonal gitterperiodisch angeordneten Makroporen in Silizium mit kleiner Gitterkonstante (a = 1, 5 μm),
- zweitens die infrarot-optische Charakterisierung der somit erhaltenen Strukturen hinsichtlich ihrer Eigenschaften als zweidimensionale Photonische Kristalle,
- und drittens die laserspektroskopische Untersuchung von in Photonische Kristalle integrierten Wellenleiterstrukturen und Mikroresonatoren.

Es wurde ein beleuchtungsgesteuertes, anodisch-elektrochemisches Ätzverfahren verwendet, das mit Hilfe einer photolithographischen Vorstrukturierungsmethode die Ausbildung von regelmäßig angeordneten Ätzkanälen mit großem Aspektverhältnis in Silizium ermöglichte. Damit konnten in einem 4-zölligen Siliziumsubstrat ca.  $3 \times 10^9$  Poren mit einem Durchmesser von knapp 1  $\mu$ m und einer Länge von 100  $\mu$ m bis hin zu 400  $\mu$ m erzeugt werden.

Da bei den Transmissionsuntersuchungen die Durchstrahlungsrichtung senkrecht zu den Porenachsen gewählt werden mußte, diente ein Mikrostrukturierungsverfahren dazu, schmale Streifen makroporösen Materials mit definierter Dicke aus den makroporösen Substraten herauszupräparieren. Dieses Verfahren basierte auf der selektiven Ätzung von Silizium relativ zu Siliziumdioxid durch ein reaktives Plasma aus Tetrafluorkohlenstoff und Sauerstoff. Mit diesem Verfahren konnten Streifen hergestellt werden, die aus einer diskreten Anzahl von Porenlagen (Kristallreihen), bis herab zu einer einzelnen Kristallreihe, bestanden. Mittels Fourier-Transform-Infrarot(FT-IR)-Spektroskopie wurden Messungen zur Transmission von Probenstreifen, bestehend aus einer definierten Anzahl von Kristallreihen, durchgeführt. Diese Messungen dienten z. B. dazu, die Unterdrückung des transmittierten Signals für Frequenzen innerhalb der Photonischen Bandlücke im Fall von FT-IR-Spektroskopie zu bestimmen. Die Signalunterdrückung lag auch bei sehr vielen Kristallreihen bei maximal 30 dB.

Es wurde die Abhängigkeit der Transmissionsspektren von der Porösität des Kristalls untersucht zur Identifizierung der vollständigen, d. h. richtungs- und polarisationsunabhängigen Photonischen Bandlücke. Dabei wurde gefunden, daß die Spektren von Kristallen, deren Oberflächen mit natürlichem SiO<sub>2</sub> bedeckt waren, integral ein ca.  $2 \times$  höheres Transmissionssignal aufweisen und insbesondere ein deutlich verbessertes Signal für höhere Zustandsbänder zeigen. Bei 10 nm dicker SiO<sub>2</sub>-Belegung lag die Signalverbesserung im Bereich  $2-5 \times$ . Dies wurde auf einen Glättungseffekt durch die Oxidation und auf eine halbleitende Grenzfläche mit verbesserten elektronischen Eigenschaften zurückgeführt. Um eine effektive Indexanpassung zu bewirken, sind die Oxidschichten (2 – 10 nm) zu dünn.

Um die Porösität der Kristalle zu quantifizieren, wurde der Füllkoeffizient r/a, das Verhältnis von Porenradius zu Gitterkonstante, eingeführt. In sehr guter Übereinstimmung mit theoretischen Berechnungen, die auf der Entwicklung der Moden des magnetischen Feldvektors nach ebenen Wellen beruhten, wurde für H-polarisierte Moden im gesamten untersuchten Bereich ( $0, 36 \le r/a \le 0, 488$ ) eine Photonische Bandlücke gefunden, während für E-Moden die Bandlücke auf  $0, 4 \le r/a \le 0, 488$ beschränkt war. In letzterem Bereich konnten folglich vollständige Bandlücken nachgewiesen werden. Die größte relative Breite der Photonischen Bandlücke wurde experimentell bei r/a = 0, 48 ermittelt. Der zugehörige theoretische Wert liegt mit r/a = 0, 478 nur unwesentlich darunter. Sowohl im Experiment als auch in der Bandstrukturrechnung lag bei diesen Füllkoeffizienten eine relative Breite der Bandlücke von 17,0% vor.

In den Transmissionsmessungen wurden an den Bandkanten Signalüberhöhungen gefunden, die durch Betrachtung nach dem Modell von Fabry-Perot-Resonanzen erklärt werden konnten, da der Abstand der Signalüberhöhungen mit der optischen Ausdehnung L der vermessenen Probenstreifen verknüpft ist. Bei den Signalüberhöhungen handelt es sich um benachbarte longitudinale Moden, die zwischen den Begrenzungsflächen des Kristalls eingespannt sind. Es wurde nachgewiesen, daß diese Signalüberhöhungen, im Gegensatz zu gewöhnlichen Fabry-Perot-Resonanzen, nicht äquidistant im Frequenzraum ( $\Delta \nu = c/2L$ ) sind, sondern mit Annäherung an eine der Bandkanten sich enger zusammenschieben. Dieses Verhalten beruht auf der Dispersion des Photonischen Kristalls, welche umso größer ist, je stärker die Krümmung des jeweiligen Zustandsbandes in der Bandstruktur ausfällt, da dann die Gruppengeschwindigkeit von Wellenpaketen,  $v_G = \partial \omega/\partial k$ , und die Phasengeschwindigkeiten  $v_P = \omega/k$  der Teilwellen am stärksten voneinander abweichen.

Die Transmissionsbanden in den Transmissionsmessungen konnten den ihnen entsprechenden Zustandsbändern zugeordnet werden.

