

**Herstellung und optische Eigenschaften
von 2D- und 3D-photonischen Kristallen
aus makroporösem Silizium**

Dissertation

zur Erlangung des akademischen Grades

Doctor rerum naturalium (Dr. rer. nat.)

vorgelegt der

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

von Herrn Jörg Schilling
geb.: 26.09.1973 in: Halle

Gutachter:

1. Prof. Ulrich Gösele
2. Prof. Hans-Reiner Höche
3. Prof. Martin Wegener

Halle (Saale), am 24. Mai 2002

urn:nbn:de:gbv:3-000003660

[<http://nbn-resolving.de/urn/resolver.pl?urn=nbn%3Ade%3Agbv%3A3-000003660>]

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Grundlagen	3
2.1	Einführung	3
2.2	Mathematische Beschreibung der Dispersionsrelation in photonischen Kristallen	3
2.3	1D-photonische Kristalle	6
2.4	2D-photonische Kristalle	11
2.5	3D-photonische Kristalle	13
3	Elektrochemisches Ätzen von Silizium	17
3.1	Einführung	17
3.2	Elektrochemisches Verhalten von Silizium in Flußsäure	17
3.3	Porenwachstum in Silizium	20
3.4	Geordnete Makroporen in n-typ Silizium	24
4	Experimenteller Aufbau und verwendete Geräte	26
4.1	Aufbau zum photoelektrochemischen Ätzen von Silizium	26
4.2	Fourier-Transformations-Infrarot-Spektrometer	26
4.2.1	Transmissionsmessung	27
4.2.2	Reflexionsmessung mit Infrarotmikroskop	27
5	2D-photonische Kristalle aus makroporösem Silizium	29
5.1	2D-photonischer Kristall mit fundamentaler Bandlücke im nahen Infrarot	29
5.1.1	Herstellung	29
5.1.2	Optische Eigenschaften	32
5.2	Opto-optisches Schalten	38
5.2.1	Konzept der optisch induzierten Brechungsindexänderung	39
5.2.2	Experimenteller Nachweis einer optisch induzierten Bandkantenverschiebung .	39
5.2.3	Ergebnisse und Diskussion	43
5.2.4	Rekombinationsgeschwindigkeiten	46
6	3D-photonische Kristalle aus makroporösem Silizium	47
6.1	Einführung	47
6.2	Herstellung von 3D-photonischen Kristallen durch Porenmodulation	47
6.2.1	Konzept	47
6.2.2	Modulationsprofile in Abhängigkeit von der Modulationsperiode	48
6.2.3	Modell zur Erklärung der Modulation	54
6.3	Photonische Bandlücke durch Modulation des Porendurchmessers	57
6.3.1	Vorbetrachtung	57
6.3.2	Optische Messung	59

6.3.3	Diskussion	61
6.4	Defektschicht im 3D-photonischen Kristall	66
6.4.1	Einführung	66
6.4.2	Defektmode als Fabry-Perot-Resonanz	66
6.4.3	Optische Messungen	67
6.4.4	Ursache für die Defektdoppelpicks	69
6.4.5	Q-Faktoren und Reflektivitätskoeffizienten	76
6.5	Experimentelle Bestimmung der Gruppengeschwindigkeit	83
6.5.1	Gruppengeschwindigkeit in photonischen Kristallen	83
6.5.2	Optische Messungen	84
6.6	Omnidirektionale Totalreflexion	89
6.6.1	Theorie	89
6.6.2	Optische Messungen	91
7	Anwendungen	94
8	Zusammenfassung	95
A	: Rekombination freier Ladungsträger in Silizium	97
B	: Polarisationsabhängige effektive Brechungsindizes	101
C	: Fabry-Perot-Resonanzen	104

1 Einleitung

Seitdem Huygens im 17. Jahrhundert das Licht erstmals als Welle beschrieb, sind ca. 350 Jahre vergangen. Aber auch heute noch offenbaren sich neue Phänomene, die durch Streuung, Beugung und Interferenz von elektromagnetischen Wellen hervorgerufen werden. In photonischen Kristallen auftretende Phänomene gehören dazu.

Die Beugung von Licht am Einfach- oder Doppelspalt sowie am Gitter sind bereits lange bekannt und bildeten eine wichtige Grundlage für die Spektroskopie. Anfang des vorigen Jahrhunderts rückte mit der Beugung von Röntgenstrahlen an Kristallen auch die Streuung an einer 3D-periodischen Anordnung von Streuzentren (Atomen) in den Mittelpunkt des physikalischen Interesses: Erfüllt die einfallende Röntgenwelle gerade die Bragg-Bedingung für eine Netzebene, so kommt es zur konstruktiven Interferenz der gestreuten Wellen. Braggreflexion tritt auf. Im Rahmen der Theorie der dynamischen Röntgenbeugung konnte die endliche Breite eines Beugungsreflexes durch Interferenztotreflexion in einem gewissen Winkelbereich erklärt werden [1]. Die Breite dieses Bereichs der Interferenztotreflexion hängt vom Kontrast des Streuvermögens zwischen den Streuzentren (Atomen) und des sie umgebenden Mediums (Vakuum) ab. Für den Spektralbereich der Röntgenstrahlen ist dieser Kontrast sehr gering, so daß sich der Winkelbereich der Interferenztotreflexion auf wenige Winkelsekunden beschränkt. Damit ist auch nur ein sehr kleiner Frequenzbereich verbunden, in dem die Interferenztotreflexion auftritt [2].

Mit Verbesserung der Abscheidetechnologie wurde es später auch möglich, periodische Schichtstapel aus Schichten mit unterschiedlichem Brechungsindex herzustellen. Wird die Periode dieser Schichtstapel geringer als die halbe Wellenlänge des Lichts, so ergibt sich auch hier Braggreflexion durch die konstruktive Interferenz der an den Grenzflächen zurückreflektierten Wellen. Der Kontrast im Streuvermögen ergibt sich hier als Differenz im Brechungsindex Δn benachbarter Schichten. Dieser ist für den optischen Bereich viel größer als im Bereich der Röntgenstrahlung, so daß hier ein viel ausgedehnterer Frequenz-Bereich der Interferenztotreflexion auftritt. Dieser Bereich entspricht einer photonischen Bandlücke (siehe Abschnitt 2.3). Vom heutigen Standpunkt aus stellen solche periodischen Schichtstapel bzw. Braggspiegel 1D-photonische Kristalle dar.

Vor ca. 14 Jahren dehnten Yablonovitch und John dieses Prinzip der photonischen Bandlücke auf drei Dimensionen aus [3, 4]. Sie schlugen eine 3D-periodische Anordnung von Streuzentren vor, die einen hohen Brechungsindexkontrast zum Medium haben sollten, in das sie eingebettet sind. Durch die Überlappung der photonischen Bandlücken, die durch Interferenz an verschiedenen Netzebenen entstehen, sollte sich eine vollständige photonische Bandlücke in allen drei Dimensionen bilden. Eine solche Bandlücke wurde einige Jahre später für den Bereich der Mikrowellen auch experimentell realisiert [5]. Für Frequenzen innerhalb dieser vollständigen 3D-photonischen Bandlücke kann sich kein Licht im Kristall ausbreiten. Die Emission von Licht mit Frequenzen innerhalb der Bandlücke soll verhindert werden [3]. Diese Eigenschaft macht photonische Kristalle besonders für die Quantenoptik interessant [6]. Obwohl bereits 3D-photonische Kristalle mit vollständiger 3D-photonischer Bandlücke hergestellt wurden, war die Demonstration der vollständigen Unterdrückung spontaner Emission noch nicht möglich. Im Bereich der Mikrowellen liegen keine effizienten Strahlungsemitter vor, die in den photonischen Kristall eingebaut werden können. Inzwischen sind die 3D-photonischen Kristalle mit vollständiger 3D-photonischer Bandlücke zwar soweit miniaturisiert worden, daß die Bandlücken im nahen Infrarot liegen, allerdings sind die bisher für diesen Spektralbereich hergestellten photonischen Kristalle noch nicht perfekt genug (invertierte Opale) oder aber ihre Herstellung ist sehr aufwendig,

und sie bestehen daher nur aus wenigen Elementarzellen ("Lincoln-log-Struktur" – siehe Abschnitt 2.5). Die Herstellung eines perfekten ausgedehnten 3D-photonischen Kristalls stellt daher nach wie vor eine große Herausforderung dar.

Durch Einbringung von Defekten in photonische Kristalle können photonische Defektzustände erzeugt werden. Licht kann am Ort eines Punktdefekts lokalisiert werden, und es kann zu Feldstärkeüberhöhungen kommen [7]. Wird ein Liniendefekt eingebaut, so bildet er einen Wellenleiter im photonischen Kristall [8]. Weitergehende Pläne schlagen ganze "optische chips" vor [9]. Diese sollen Weiterleitung, Verteilung und Schaltung von Lichtpulsen in optischen Netzwerken der Telekommunikation übernehmen. Für dieses Anwendungsgebiet sollten die photonischen Kristalle allerdings mit dem bereits existierenden Glasfasernetz kompatibel sein. Da dieses in den Spektralbereichen um $\lambda = 1,3\mu\text{m}$ bzw. $\lambda = 1,5\mu\text{m}$ im nahen Infrarot arbeitet, müssen auch die photonischen Kristallkomponenten in diesem Spektralbereich funktionieren. Das bedeutet, daß die Bandlücken der photonischen Kristalle im nahen Infrarot liegen müssen. Um eine Schaltung einzelner Lichtpulse in einem optischen Netzwerk ("packet switching") zu erreichen, müssen sich darüber hinaus die Reflexions- oder Transmissionseigenschaften einer optischen Komponente auf einer Zeitskala von Pikosekunden ändern. Eine mögliche Realisierung wäre die schnelle Verschiebung der photonischen Bandlücke eines photonischen Kristalls während des Betriebes.

Während die Theorie der photonischen Kristalle schon weit fortgeschritten ist, und verschiedene Effekte vorausgesagt wurden, hängt die experimentelle Überprüfung noch weitestgehend von der Realisierung ausreichend regelmäßiger Strukturen mit hohem Brechungsindexkontrast ab. Makroporöses Silizium stellt eines der wenigen Materialsysteme dar, das diese Bedingungen erfüllt. Aufbauend auf den grundlegenden Arbeiten von V. Lehmann und H. Föll [10, 11] konnten geordnete Makroporenfelder in Silizium mit Porenabständen von $a = 2,3\mu\text{m}$ bzw. $1,5\mu\text{m}$ erzeugt werden. Eine perfekte langreichweitige Periodizität des 2D-Porengitters auf einem 4-Zoll-Wafer wurde durch eine Lithographie erreicht. Im Vergleich zu ihrem Abstand weisen die Poren eine große Tiefe von 100-200 μm auf. Damit bilden sie ein ideales System, um die Eigenschaften von 2D-photonischen Kristallen zu studieren [12]. Bisher konnten so 2D-photonische Bandlücken im mittleren Infrarot bei $\lambda=5\mu\text{m}$ [13] bzw. $\lambda=3,5\mu\text{m}$ [14, 15] gezeigt werden.

Unter diesen Voraussetzungen ergeben sich 3 Ziele für die vorliegende Arbeit:

1. Es soll ein 2D-photonischer Kristall aus makroporösem Silizium hergestellt werden, der eine photonische Bandlücke im *nahen* Infrarot aufweist.
2. Die schnelle Verschiebung (Schaltbarkeit) einer photonischen Bandlücke soll am Beispiel eines 2D-photonischen Kristalls aus makroporösem Silizium demonstriert werden.
3. Es soll ein 3D-photonischer Kristall auf der Basis von makroporösem Silizium hergestellt werden. Seine optischen Eigenschaften sollen untersucht und im besonderen soll geklärt werden, ob mit der Struktur eine vollständige 3D-photonische Bandlücke erreichbar ist.

Die Arbeit gliedert sich folgendermaßen: Nach einer Darstellung der Grundlagen photonischer Kristalle folgt eine Einführung in den photoelektrochemischen Ätzprozeß, der zur Herstellung der Proben aus makroporösem Silizium verwendet wurde. Nach einer kurzen Darstellung der experimentellen Aufbauten schließt sich daran ein Kapitel mit den Ergebnissen zu den 2D-photonischen Kristallen an. Darin sind auch die Ergebnisse zur Schaltbarkeit der photonischen Bandlücke enthalten. Der nächste Teil ist der Herstellung und optischen Charakterisierung der 3D-photonischen Kristalle gewidmet. Am Schluß steht eine Zusammenfassung.