Mittels eines gepulsten Differenzfrequenz-Lasersystems, das im Bereich zwischen 3–5  $\mu$ m durchstimmbar ist, wurde die Abschwächung eines Lichtstrahls, dessen Wellenlänge sich innerhalb der Photonischen Bandlücke befand, in Abhängigkeit von der Anzahl der durchlaufenen Porenreihen bestimmt. Dabei wurde eine Intensitätsabschwächung von 10 dB/Porenreihe ( $6,7 \times 10^3$  dB/mm) ermittelt.

Durch Nutzung der Möglichkeit, die Position der Porenätzkeime durch photolithographische Vordefinierung festzulegen, wurden verschiedene Arten von Wellenleiterstrukturen in den Kristall integriert. Zu diesen Strukturen zählen lineare und abgeknickte Wellenleiter, Verzweiger und Mikroresonatoren. Diese Strukturen konnten ebenfalls durch das oben erwähnte Mikrostrukturierungsverfahren für optische Charakterisierungen zugänglich gemacht werden.

Die Transmission einer linearen Wellenleiterstruktur konnte spektral aufgelöst innerhalb der Photonischen Bandlücke des umgebenden Kristalls bestimmt werden. Dabei zeigten sich, in guter Übereinstimmung mit Simulationsrechnungen, sowohl monomodige Frequenzbereiche, welche von Fabry-Perot-artigen Resonanzen dominiert wurden, als auch multimodige Frequenzbereiche. Im Transmissionsspektrum wurde ein Stoppband nachgewiesen, das durch paritätsbedingt verbotene Modenankopplung an ein Band in der Photonischen Bandstruktur erklärt werden konnte. An einem doppelt-abgeknickten Wellenleiter wurde in einem relativ kleinen Frequenzbereich ein Transmissionssignal gefunden.

Mittels eines einfachresonanten Dauerstrich-Optisch-Parametrischen Oszillators, der im Spektralbereich des Nahen und Mittleren Infrarot kontinuierlich durchstimmbar war, konnte die Transmission eines Einzeldefektes, der die Funktion eines Mikroresonators besitzt, vermessen werden. Dabei wurde die Resonatorgüte, die als Quotient von Mittenfrequenz und Halbwertsbreite der Resonanz definiert ist, zu  $Q^{\exp} = 18$  bestimmt. Die Abweichung zwischen gemessener Resonatorgüte und der dazugehörigen theoretischen Abschätzung  $Q^{\text{theor}} \approx 900$  wurde auf eine Reihe von Verlustmechanismen, wie der Streuung an Rauhigkeiten der Porenoberflächen und dem Intensitätsverlust durch Abstrahlung in das Grundsubstrat zurückgeführt.

Weiterführende Untersuchungen werden nützlich sein, um die Diskrepanz zwischen theoretisch vorhergesagter Güte und gemessener Güte besser zu verstehen und dadurch sowohl von der Seite der Probenherstellung als auch von der Seite der Meßtechnik weitere Optimierungen durchführen zu können. Jedoch sind die hier aufgezeigten Übereinstimmungen bereits sehr vielversprechend hinsichtlich einer weiterhin spannenden Entwicklung von Photonischen Kristallen in Makroporösem Silizium.

### A. Infiltration von Flüssigkristallen in Photonische Kristalle

Im nachfolgenden Experiment [89] wird versucht, den Einfluß der Temperatur auf die Orientierung von Flüssigkristallen auszunutzen, um die Bandstruktur eines mit einem Flüssigkristall infiltrierten Photonischen Kristall durch Temperatureinfluß zu verschieben. Der Flüssigkristall befindet sich bei Raumtemperatur in der sog. nematischen Phase und geht bei Erwärmung auf  $T = 60^{\circ}C$ in die isotrope Phase über. Dabei verringert sich der Brechungsindex des Flüssigkristalls aus Sicht des untersuchenden Laserstrahls, so daß insbesondere die kurzwellige Bandkante etwas nach höheren Frequenzen verschoben wird (vgl. Abb. .1).



**Abbildung .1.:** Verschiebung der Bandkante eines mit einem Flüssigkristall infiltrierten Kristalls beim Übergang von Raumtemperatur zu  $T = 60^{\circ}$ C. Die blaue Kurve zeigt die Bandlücke für H-Polarisation nach Infiltration des Flüssigkristalls und bei Raumtemperatur. Durch Erwärmung auf ca. 60°C gehen die Flüssigkristallmoleküle in eine isotrope Phase über. Die damit verbundene Veränderung des Brechungsindex führt zu einer Verschiebung der photonischen Leitungsbandkante ins Langwellige.

Vor der Infiltration erstreckte sich die Bandlücke für H-Polarisation von 3,3–5,7  $\mu$ m. Während durch die Infiltration die Bandlücke für E-Polarisation verschwand, verschob sie sich für H-Pol. in den Bereich 4,4–6,0  $\mu$ m Wellenlänge (vgl. Abb. .1, blaue Kurve). Durch Erwärmung der Probe von Raumtemperatur zum nematisch-isotropen Phasenübergang des Flüssigkristalls (E7) bei 59°C verschob sich die kurzwellige Kante der H-Bandlücke ("photonische Leitungsbandkante") um ca. 70 nm weiter ins langwellige, während die langwellige Bandkante nahezu unverändert blieb (vgl. Abb. .1, schwarze Kurve).