2 Grundlagen: Photonische Kristalle

2.1 Einführung

Photonische Kristalle sind Strukturen, in denen der Brechungsindex räumlich periodisch variiert. Diese Variation des Brechungsindex wird durch Kombination von mindestens zwei verschiedenen Materialien mit unterschiedlichem Brechungsindex erreicht. Je nachdem, in wievielen Raumrichtungen der Brechungsindex periodisch variiert, werden 1D-, 2D- und 3D-photonische Kristalle unterschieden (Abb. 2.1). Bereits eine Schichtfolge aus 2 Materialien mit verschiedenem Brechungsindex stellt einen 1D-photonischen Kristall dar. Bei 2D-photonischen Kristallen variiert der Brechungsindex dagegen in einer Ebene, während er in 3D-photonischen Kristallen in allen drei Dimensionen eine Periodizität aufweist.

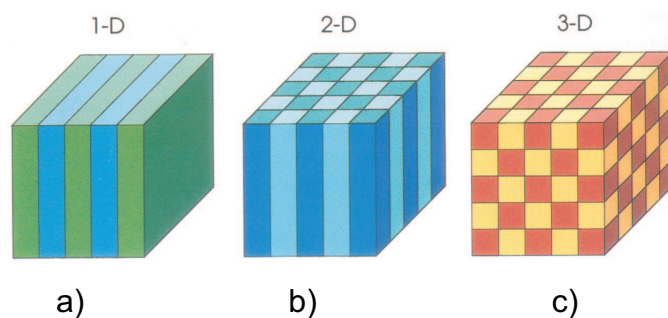


Abbildung 2.1: Beispiele für 1D- (a), 2D- (b) und 3D- (c) photonische Kristalle (nach [16])

Treffen elektromagnetische Wellen auf den photonischen Kristall auf, so werden diese aufgrund der Brechungsindexvariation in der Struktur gestreut. Solange die Wellenlänge der elektromagnetischen Strahlung viel größer als die Gitterkonstante des photonischen Kristalls ist, verhält sich die Struktur wie ein effektives Medium. Für diesen Spektralbereich kann ein effektiver Brechungsindex für die gesamte Struktur berechnet werden. Wird die Wellenlänge jedoch vergleichbar bzw. kleiner als die Gitterperiode des photonischen Kristalls, so tritt Bragg-Streuung auf. Genau wie bei der Röntgenbeugung an aus Atomen aufgebauten Kristallen lässt sie sich auch in photonischen Kristallen als konstruktive Interferenz von Streuwellen deuten, die von parallelen Gitternetzebenen des photonischen Kristalls ausgesandt werden.

2.2 Mathematische Beschreibung der Dispersionsrelation in photonischen Kristallen

Um die Dispersionsrelation $\omega(\vec{k})$ der elektromagnetischen Wellen in photonischen Kristallen zu beschreiben, müssen die Maxwell'schen Gleichungen für eine Struktur mit periodisch variiertem Brechungsindex betrachtet werden. Für die meisten experimentell untersuchten photonischen Kristalle treffen dabei folgende zusätzliche Annahmen zu:

1. Die Dielektrizitätskonstanten der Materialien, aus denen der photonische Kristall besteht, sind isotrop, d.h. die dielektrische Funktion lässt sich durch eine räumlich variierte, skalare Funktion $\epsilon(\vec{r})$ beschreiben.

2. Die dielektrische Funktion $\varepsilon(\vec{r})$ ist frequenzunabhängig im betrachteten Spektralbereich, d.h. es tritt keine Dispersion der Brechungsindizes der einzelnen Materialien auf.
3. Die Absorption im untersuchten Spektralbereich ist so gering, daß sie vernachlässigt werden kann. $\varepsilon(\vec{r})$ ist eine rein reelle Größe.
4. Die Materialien sind nicht magnetisierbar ($\mu = 1$).

Mit diesen Annahmen stellen sich die Maxwell'schen Gleichungen für einen photonischen Kristall folgendermaßen dar:

$$\nabla \cdot \vec{D}(\vec{r}, t) = \nabla \cdot \varepsilon(\vec{r}) \varepsilon_0 \vec{E}(\vec{r}, t) = 0 \quad (2.1)$$

$$\nabla \cdot \vec{B}(\vec{r}, t) = \mu_0 \nabla \cdot \vec{H}(\vec{r}, t) = 0 \quad (2.2)$$

$$\nabla \times \vec{E}(\vec{r}, t) = -\mu_0 \frac{\partial \vec{H}(\vec{r}, t)}{\partial t} \quad (2.3)$$

$$\nabla \times \vec{H}(\vec{r}, t) = \frac{\varepsilon(\vec{r}) \varepsilon_0 \partial \vec{E}(\vec{r}, t)}{\partial t} \quad (2.4)$$

Dabei bezeichnen \vec{E} das elektrische Feld, \vec{D} die dielektrische Verschiebung, \vec{H} das magnetische Feld und \vec{B} die magnetische Flußdichte. Aus den Rotationsgleichungen (2.3) (2.4) und lassen sich die Wellengleichungen für das E- und H-Feld herleiten:

$$\nabla \times \nabla \times \vec{E}(\vec{r}, t) = -\frac{\varepsilon(\vec{r})}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{E}(\vec{r}, t)}{\partial t^2} \quad (2.5)$$

$$\nabla \times \left[\frac{1}{\varepsilon(\vec{r})} \nabla \times \vec{H}(\vec{r}, t) \right] = -\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{H}(\vec{r}, t)}{\partial t^2} \quad (2.6)$$

Diese Gleichungen müssen für den photonischen Kristalls gelöst werden, um die Dispersionsrelation $\omega(\vec{k})$ für elektromagnetische Wellen im photonischen Kristall zu erhalten. Die Lösungen für das E- und H-Feld werden Moden genannt.