Um die Auswirkung des Phasenübergangs des infiltrierten Flüssigkristalls auf die Bandlücke zu untersuchen, berechnen wir die zugehörige Bandstruktur erst mit dem Flüssigkristall in der nematischen und schließlich in der isotropen Phase durch Entwicklung nach ebenen Wellen. Dabei gehen



Abbildung .2.: Errechnete (links) und gemessene Verschiebung der Leitungsbandkante bei Veränderung der Temperatur. Für die Rechnung wird eine uniaxiale Ausrichtung der Flüssigkristallmoleküle in Richtung der Porenachsen für Temperaturen deutlich unterhalb des Phasenübergangspunktes bei  $T \approx 59$  °C angenommen.

wir davon aus, daß bei Raumtemperatur der Direktor des Flüssigkristalls in Richtung der Porenachsen zeigt, d. h. eine uniaxiale Ausrichtung vorliegt. In Abb. .2 (links) ist die Verschiebung des photonischen Leitungsbandes mit der Temperatur aufgetragen und mit der zugehörigen Messung verglichen (rechts). Während die Rechnung eine Verschiebung um 118 nm vorhersagt, wurden im Experiment lediglich 70 nm gefunden. Der deutliche Unterschied zwischen diesen beiden Werten ist damit zu erklären, daß der Flüssigkristall nach der Infiltration nicht über den gesamten Porendurchmesser uniaxial in Richtung der Porenachsen ausgerichtet war. Vor allem im Bereich der Porenwände ist anzunehmen, daß die Flüssigkristalle sich homeotrop an den Wänden verankern. Geht man von einer



**Abbildung .3.:** Modellvorstellung für die Anordnung der Flüssigkristalle in den Poren: "Escaped-radial"-Anordnung bei Zimmertemperatur. Geht man von dieser Anordnung der Flüssigkristallmoleküle vor dem Phasenübergang in die isotrope Phase aus, so decken sich Vorhersage und Messung bzgl. der Verschiebung der Leitungsbandkante beim Phasenübergang.

Orientierungsverteilung für den Direktor der Flüssigkristallmoleküle aus, wie sie in Abb. .3 gezeigt ist, so fällt die Verschiebung der Leitungsbandkante beim Phasenübergang des Flüssigkristalls genau so groß aus, wie in Abb. .2 (rechts) gemessen wurde.

Diese Untersuchung legt den Schluß nahe, daß sich die in den Photonischen Kristall infiltrierten Flüssigkristallmoleküle je nach Position innerhalb der Pore eine andere Vorzugsrichtung aussuchen. Desweiteren ist sie die erste Untersuchung zur Durchstimmung der Bandlücke eines 2D Photonischen Kristalls mit Hilfe eines Flüssigkristalls [89].

# B. Umrechnungstabellen für Energieskalen und Wellenlängenskala

Gitterkonstante $a = 1,58 \ \mu m$					Gitter	<b>Gitterkonstante</b> $a = 1,50 \ \mu \text{m}$				
$\omega^*$	$k(\mathrm{cm}^{-1})$	$\lambda(\mu m)$	$\nu(\text{THz})$	E(meV)	$\omega^*$	$k(\mathrm{cm}^{-1})$	$\lambda(\mu m)$	$\nu(\text{THz})$	E(meV)	
0	0	$\infty$	0	0	0	0	$\infty$	0	0	
0,025	158,2	63,20	4,747	19,63	0,025	166,7	60,00	5,000	20,68	
0,050	316,5	31,60	9,494	39,26	0,050	333,3	30,00	10,00	41,36	
0,075	474,7	21,07	14,24	58,89	0,075	500,0	20,00	15,00	62,04	
0,100	632,9	15,80	18,99	78,53	0,100	666,7	15,00	20,00	82,71	
0,125	791,1	12,64	23,73	98,16	0,125	833,3	12,00	25,00	103,4	
0,150	949,4	10,53	28,48	117,8	0,150	1000	10,00	30,00	124,1	
0,175	1108	9,029	33,23	137,4	0,175	1167	8,571	35,00	144,7	
0,200	1266	7,900	37,97	157,1	0,200	1333	7,500	40,00	165,4	
0,225	1424	7,022	42,72	176,7	0,225	1500	6,667	45,00	186,1	
0,250	1582	6,320	47,47	196,3	0,250	1667	6,000	50,00	206,8	
0,275	1741	5,745	52,22	215,9	0,275	1833	5,455	55,00	227,5	
0,300	1899	5,267	56,96	235,6	0,300	2000	5,000	60,00	248,1	
0,325	2057	4,862	61,71	255,2	0,325	2167	4,615	65,00	268,8	
0,350	2215	4,514	66,46	274,8	0,350	2333	4,286	70,00	289,5	
0,375	2373	4,213	71,20	294,5	0,375	2500	4,000	75,00	310,2	
0,400	2532	3,950	75,95	314,1	0,400	2667	3,750	80,00	330,9	
0,425	2690	3,718	80,70	333,7	0,425	2833	3,529	85,00	351,5	
0,450	2848	3,511	85,44	353,4	0,450	3000	3,333	90,00	372,2	
0,475	3006	3,326	90,19	373,0	0,475	3167	3,158	95,00	392,9	
0,500	3165	3,160	94,94	392,6	0,500	3333	3,000	100,0	413,6	
0,525	3323	3,010	99,68	412,3	0,525	3500	2,857	105,0	434,2	
0,550	3481	2,873	104,4	431,9	0,550	3667	2,727	110,0	454,9	
0,575	3639	2,748	109,2	451,5	0,575	3833	2,609	115,0	475,6	
0,600	3797	2,633	113,9	471,2	0,600	4000	2,500	120,0	496,3	
0,625	3956	2,528	118,7	490,8	0,625	4167	2,400	125,0	517,0	
0,650	4114	2,431	123,4	510,4	0,650	4333	2,308	130,0	537,6	
0,675	4272	2,341	128,2	530,0	0,675	4500	2,222	135,0	558,3	
0,700	4430	2,257	132,9	549,7	0,700	4667	2,143	140,0	579,0	
0,725	4589	2,179	137,7	569,3	0,725	4833	2,069	145,0	599,7	
0,750	4747	2,107	142,4	588,9	0,750	5000	2,000	150,0	620,4	
0,775	4905	2,039	147,2	608,6	0,775	5167	1,935	155,0	641,0	
0,800	5063	1,975	151,9	628,2	0,800	5333	1,875	160,0	661,7	
0,825	5222	1,915	156,6	647,8	0,825	5500	1,818	165,0	682,4	
0,850	5380	1,859	161,4	667,5	0,850	5667	1,765	170,0	703,1	
0,875	5538	1,806	166,1	687,1	0,875	5833	1,714	175,0	723,7	
0,900	5696	1,756	170,9	706,7	0,900	6000	1,667	180,0	744,4	
0,925	5854	1,708	175,6	726,4	0,925	6167	1,622	185,0	765,1	
0,950	6013	1,663	180,4	746,0	0,950	6333	1,579	190,0	785,8	
0,975	6171	1,621	185,1	765,6	0,975	6500	1,538	195,0	806,5	
1,000	6329	1,580	189,9	785,3	1,000	6667	1,500	200,0	827,1	
1,025	6487	1,541	194,6	804,9	1,025	6833	1,463	205,0	847,8	
1,050	6646	1,505	199,4	824,5	1,050	7000	1,429	210,0	868,5	
1,075	6804	1,470	204,1	844,2	1,075	7167	1,395	215,0	889,2	
1,100	6962	1,436	208,9	863,8	1,100	7333	1,364	220,0	909,9	
1,125	7120	1,404	213,6	883,4	1,125	7500	1,333	225,0	930,5	
1,150	1218	1,3/4	218,4	903,0	1,150	/00/	1,304	230,0	951,2	
1,1/5	7505	1,345	223,1	922,7	1,1/5	/833	1,277	235,0	9/1,9	
1,200	1393	1,317	227,8	942,3	1,200	8000	1,230	240,0	992,0	
ω <sup>*</sup>	*	1.	, a		ú	* •	_	$\hbar c$ 2	$2\pi\omega^*$ ,	
$k = -\frac{1}{a} (100 \text{ cm}^{-1}),$			$\lambda = \frac{1}{\omega^*} (\mu m),$		$\nu = c -$	$\nu = c - a (THz),$		$=$ $ e$ $\cdot$ $-$	${a}$ (eV).	

## C. Anmerkung zur nicht-linearen Optik, aus [34], S. 634

"The usual classical treatment of the propagation of light - superposition, reflection, refraction, and so forth - assumes a linear relationship between the electromagnetic light field and the responding atomic system constituting the medium. But just as an oscillatory mechanical device (e.g., a weighted spring) can be overdriven into nonlinear response through the application of large enough forces, so too we might anticipate that an extremely intense beam of light could generate appreciable nonlinear optical effects.

The electric fields associated with light beams from ordinary or, if you will, traditional sources are far too small for" nonlinear optical "behavior to be easily observable. It was for this reason, coupled with an initial lack of technical prowess, that the subject had to await the advent of the laser in order that sufficient brute force could be brought to bear in the optical region of the spectrum. As an example of the kinds of fields readily obtainable with the current technology, consider that a good lens can focus a laserbeam down to a spot having a diameter of about  $10^{-3}$  inch or so, which corresponds to an area of roughly  $10^{-9}$  m<sup>2</sup>. A 200-megawatt pulse from, say, a *Q*-switched ruby laser would then produce a flux density of  $20 \times 10^{16}$  W/m<sup>2</sup>. It follows that the corresponding electric field amplitude is given by

$$E_0 = 27.4\sqrt{\frac{I}{n}}.$$

In this particular case, for  $n \approx 1$ , the field amplitude is about  $1.2 \times 10^8$  V/m. This is more than enough to cause the breakdown of air (roughly  $3 \times 10^6$  V/m) and just several orders of magnitude less than the typical fields holding a crystal together, the latter being roughly about the same as the cohesive field of the electron in an hydrogen atom ( $5 \times 10^{11}$ V/m). The availability of these and even greater ( $10^{12}$  V/m) fields has made possible a wide range of important new nonlinear phenomena and devices."
## Literaturverzeichnis

- J. Bardeen und W. H. Brattain, *The transistor, a semiconductor triode*, Phys. Rev. 74, 230 (1948)
- [2] S. John, *Strong localization of photons in certain disordered dielectric superlattices*, Phys. Rev. Lett. 58, 2486 (1987)
- [3] E. Yablonovitch, *Inhibited spontaneous emission in solid-state physics and electronics*, Phys. Rev. Lett. 58, 2059 (1987)
- [4] R. Windisch, P. Heremans, A. Knobloch, P. Kiesel, G. H. Dohler, B. Dutta und G. Borghs Light-emitting diodes with 31% external quantum efficiency by outcoupling of lateral waveguide modes, Appl. Phys. Lett. 74, 2256 (1999)
- [5] U. Grüning, V. Lehmann, S. Ottow und K. Busch, *Macroporous silicon with a complete two-dimensional photonic band gap centered at 5 μm*, Appl. Phys. Lett. **68**, 747 (1996); U. Grüning, V. Lehmann und U. Eberl, *Photonische Bandstruktur in makroporösem Silizium*, Phys. Bl. **52**, 661 (1996)
- [6] U. Grüning, *Realisierung Photonischer Bandstrukturen in Makroporösem Silizium*, Dissertation, Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg, 1996
- [7] E. Yablonovitch, Photonic Crystals, J. Mod. Opt. 41, 173 (1994)
- [8] S. D. Cheng, R. Biswas, E. Özbay, J. S. McCalmont, G. Tuttle und K.-M. Ho, *Optimized dipole antennas on photonic band gap crystals*, Appl. Phys. Lett. 67, 3399 (1995)
- [9] C. M. Soukoulis (Editor), *Photonic Band Gap Materials*, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 1996;
- [10] J. D. Joannopoulos, R. D. Meade und J. N. Winn (Editoren), *Photonic Crystals*, Princeton Academic Press, New Jersey, 1995
- [11] A. Birner, K. Busch und F. Müller, Photonische Kristalle, Phys. Bl. 55 (4), 27 (1999)
- [12] private Mitteilung, Dr. Kurt Busch, Universität Karlsruhe