Da $\varepsilon(\vec{r})$ aufgrund der Kristallstruktur räumlich streng periodisch ist, kann die Methode der ebenen Wellen verwendet werden. Die Zeitabhängigkeit der Funktionen $\vec{E}(\vec{r}, t)$ und $\vec{H}(\vec{r}, t)$ kann dabei durch Ansatz von harmonischen Wellen

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \vec{E}(\vec{r}, \omega) e^{i\omega t} \quad (2.7)$$

$$\vec{H}(\vec{r}, t) = \vec{H}(\vec{r}, \omega) e^{i\omega t} \quad (2.8)$$

absepariert werden. Damit ergibt sich aus (2.5) und (2.6):

$$\frac{1}{\varepsilon(\vec{r})} \nabla \times \nabla \times \vec{E}(\vec{r}, \omega) - \frac{\omega^2}{c^2} \vec{E}(\vec{r}, \omega) = 0 \quad (2.9)$$

$$\nabla \times \left[\frac{1}{\varepsilon(\vec{r})} \nabla \times \vec{H}(\vec{r}, \omega) \right] - \frac{\omega^2}{c^2} \vec{H}(\vec{r}, \omega) = 0 \quad (2.10)$$

Es reicht aus, nur eine der beiden Wellengleichungen (2.9) oder (2.10) zu lösen. Die Lösung für das andere Feld kann unter Berücksichtigung der Maxwellgleichungen (2.3) oder (2.4) erhalten werden. Der weitere Lösungsweg wird daher beispielhaft nur für das E-Feld dargestellt.

Für einen unendlich ausgedehnten Kristall können aufgrund der Periodizität von $\varepsilon(\vec{r})$ periodische Randbedingungen für $|\vec{E}|^2$ eingeführt werden:

$$|\vec{E}(\vec{r}, \omega)|^2 = |\vec{E}(\vec{r} + \vec{R}, \omega)|^2 \quad (2.11)$$

\vec{R} bezeichnet dabei einen Gittervektor im Kristall. Daraus folgt, daß die Lösungen von (2.9) die Form von Blochwellen haben

$$\vec{E}(\vec{r}, \omega) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{n,\vec{k}}^E(\vec{r}), \quad (2.12)$$

Dabei bezeichnet n den Bandindex und k einen Wellenvektor in der ersten Brillouinzone. $u_{n,\vec{k}}^E(\vec{r})$ beschreibt eine gitterperiodische Funktion:

$$u_{n,\vec{k}}^E(\vec{r}) = u_{n,\vec{k}}^E(\vec{r} + \vec{R}) \quad (2.13)$$

Werden diese Blochfunktionen in (2.9) eingesetzt, so ergibt sich folgende Differentialgleichung zur Bestimmung der gitterperiodischen Amplitudenfunktionen $u_{n,\vec{k}}^E(\vec{r})$:

$$\frac{1}{\varepsilon(\vec{r})} (i\vec{k} + \nabla) \times [(i\vec{k} + \nabla) \times u_{n,\vec{k}}^E(\vec{r})] = \frac{\omega^2}{c^2} u_{n,\vec{k}}^E(\vec{r}) \quad (2.14)$$

Da $\varepsilon(\vec{r})$ und $u_{n,\vec{k}}^E(\vec{r})$ gitterperiodisch sind, können sie in Fourierreihen entwickelt werden

$$u_{n,\vec{k}}^E(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} u_{\vec{G}} e^{i\vec{G}\cdot\vec{r}} \quad (2.15)$$

$$\frac{1}{\varepsilon(\vec{r})} = \sum_{\vec{G}} \zeta_{\vec{G}} e^{i\vec{G}\cdot\vec{r}}, \quad (2.16)$$

wobei \vec{G} einen reziproken Gittervektor und $u_{\vec{G}}$ und $\zeta_{\vec{G}}$ die Fourierkoeffizienten für $u_{n,\vec{k}}^E(\vec{r})$ und $\frac{1}{\varepsilon(\vec{r})}$ bezeichnen. Idealerweise müßten die Fourierreihen unendlich viele Glieder enthalten. Allerdings beschränkt man sich auf eine endliche Anzahl N , die sich danach richtet, wie gut der periodische Verlauf der $\varepsilon(\vec{r})$ -Funktion durch die endliche Fourierreihe (2.16) dargestellt werden kann. Enthält $\varepsilon(\vec{r})$ scharfe Stufen und variiert sehr stark (hoher $\varepsilon(\vec{r})$ -Kontrast), so ist eine große Anzahl von Fourierreihengliedern nötig, um diese Funktion ausreichend zu nähern.

Im weiteren Verlauf werden (2.16) und (2.15) in (2.14) eingesetzt und ein Koeffizientenvergleich durchgeführt. Das führt zu einem homogenen Gleichungssystem, das aus N Gleichungen besteht. Die N Eigenwerte $\omega_{n,\vec{k}}$ lassen sich aus der Koeffizientendeterminante bestimmen und hängen von dem gewählten k -Vektor der Bloch-Funktion ab. Nach und nach werden nun alle $\omega_{n,\vec{k}}$ für verschiedene k -Vektoren bestimmt. Wählt man einen speziellen Pfad innerhalb der 1. Brillouin-Zone, für dessen k -Werte man die Frequenzen $\omega_{n,\vec{k}}$ berechnet, so können die erhaltenen Lösungen in einem Banddiagramm dargestellt werden. Auf der Abszisse werden die normierten k -Werte des abgeschrittenen k -Pfad dargestellt, während die Ordinate die normierten Frequenzen $\frac{\omega a}{2\pi c}$ enthält. Die Lösungen $\omega_{n,\vec{k}}$ bilden für konstantes n Bänder entlang des k -Pfad aus. n ist der Bandindex. Die Bandstruktur entspricht der Dispersionsrelation $\omega(\vec{k})$ für elektromagnetische Wellen innerhalb des photonischen Kristalls. Da die Fourierreihenglieder das Erscheinungsbild ebener Wellen haben, wird diese Lösungsmethode auch "Ebene-Wellen-Methode" genannt.