- [13] J. S. Foresi, P. R. Villeneuve, J. Ferrara, E. R. Thoen, G. Steinmeyer, S. Fan, J. D. Joannopoulos, L. C. Kimerling, H. I. Smith und E. P. Ippen, *Photonic-bandgap microcavities in optical waveguides*, Nature **390**, 143 (1997)
- [14] V. Lehmann, *The physics of macropore formation in low-doped n-type silicon*, J. Electrochem. Soc. 140, 2836 (1993)
- [15] Li, A.-P., F. Müller, A. Birner, K. Nielsch und U. Gösele, *Hexagonal pore arrays with a* 50-420 nm interpore distance formed by self-organization in anodic alumina, J. Appl. Phys. 84, 6023 (1998)
- [16] Li, A.-P., F. Müller, A. Birner, K. Nielsch und U. Gösele, Fabrication and microstructuring of hexagonally ordered two-dimensional nanopore arrays in anodic alumina, Adv. Mater. 11, 483 (1999)
- [17] Li A.-P., Müller F., Birner A, K. Nielsch und U. Gösele, *Polycrystalline nanopore arrays with hexagonal ordering on aluminum*, J. Vac. Sci. Technol. A **17**, 1428 (1999)
- [18] A. Birner, U. Grüning, S. Ottow, A. Schneider, F. Müller, V. Lehmann, H. Föll und U. Gösele, *Macroporous silicon: A two-dimensional photonic bandgap material suitable for the near-infrared spectral range*, Phys. Stat. Sol. (a) **165**, 111 (1998)
- [19] N. Aközbek und S. John, Optical solitary waves in two- and three-dimensional nonlinear photonic band-gap structures, Phys. Rev. E. 57, 2287 (1998)
- [20] S.-Y. Lin, E. Chow, V. Hietala, P. R. Villeneuve und J. D. Joannopoulos, *Experimental demonstration of guiding and bending of electromagnetic waves in a photonic crystal*, Science 282, 274 (1998)
- [21] J. C. Knight, J. Broeng, T. A. Birks und P. St. J. Russell, *Photonic band gap guidance in optical fibers*, Science 282, 1476 (1998)
- [22] S. Ottow, V. Lehmann und H. Föll, Processing of three-dimensional microstructures using macroporous n-type silicon, J. Electrochem. Soc. 143, 385 (1996)
- [23] E. Yablonovitch, T. J. Gmitter und K. M. Leung, *Photonic band structure: The face-centered-cubic case employing nonspherical atoms*, Phys. Rev. Lett. 67, 2295 (1991)
- [24] K.-M. Ho, C. T. Chan und C. M. Soukoulis, *Existence of a photonic gap in periodic dielectric structures*, Phys. Rev. Lett. 65, 3152 (1990)
- [25] K.-M. Ho, C. T. Chan, C. M. Soukoulis, R. Biswas und M. M. Sigalas, *Photonic band gaps in three dimensions: New layer-by-layer periodic structure*, Sol. State Commun. 89, 419 (1994)
- [26] S. Lin, J. G. Fleming, D. L. Hetherington, B. K. Smith, R. Biswas, K.-M. Ho, M. M. Sigalas,
  W. Zubrzycki, S. R. Kurtz und J. Bur, *A three-dimensional photonic crystal operating at infrared wavelengths*, Nature **394**, 251 (1998)

- [27] V. N. Bogomolov, S. V. Gaponenko, I. N. Germanenko, A. M. Kapitanov, E. P. Petrov, N. V. Gaponenko, A. V. Prokofiev, A. N. Ponyavina, N. I. Silvanovitch und S. M. Smoilovitch, *Photonic band gap phenomenon and optical properties of artificial opals*, Phys. Rev. E 55, 7619 (1997)
- [28] H. Löwen, Kolloide auch für Physiker interessant?, Phys. Bl. 51, 165 (1995)
- [29] A. A. Zakhidov, R. H. Baughman, Z. Iqbal, C. Cui, I. Khayrullin, S. O. Dantas, J. Marti und V. G. Ralchenko, *Carbon structures with three-dimensional periodicity at optical wavelengths*, Science 282, 897 (1998)
- [30] H. S. Sözüer, J. W. Haus und R. Inguva, *Photonic bands: Convergence problems with the plane-wave method*, Phys. Rev. B **45**, 13962 (1992)
- [31] K. Busch und S. John, *Photonic band gap formation in certain self-organizing systems*, Phys. Rev. E 58, 3896 (1998)
- [32] J. E. G. J. Wijnhoven und W. L. Vos, Preparation of photonic crystals made of air spheres in titania, Science 281, 802 (1998)
- [33] F. Müller, Infrarotspektroskopie an porösem Silizium und zweidimensionalen Elektronen- bzw. Löchergassystemen, Dissertation, Technische Universität München, 1993
- [34] E. Hecht, Optics, Addison-Wesley, Reading, Massachusetts (1998)
- [35] private Mitteilung, Dr. Frank Müller, MPI Halle
- [36] J.D. Jackson, Classical Electrodynamics, John-Wiley&Sons, New York (1975)
- [37] Edward D. Palik (Ed.), Handbook of optical Constants of Solids Academic Press, Inc., Boston 1985
- [38] N. W. Ashcroft und N. D. Mermin, Solid State Physics, W. B. Saunders Company, 1976.
- [39] K. Kopitzki, Einführung in die Festkörperphysik, B. G. Teubner, 1993
- [40] S.L. McCall, P.M. Platzman, R. Dalichaouch, D. Smith und S. Schultz, *Microwave Propagation in Two-Dimensional Dielectric Lattices*, Phys. Rev. Lett. 67, 2017 (1991)
- [41] M. Plihal und A. A. Maradudin, *Photonic band structure of two-dimensional systems: The triangular lattice*, Phys. Rev. B 44, 8565 (1991)
- [42] P. R. Villeneuve und M. Piche, *Photonic band gaps in two-dimensional square and hexagonal lattices*, Phys. Rev. B, **46**, 4969 (1992).
- [43] private Mitteilung, Dr. Reinald Hillebrand, Max-Planck-Institut für Mikrostrukturphysik, Halle

- [44] K. Sakoda, *Optical transmittance of a two-dimensional triangular photonic lattice*, Phys. Rev. B 51, 4672 (1995).
- [45] K. Sakoda, *Transmittance and Bragg reflectivity of two-dimensional photonic lattices*, Phys. Rev. B 52, 8992 (1995).
- [46] W. M. Robertson, G. Arjavalingam, R. D. Meade, K. D. Brommer, A. M. Rappe und J. D. Joannopoulos, *Measurement of photonic band structure in a two-dimensional periodic dielectric array*, Phys. Rev. Lett. 68, 2023 (1992)
- [47] J. C. Chen und K. Li, *Quartic perfectly matched layers for dielectric wave-guides and gratings*, Microw. Opt. Tech. Lett. **10**, 319 (1995)
- [48] J. Rarity und C. Weisbuch, *Microcavities and Photonic Bandgaps: Physics and Applications*, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht 1996
- [49] A. Mekis, J. C. Chen, I. Kurland, S. Fan, P. R. Villeneuve und J. D. Joannopoulos, *High transmission through sharp bends in photonic crystal waveguides*, Phys. Rev. Lett. **77**, 3787 (1996)
- [50] R. D. Meade, A. Devenyi, J. D. Joannopoulos, O. L. Alerhand, D. A. Smith und K. Kash, Novel applications of photonic band-gap materials - low-loss bends and high Q-cavities, J. Appl. Phys. 75, 4753 (1994)
- [51] O. Painter, R. K. Lee, A. Scherer, A. Yariv, J. D. O'Brien, P. D. Dapkus und I. Kim, *Two-dimensional photonic band gap defect mode laser*, Science 284, 1819 (1999)
- [52] A. Birner, Laserlicht aus porösen Strukturen, Phys. Bl. 55 (7/8), 17 (1999)
- [53] V. Kuzmiak und A. A. Maradudin, Localized defect modes in a two-dimensional triangular photonic crystal, Phys. Rev. B 57, 15242 (1998)
- [54] S. F. Fan, J. N. Winn, A. Devenyi, J. C. Chen, R. D. Meade und J. D. Joannopoulos, *Guided and defect modes in periodic dielectric waveguides*, J. Opt. Soc. Am. B 12, 1267 (1995)
- [55] private Mitteilung, Dr. Pierre R. Villeneuve, MIT Cambridge, USA
- [56] S. John, *Electromagnetic absorption in a disordered medium near a photon mobility edge*, Phys. Rev. Lett. **53**, 2169 (1984)
- [57] S. John und J. Wang, *Quantum electrodynamics near a photonic band gap: Photon bound states and dressed atoms*, Phys. Rev. Lett. **64**, 2418 (1990)
- [58] S. John und V. I. Rupasov, Multiphoton Localization and Propagating Quantum Gap Solitons in a Frequency Gap Medium, Phys. Rev. Lett. 79, 821 (1997)
- [59] S. John und T. Quang, *Collective switching and inversion without fluctuation of two-level atoms in confined photonic systems*, Phys. Rev. Lett. **78**, 1888 (1997)

- [60] J. P. Dowling, M. Scalora, M. J. Bloemer und C. M. Bowden, *The photonic band edge laser: A new approach to gain enhancement*, J. Appl. Phys. 75, 1896 (1994)
- [61] E. R. Brown, C. D. Parker und O. B. McMahon, Effect of surface composition on the radiation pattern from a photonic-crystal planar-dipole antenna, Appl. Phys. Lett. 64, 3345 (1994)
- [62] M. M. Sigalas, J. S. McCalmont, K.-M. Ho und G. Tuttle, *Theoretical and experimental study of silicon-based angular filters*, Appl. Phys. Lett. 68, 3525 (1996)
- [63] H. Fouckhard, Photonik, B. G. Teubner, Stuttgart, 1994
- [64] S. John und N. Aközbek, Nonlinear optical solitary waves in a photonic band gap, Phys. Rev. Lett. 71, 1168 (1993)
- [65] K. Sakoda und K. Ohtaka, Sum-frequency generation in a two-dimensional photonic lattice, Phys. Rev. B. 54, 5742 (1996)
- [66] S. John und J. Wang, *Quantum optics of localized light in a photonic band gap*, Phys. Rev. B 43, 12722 (1991)
- [67] L. T. Canham, Silicon quantum wire array fabrication by electrochemical and chemical dissolution of wafers, Appl. Phys. Lett. 57, 1046 (1990)
- [68] V. Lehmann, U. Gösele, *Porous silicon: A quantum wire effect*, Appl. Phys. Lett. 58, 856 (1991)
- [69] Y. B. Hamilton, Porous Silicon, Semicond. Sci. Technol. 10, 1187 (1995)
- [70] A. F. Hollemann, E. Wiberg, Anorganische Chemie, Walter de Gruyter, Berlin, 1985
- [71] S. M. Sze, *Physics of Semiconductor Devices* John Wiley, New York (1981)
- [72] J.-N. Chazalviel, *The silicon/electrolyte interface*, in *Porous silicon: Science and Technology*, ed. J.-C. Vial und J. Derrien, Springer Verlag, Berlin (1995)
- [73] private Mitteilung, Prof. Helmut Föll, Universität zu Kiel
- [74] private Mitteilung, Marc Christophersen, Universität zu Kiel
- [75] R. L. Smith und S. D. Collins, Porous Silicon formation mechanisms, J. Appl. Phys. 71 R1 (1992)
- [76] S. Ottow, Elektrochemische Untersuchungen am Silizium/Flußsäure-Elektrolytkontakt und Anwendungen von nano- und makroporösen Siliziumschichten, Dissertation, Christian-Albrechts-Universität zu Kiel, 1996
- [77] P. Kramper, *Entwicklung eines optischen Synthesizers auf der Basis parametrischer Oszillation*, Diplomarbeit, Univ. Konstanz 1997