In den folgenden Kapiteln werden die photonischen Bandstrukturen von 1D-, 2D- und 3D-photonischen Kristallen diskutiert. Die Berechnungsmethode und auch die Darstellung als Banddiagramm ähnelt sehr stark der Bandstrukturrechnung für Elektronen im Festkörper. Der mathematische Apparat, der dort für die Berechnung der Energieeigenwerte der Elektronen entwickelt wurde, konnte auf photonische Kristalle angewendet werden. Der physikalische Mechanismus ist allerdings verschieden. In

einem photonischen Kristall handelt es sich um die Mehrfachstreuung von elektromagnetischen Wellen, nicht um Materiewellen (wie bei Elektronen im Festkörper). Der physikalische Prozeß der Lichtstreuung in photonischen Kristallen entspricht daher am ehesten der Beugung von Röntgenstrahlen in Kristallen. Allerdings wird in der dynamischen Theorie der Röntgenstrahlung nicht eine gesamte Bandstruktur berechnet [1]. Obwohl der Ansatz einer Fourierreihenentwicklung für die Felder und für $\varepsilon(\vec{r})$ mit der ebenen Wellenmethode für photonische Kristalle übereinstimmt, vereinfacht sich die Rechnung für Röntgenstrahlen meistens stark. Aufgrund des geringen Streuvermögens der Atome bei Röntgenfrequenzen kann die Anzahl der Fourierglieder von $\varepsilon(\vec{r})$ im meist anzutreffenden Zweistrahlfall auf zwei reduziert werden. Dadurch reduziert sich auch die Darstellung von $u_{n,\vec{k}}^{E_{-}}(\vec{r})$ auf zwei Fourierglieder – die einlaufende und die abgebeugte Welle – und das Gleichungssystem umfaßt nur noch zwei Gleichungen.

Zum Schluß dieses Abschnitts soll noch auf eine Besonderheit der Grundgleichungen (2.5, 2.6) hingewiesen werden: Sie sind skalierbar. Wird der Gitterabstand a um einen Faktor s vergrößert, so verringern sich die Eigenfrequenzen umgekehrt proportional um einen Faktor $\frac{1}{s}$. Das Erscheinungsbild einer Bandstruktur hängt daher nur noch von der Struktur des zugrundeliegenden photonischen Kristalls (Kristallstruktur und Porosität) und von den Brechungsindizes der beteiligten Materialien ab. Die photonische Bandstruktur wird daher meist in normierten Einheiten (z.B. $\frac{\omega a}{2\pi c}$ für die normierte Frequenz) angegeben. Durch Einsetzen einer probenspezifischen Gitterkonstante a kann die richtige Bandstruktur für die im Experiment untersuchte Probe erhalten werden. Dadurch ist es möglich, die prinzipiellen Eigenschaften der Dispersionsrelation eines photonischen Kristalls an Proben mit Gitterkonstanten im mm-Bereich und fundamentalen photonischen Bandlücken im Mikrowellenbereich zu untersuchen. Sollen photonische Kristalle dagegen für Experimente mit Licht emittierenden oder optisch nichtlinearen Materialien eingesetzt werden, ist eine Reduzierung der Gitterkonstanten notwendig, so daß die interessierenden Bereiche der Bandstruktur (z.B. fundamentale Bandlücken) im Funktionsbereich dieser optisch aktiven Materialien liegen.

2.3 1D-photonische Kristalle

Das einfachste Beispiel für einen photonischen Kristall stellt ein Stapel periodisch abwechselnder Schichten dar, deren Brechungsindex sich unterscheidet. Abb. 2.1a) zeigt eine solche Struktur. Diese Strukturen sind seit langem als Multilayer- oder Braggspiegel bekannt und können heute mit großer Genauigkeit gefertigt werden.

Wie bereits in der Abbildung 2.1a) zu sehen ist, variiert die Dielektrizitätskonstante bei einem 1D-photonischen Kristall nur in einer Dimension (z-Richtung), während sie in den beiden anderen Dimensionen konstant bleibt. Die im vorigen Abschnitt gezeigte Berechnung der photonischen Bandstruktur vereinfacht sich, weil nur eine eindimensionale Blochfunktion angesetzt werden muß. Die Moden können daher folgendermaßen dargestellt werden:

$$\vec{E}_{n,k_z,\vec{k}_{\parallel}} = e^{i\vec{k}_{\parallel} \cdot \vec{\rho}} \left(e^{ik_z z} \vec{u}_{n,k_z,\vec{k}_{\parallel}} \right) \quad (2.17)$$

$\vec{k}_{\parallel} = \begin{bmatrix} k_x \\ k_y \end{bmatrix}$ und $\vec{\rho} = \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}$ stellen dabei Wellenvektor und Ortsvektor innerhalb der Schichtebene

dar. Für Moden, die entlang der z-Richtung durch den Kristall laufen ($\vec{k}_{\parallel} = 0$), vereinfacht sich die Formel zur reinen z-abhängigen Blochfunktion. Die Dispersionsrelation für diesen Fall ist in Abb. 2.2 dargestellt.

Der Wellenvektor k_z auf der Abszisse läuft vom Koordinatenursprung des reziproken Gitters bis zu $\frac{\pi}{a}$, der Grenze der eindimensionalen Brillouin-Zone. An der Brillouinzonengrenze kommt es zur Öffnung von photonischen Bandlücken. Elektromagnetische Wellen mit einer Frequenz innerhalb dieser Bandlücken können sich nicht entlang der z-Achse im 1D-photonischen Kristall ausbreiten. Wenn sie von außen senkrecht auf die Oberfläche der Schichtstruktur auftreffen, werden sie total reflektiert.

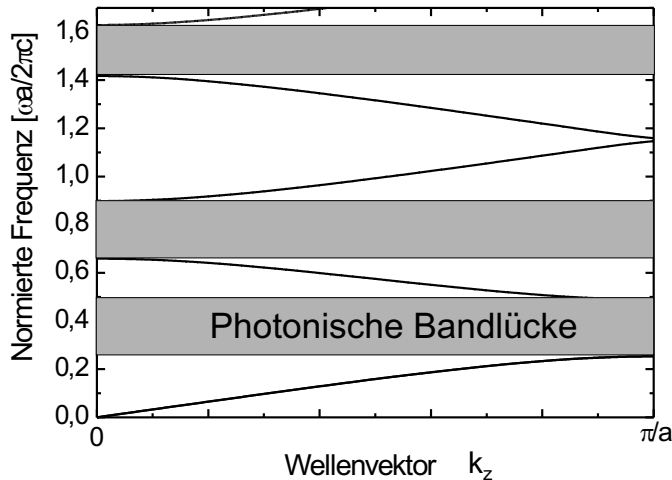


Abbildung 2.2: Bandstruktur für elektromagnetische Wellen, die sich in einem 1D-photonischen Kristall parallel zur z -Richtung (Stapelrichtung) ausbreiten. Die schwarzen Linien stellen die photonischen Bänder dar und die grauen Bereiche die photonischen Bandlücken. Die Dicke der Schichten mit $\varepsilon=11,7$ beträgt $0,11a$ (a Periode der Schichtfolge), während die Dicke der Schichten mit $\varepsilon=1$ $0,89a$ beträgt [Bandstrukturrechnung von C. Jamois].