- [78] K. Schneider, P. Kramper, S. Schiller und J. Mlynek, *Toward an optical synthesizer: A single-frequency parametric oscillator using periodically poled LiNbO*<sub>3</sub>, Opt. Lett. 22, 1293 (1997)
- [79] A. Birner, R. B. Wehrspohn, U. Gösele, K. Busch, Silicon-based photonic crystals, erscheint in Adv. Mater., (2000)
- [80] R. D. Meade, K. D. Brommer, A. M. Rappe und J. D. Joannopoulos, *Existence of a photonic band gap in two dimensions*, Appl. Phys. Lett. 61, 495 (1992)
- [81] D. Labilloy, H. Benisty, C. Weisbuch, C.J.M. Smith, T.F. Krauss, R. Houndrè und U. Oesterle, Finely resolved transmission spectra and band structure of two-dimensional photonic crystals using emission from InAs quantum dots, Phys. Rev. B 59, 1649 (1999)
- [82] S. Leonard, H. M. van Driel, K. Busch, S. John, A. Birner, A.-P. Li, F. Müller, U. Gösele und V. Lehmann, Attenuation of optical transmission within the band gap of thin two-dimensional macroporous silicon photonic crystals, Appl. Phys. Lett. 75, 3063 (1999)
- [83] H. Benisty, Modal analysis of optical guides with two-dimensional photonic band-gap boundaries, J. Appl. Phys. 79, 7483 (1996)
- [84] T. Baba, N. Fukaya und J. Yonekura, Observation of light propagation in photonic crystal optical waveguides with bends, Electron. Lett. 35, 654 (1999)
- [85] A. Birner, A.-P. Li, F. Müller, U. Gösele, P. Kramper, V. Sandoghdar, J. Mlynek, K. Busch und V. Lehmann, *Transmission of a microcavity structure in a two-dimensional photonic crystal based on macroporous silicon, erscheint in* Mat. Sci. in Semicond. Technol., (2000)
- [86] private Mitteilung, Patrick Kramper, Universität Konstanz
- [87] private Mitteilung, Dr. Elefteris Lidorikis, Iowa State University, USA
- [88] private Mitteilung, Dr. Vahid Sandoghdar, Universität Konstanz
- [89] S. W. Leonard, J. Mondia, H. M. van Driel, O. Toader, S. John, K. Busch, A. Birner, U. Gösele und V. Lehmann, *Tunable two-dimensional photonic crystals via liquid crystal infiltration*, Phys. Rev. B, 61, R2389 (2000)
- [90] F. Müller, A. Birner, U. Gösele, V. Lehmann, S. Ottow und H. Föll, Structuring of Macroporous Silicon for Applications as Photonic Crystals, J. Porous. Mater. 7, 201 (2000)

#### Ausgewählte Vorträge im Rahmen dieser Doktorarbeit

- Macroporous Silicon based two-dimensional photonic band gap materials, II. International Workshop on low-dimensional light-emitting silicon structures, Lagonissi Attikis, Greece, 24.07.1997 (eingeladen)
- On the two-dimensional photonic crystal properties of macroporous silicon, Forschungszentrum Rossendorf, Dresden, 1997 (eingeladen)
- Makroporöses Silizium als zweidimensionaler Photonischer Kristall, DPG-Frühjahrstagung, Regensburg 1998
- *Silicon based photonic crystals*, Seminar of the theory department of Prof. Sajeev John, Faculty of Physics, University of Toronto, Canada, 1998 (eingeladen)
- *Optische Charakterisierung Photonischer Kristalle*, Graduiertenseminar der Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg, 1999
- Defektstrukturen in zweidimensionalen Photonischen Kristallen, Universität Würzburg, Technische Physik, Seminar von Prof. Alfred Forchel, 1999
- Mikrokavitäten in zweidimensionalen Photonischen Kristallen aus makroporösem Silizium, DPG-Frühjahrstagung, Fachverband Quantenoptik, Heidelberg, 1999
- *Microcavities in macroporous silicon based two-dimensional photonic crystals*, E-MRS Spring Meeting, Strasbourg, France, 4. Juni 1999
- Characterization of Photonic Crystals in Macroporous Silicon, Seminar von Prof. Jochen Feldmann, Sektion Physik, Ludwig-Maximilians-Universität München, 26. Juli 1999 (eingeladen)

#### Patentanmeldungen

Erfindungsmeldung eingereicht zum Thema:

• Verfahren zur Herstellung vertikaler, dünnwandiger Strukturen aus Silizium

## Danksagung

Ich möchte an dieser Stelle all denen danken, die durch ihre Unterstützung zu dieser Arbeit beigetragen haben.

Herrn Professor Ulrich Gösele danke ich für die Aufnahme an sein Institut, für das allzeit freundliche und förderliche Arbeitsklima und für die vielen hilfreichen Diskussionen und Gespräche.

Dr. Frank Müller bin ich für die federführende Betreuung und für seine breite Unterstützung bei Meßproblemen, allgemeinen physikalischen Fragestellungen und Hilfen bei Rechnerangelegenheiten sehr dankbar.

Dr. Volker Lehmann danke ich für den tiefen Einblick in die Trickkiste des Makroporenätzens und für die schöne Zeit bei Siemens ZT ME 1.

Dr. Kurt Busch, Universität Karlsruhe, möchte ich ganz besonders für die professionelle Hilfe bei Fragen zur Theorie Photonische Kristalle und für den intensiven Wissensaustausch danken, der zu vielen Beiträgen für diese Arbeit, insbesondere den Bandstruktur- und Transmissionsrechnungen geführt hat. Seine langjährige Erfahrung auf diesem Arbeitsgebiet war von unschätzbarem Wert.