Die physikalische Ursache für die photonischen Bandlücken liegt in der Braggreflexion. Entspricht ein ganzzahliges Vielfaches der Wellenlänge gerade der doppelten Schichtperiode ($m\lambda = 2a$), so kommt es zur konstruktiven Interferenz der von den Grenzflächen zurückreflektierten Wellen. Interferenztotalreflexion tritt auf. Für $\vec{k} = \frac{\pi}{a}$ ist die Bragg-Bedingung ($m\lambda = 2a$) gerade erfüllt, so bildet sich im photonischen Kristall eine stehende Welle aus. Für die Position der Schwingungsbäuche des elektrischen Feldes der elektromagnetischen Welle gibt es dabei zwei Möglichkeiten (Abb. 2.3). Entweder sie befinden sich in den Niedrigindex- oder den Hochindexschichten. Im ersten Fall konzentriert sich die Intensität in den Regionen mit niedrigem ε , im zweiten Fall in Regionen mit hohem ε . Diese unterschiedliche Feldverteilung führt zu den unterschiedlichen Frequenzen der beiden stehenden Wellen. Für eine Feldkonzentration im Hochindexgebiet ergibt sich eine niedrigere Frequenz als für die stehende Welle, deren E-Feld in der Niedrigindexschicht konzentriert ist. Für Frequenzen dazwischen existieren keine Moden im photonischen Kristall. In diesem Bereich befindet sich die photonische Bandlücke.

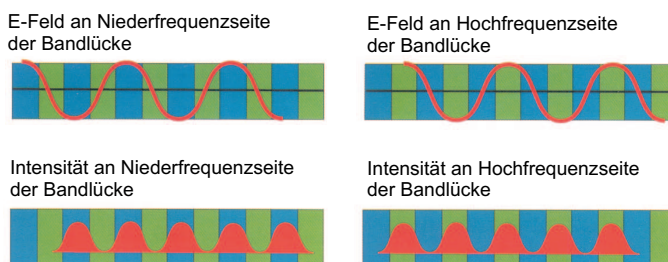


Abbildung 2.3: Feldverteilung der Moden an den Bandkanten der fundamentalen photonischen Bandlücke in einem 1D-photonischen Kristall. Blau: Material mit hohem Brechungsindex, grün: Material mit niedrigem Brechungsindex (nach [16]).

Der experimentelle Nachweis der Bandlücke kann durch Reflexions- und Transmissionsmessungen erfolgen. Die Reflektivität R für die Lichtfrequenzen innerhalb der Bandlücke für senkrechten Einfall muß nahe $R=1$ sein (exakt 1 wäre nur im Falle eines photonischen Kristalls mit unendlich vielen Perioden und verschwindender Absorption möglich), während die Transmission T nahe $T=0$ liegen muß.

Ist der Einfallswinkel $\alpha \neq 0$, so ist zwischen s(TE)- und p(TM)-Polarisation der einfallenden Strahlung zu unterscheiden. Die photonischen Bandstrukturen für diese beiden Polarisationen sind in Abb. 2.4 u. 2.5 zu sehen. Auf der Abszisse ist die k_{\parallel} -Komponente des Wellenvektors aufgetragen, die parallel zur Oberfläche der Schichten liegt. Die Bandlücken werden durch die weißen Bereiche repräsentiert, die zwischen den grauen Bändern liegen.

Trifft eine elektromagnetische Welle unter einem Winkel α auf die Oberfläche des photonischen Kristalls auf, so müssen die Stetigkeitsbedingungen der E- und H-Felder an der Grenzfläche zwischen zwei Medien beachtet werden, die aus den Maxwell'schen Gleichungen folgen. Diese manifestieren sich u.a. in der Erhaltung der Frequenz ω und der Komponente k_{\parallel} des Wellenvektors beim Übergang der

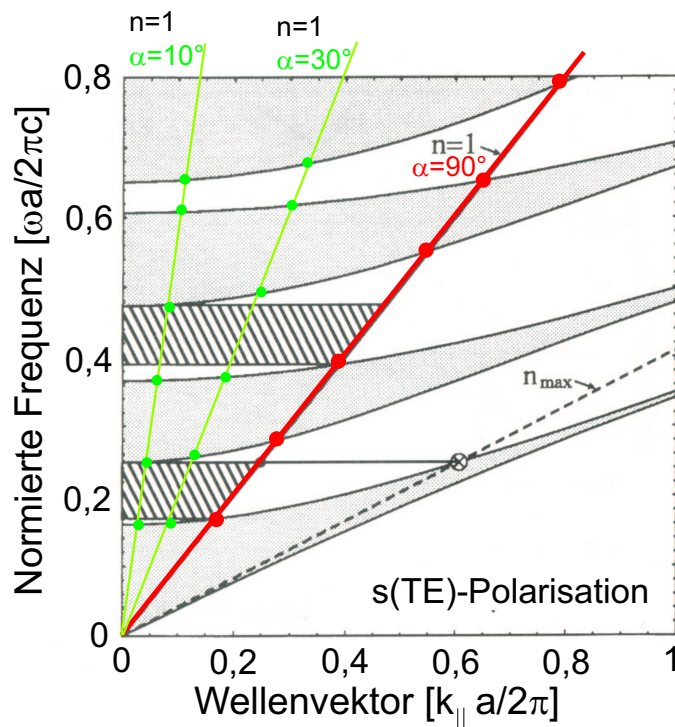


Abbildung 2.4: Photonische Bandstruktur der s(TE)-Polarisation für einen 1D-photonischen Kristall bestehend aus zwei Materialien mit den Brechungsindizes $n_1 = 1, 4$; $n_2 = 3, 4$. Die Dicken der Schichten betragen $d_1 = d_2 = \frac{a}{2}$ ($a = d_1 + d_2$). Die grauen Bereiche repräsentieren die Bereiche der photonischen Bänder, während die weißen Bereiche den Bandlücken entsprechen. Für den Fall, daß die Umgebung Luft oder Vakuum ist ($n=1$), wurden die Einfallsgewinkel für verschiedene Winkel farblich eingezeichnet. Die schraffierten Bereiche repräsentieren die spektralen Bereiche der omnidirektionalen Totalreflexion für diese Polarisation. Die Linie für n_{max} entspricht dem maximal möglichen Brechungsindex der Umgebung, um gerade noch omnidirektionale Totalreflexion in einem kleinen Spektralbereich für diese Polarisation zu erhalten (nach [17]).