I like to thank Steve Leonard, University of Toronto, for his outstanding contributions to this work and for the experiments with the DFG setup. It really was fun to work with you!

I am very grateful to Prof. Sajeev John and Prof. Henry van Driel, University of Toronto, who afforded generous financial assistance for my stay in Toronto. I'm very honoured because of Your great interest in macroporous silicon and for Your outstanding support.

Prof. Jürgen Mlynek bin ich sehr zu Dank verpflichtet, daß er seiner Gruppe um Dr. Vahid Sandoghdar das Arbeiten an unseren Probensystemen möglich gemacht und dieses gefördert hat.

Dr. Vahid Sandoghdar und Herrn Patrick Kramper danke ich sehr herzlich für die schöne Zeit der Zusammenarbeit und für die Messungen an den Mikrokavitäten.

Bei Dr. Ulrike Grüning und Dr. Stefan Ottow möchte ich mich für die Einarbeitung in das Arbeitsgebiet der "Photonischen Kristalle auf Basis Makroporösen Siliziums" und die darüberhinausgehende Hilfe herzlich bedanken.

Den Dr.es Reinhard Stengl, Hans Reisinger, Gerrit Lange, Hermann Wendt, sowie Frau Gerda Zivanović danke ich sehr für die freundliche Unterstützung während meiner Gastaufenthalte in der Siemens ZT ME 1.

I'm very grateful for the FD-TD calculations of Dr. Elefteris Lidorikis and Prof. Costas Soukoulis who helped much to verify the measured resonance signal of the microcavity structure.

#### DANKSAGUNG

The discussions and transmission calculations as well as the design data for the waveguide structures contributed by Dr. Pierre Villeneuve, MIT Cambridge, USA, are gratefully acknowledged

I enjoyed the discussions with Prof. Lionel C. Kimerling and Prof. Eli Yablonovitch and like to thank them for their interest.

Dr. Reinald Hillebrand und Prof. Wolfram Hergert, Martin-Luther-Universität Halle, bin ich für ihre Hilfestellung bei Theoriefragen sehr dankbar.

I am grateful to Dr. An-Ping Li, Michigan-State University, for his support, the many pleasant discussions we had and for his friendship. Take care!

Im Hause MPI-MSP möchte ich mich bei den Werkstätten, insbesondere bei Herrn Wille, für die zügige Anfertigung mancher nicht ganz normgerecht gezeichneter Werkstücke danken. Mein weiterer Dank gilt Frau Kroder und Frau Amm von der Bildstelle. Auch für die Hilfe von Dr. Manfred Reiche, Frau Doß, Herrn Meyer und aller übrigen Institutsmitarbeiter sei herzlich gedankt.

Für das freundliche Klima und die schöne Zeit am MPI-MSP danke ich besonders meinen (teils ehemaligen) Kolleg(inn)en Frank Müller, Matthias Schultz, Rene Scholz, Oliver Schneider, Susanne Welke, Andreas Plößl, Gertrud Kräuter, An-Ping Li, Martin Langenkamp, Uwe Kahler, Steffen Breuer, Kornelius Nielsch, Steffen Huth, Norbert Engler, Marco Wiegand und Jörg Schilling.

Zuguterletzt danke ich ganz besonders meiner Frau Kristin für ihre Rücksichtnahme und ihr großes Entgegenkommen, ohne die diese Arbeit nicht möglich gewesen wäre.

### Lebenslauf

Name	Albert Reinhold Birner
Geburtstag	27. Januar 1969
Geburtsort	Etsdorf/Oberpfalz, Bayern
Juni 1988	Abitur am Gregor-Mendel-Gymnasium in Amberg/Opf.
Juli 1988 bis September 1989	Grundwehrdienst, Schweppermann-Kaserne, Gärmersdorf/Opf.
Oktober 1989	Beginn des Studiums der Physik an der Universität Regensburg
Dezember 1994 bis Februar 1996	Diplomarbeit an der Universität Regensburg, Lehrstuhl für Angewandte Physik, Prof. Max Maier; Studentische Hilfskraft, Drittmittelprojekt A-Bay-FOR (FOROB)
Februar 1996	Diplom in Physik; Titel der Diplomarbeit: E-Feld-Effekte in der Lochbrennspektroskopie mit Bezug auf Anwendungen
April 1996 bis September 1996	Wissenschaftlicher Mitarbeiter in der Angewandten Physik, Universität Regensburg, Drittmittelprojekt im Schwerpunkt <i>Photonik</i> der Stiftung Volkswagenwerk
Oktober 1996 bis September 1999	Doktorarbeit bei Prof. U. M. Gösele am Max-Planck-Institut für Mikrostrukturphysik in Halle über die infrarot-optische Untersuchung von Photonischen Kristallen aus Makroporösem Silizium in enger Zusammenarbeit mit <i>Siemens ZT ME 1</i> , Zentralabteilung Technik, Mikroelektronik, Materialinnovationslabor, München
Mai 1997	Eheschließung mit Kristin Birner, geb. Weber
September 1999	Geburt von <u>Antonia</u> Marie Birner
seit Oktober 1999	Entwicklungsingenieur Innovationsprojekte bei Infineon Technologies AG, Dresden
8. November 1999	Antrag auf Eröffnung des Promotionsverfahrens an der Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg; Titel der Dissertation: Optische Wellenleiter und Mikroresonatoren in zweidimensionalen Photonischen Kristallen aus Makroporösem Silizium
31. Januar 2000	Tag der öffentlichen Verteidigung

# Eidesstattliche Erklärung

Ich erkläre hiermit, daß ich keine anderen als die von mir angegebenen Quellen und Hilfsmittel zu Erstellung meiner Dissertation verwendet habe. Den benutzten Werken wörtlich oder inhaltlich entnommene Stellen sind als solche gekennzeichnet.

Albert Birner Halle, im November 1999