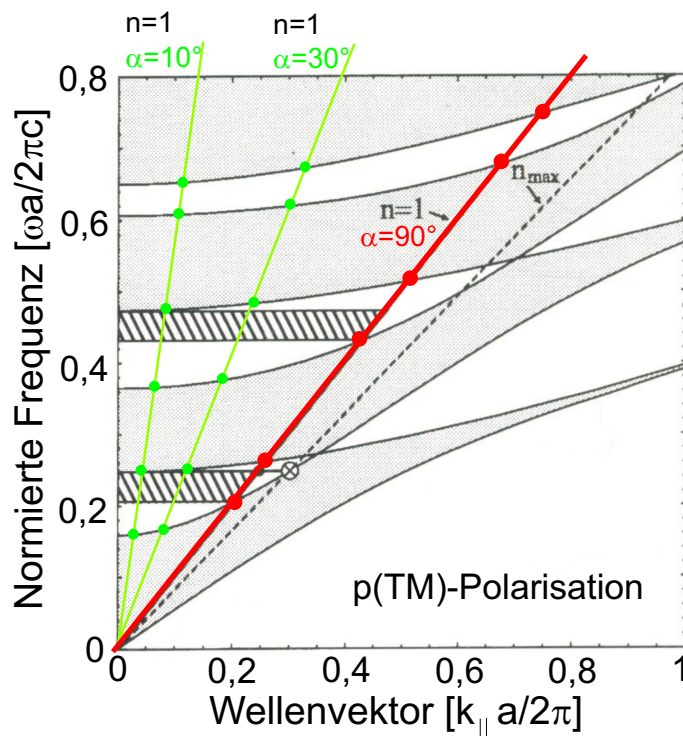


Abbildung 2.5: Photonische Bandstruktur der p(TM)-Polarisation für einen 1D-photonischen Kristall. Alle Parameter wie in Abb. 2.4 (nach [17]).

Welle vom umgebenden Medium (z.B. Luft, Vakuum) in den photonischen Kristall. Es breitet sich also nur dann eine Welle im photonischen Kristall aus, wenn ω und k_{\parallel} der einfallenden Welle mit mindestens einer Mode des photonischen Kristalls übereinstimmen. In Vakuum oder Luft gilt:

$$k_{\parallel} = |k_0| \sin \alpha = \frac{\omega}{c} \sin \alpha \quad (2.18)$$

Bei konstantem Einfallswinkel α ergibt diese Beziehung einen linearen Zusammenhang zwischen k_{\parallel} und ω . Das wird in Abb. 2.4 und 2.5 durch die farbigen "Einfallsggeraden" für einige Werte von α dargestellt. Eine unter einem Winkel α einfallende Welle mit einer Frequenz ω wird durch einen Punkt auf einer solchen Einfallsggeraden repräsentiert. Deckt sich dieser Punkt nun mit einer Mode im Bandstrukturdiagramm des photonischen Kristalls, so sind die Stetigkeitsbedingungen für ω und k_{\parallel} erfüllt, und eine Welle kann sich im photonischen Kristall ausbreiten. In den Frequenzbereichen, wo die Punkte der Einfallsggeraden mit keinen Moden des photonischen Kristalls zusammentreffen, tritt Totalreflexion auf. Diese Bereiche entsprechen Bandlücken (oder Stopbändern) in der gewählten Einfallrichtung. Die Bandstruktur für die entsprechenden Einfallswinkel ergibt sich durch "Abfahren" der Einfallsggeraden. Die Bandkanten für die verschiedenen Einfallrichtungen sind in Abb. 2.4 u. 2.5 als dicke farbige Punkte eingezeichnet. Mit ansteigendem Einfallswinkel α verschieben sie sich zu höheren Frequenzen. Dieses Verhalten ist auch von der Braggbedingung her sofort einzusehen:

$$m\lambda = 2a \sin \theta \quad (2.19)$$

$$m\lambda = 2a \sin(90 - \alpha) = 2a \cos \alpha \quad (2.20)$$

Die Wellenlänge, bei der die Braggreflexion auftritt, verringert sich mit steigendem α .

Der maximale Einfallswinkel beträgt $\alpha=90^\circ$, so daß alle Moden des photonischen Kristalls, die unterhalb dieses "Lichtkegels" liegen, nicht von auf die Oberfläche auftreffender Strahlung angeregt werden können. Diese von außerhalb nicht anregbaren Moden entsprechen gebundenen photonischen Zuständen. Licht, was z.B. innerhalb des photonischen Kristalls erzeugt wurde und dadurch sich innerhalb einer solchen gebundenen Mode ausbreiten kann, bleibt im photonischen Kristall gefangen. Interne Totalreflexion verhindert, daß das Licht an die Umgebung ankoppeln kann.

Omnidirektionaler Reflektor

Im allgemeinen kann man erwarten, daß für starke Kippungen keine Bandlücke mehr existiert, da im Extremfall der Wellenausbreitung innerhalb der Schichtebene ($k_z=0$) die Welle keine periodische Brechzahlvariation in Ausbreitungsrichtung mehr spürt. Allerdings kommt es beim Einfall der elektromagnetischen Wellen von einem Außenmedium mit niedrigerem Brechungsindex auf die Oberfläche des 1D-photonischen Kristalls zur Brechung, so daß selbst bei streifendem Einfall ($\alpha = 90$) der Wellenvektor innerhalb des photonischen Kristalls immer noch eine Komponente in z-Richtung hat (siehe Abb. 2.6). Dadurch spürt die Welle im Kristall immer noch die periodische Brechzahlvariation, und Braggreflexion tritt auf.

Die Frage ist nun, ob es einen Frequenzbereich gibt, in dem für alle Einfallrichtungen Interferenztotreflexion vorliegt. Das entspricht dem Überlappungsbereich der Bandlücken für senkrechten Einfall ($\alpha=0$) und streifenden Einfall ($\alpha=90^\circ$). Dabei muß beachtet werden, daß bei schrägem Einfall ($\alpha \neq 0$) die unterschiedlichen Polarisierungen (s- und p-Polarisation) unterschieden werden müssen. Es ergibt sich jeweils eine eigene Bandstruktur für jede Polarisation. Während für die s-Polarisation die Bandlücken auch für stärkere Kippungen (größere k_y -Werte) weiterexistieren, kommt es in der p-Polarisation zum Verschwinden der Bandlücken bei einer bestimmten Ausbreitungsrichtung der Welle [Abb. 2.5]. Dieses Verschwinden der Bandlücke in der p-Polarisation ist auf den internen Brewsterwinkel α_B zurückzuführen. Fällt eine p-polarisierte elektromagnetische Welle unter dem Brewsterwinkel auf eine Grenzfläche, so wird sie nicht reflektiert. Trifft die p-polarisierte Welle im photonischen Kristall unter dem Brewsterwinkel α_B auf die Grenzfläche zwischen den Medien 1 und 2 auf, so wird damit

die Intensität des von dieser Grenzfläche reflektierten Strahls zu 0. Das trifft auch für alle Grenzflächen 2→1 zu, so daß es im gesamten photonischen Kristall keine reflektierten Wellen gibt. Damit tritt auch keine Braggreflexion auf und die Ursache für die Bandlücke verschwindet.

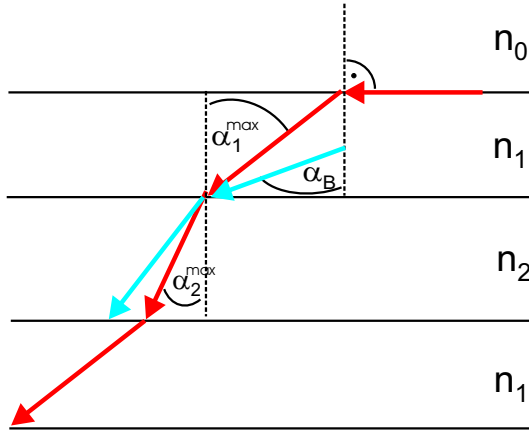


Abbildung 2.6: Winkel für die Wellenausbreitung bei streifendem Einfall. Die internen Brechungswinkel α_1^{\max} und α_2^{\max} sind beide kleiner als der interne Brewsterwinkel α_B (nach [17]).

Um einen omnidirektionalen Reflektor für beide Polarisierungen zu erhalten, muß verhindert werden, daß sich eine von außen auftreffende Welle innerhalb des Kristalls unter dem Brewsterwinkel fortpflanzt. Das wird durch relativ hohe Brechungsindizes n_1 und n_2 erreicht. Selbst für streifenden Einfall ($\alpha=90^\circ$) ist die Brechung an der Oberfläche des photonischen Kristalls dann so stark, daß die internen Brechungswinkel α_1 und α_2 kleiner als der Brewsterwinkel werden (Abb. 2.6). Damit kann von außen nicht an eine Mode angekoppelt werden, deren Welle unter dem Brewsterwinkel auf die internen Grenzflächen trifft. Ein gemeinsamer spektraler Bereich der Interferenztotalexreflexion für alle Einfallswinkel und beide Polarisierungen erscheint möglich. Folgende Rechnung soll das verdeutlichen: Nach dem Brechungsgesetz gilt für die Brechung an der obersten Grenzfläche n_0/n_1 für einen Einfallswinkel $\alpha_0=90^\circ$:

$$\frac{\sin \alpha_0}{\sin \alpha_1} = \frac{1}{\sin \alpha_1} = \frac{n_1}{n_0} \quad (2.21)$$

Für den internen Brewsterwinkel α_B an der Grenzfläche n_1/n_2 ergibt sich:

$$\tan \alpha_B = \frac{n_2}{n_1} \quad (2.22)$$

Damit omnidirektionale Totalreflexion auftreten kann, muß

$$\sin \alpha_B \geq \sin \alpha_1 \quad (2.23)$$

gelten. Mit (2.21) und (2.22) folgt daraus:

$$\frac{n_2 \cos \alpha_B}{n_1} \geq \frac{n_0}{n_1} \quad (2.24)$$

Verwendet man noch die Beziehung

$$\cos \alpha_B = \sqrt{1 - \sin^2 \alpha_B} \leq \sqrt{1 - \sin^2 \alpha_1} = \sqrt{1 - \left(\frac{n_0}{n_1}\right)^2}, \quad (2.25)$$

so folgt mit (2.24):

$$n_2 \cdot \sqrt{1 - \left(\frac{n_0}{n_1}\right)^2} \geq n_0. \quad (2.26)$$

Für das Außenmedium Luft ist $n_0=1$ und damit gilt als Mindestanforderung für omnidirektionale Totalreflexion:

$$1 \geq \frac{1}{n_1^2} + \frac{1}{n_2^2} \quad (2.27)$$

Gleichung (2.27) stellt allerdings nur eine notwendige Bedingung für das Auftreten eines Bereiches omnidirektionaler Totalreflexion dar. Sie läßt sich durch genügend hohe Brechungsindizes n_1 und n_2 immer erfüllen. Um wirklich in einem Spektralbereich omnidirektionale Totalreflexion beobachten zu können, muß auch noch der Brechungsindexkontrast $\Delta n = n_1 - n_2$ groß genug sein, damit eine ausreichend breite Bandlücke entsteht.

Tatsächlich kann ein solcher Fall einer omnidirektionalen Totalreflexion erreicht werden:

In Abb. 2.4 u. 2.5 sind die omnidirektionalen Reflexionsbereiche für beide Polarisationen getrennt eingezeichnet. Es ist deutlich zu sehen, daß der spektrale Totalreflexionsbereich für die p-Polarisation kleiner als für die s-Polarisation ist. Der Grund dafür ist das Zusammenlaufen der Bandkanten am internen Brewsterwinkel. Die Oberkanten der omnidirektionalen Totalreflexionsbereiche für s- und p-Polarisation sind gleich, da sie durch die untere Bandkante des 2. Bandes bei senkrechtem Einfall ($\alpha = 0$) bestimmt werden. Daher begrenzt der omnidirektionale Totalreflexionsbereich für die p-Polarisation den gemeinsamen omnidirektionale Totalreflexionsbereich beider Polarisationen. Ob und in welchem spektralen Bereich ein 1D-photonischer Kristall ein omnidirektionaler Reflektor für alle Polarisationen darstellt, hängt also von der Bandstruktur für die p-Polarisation ab.

Chigrin et al. haben in [17] eine gründliche theoretische Untersuchung des omnidirektionalen Reflektors vorgenommen. Die Existenz und die spektrale Breite des polarisationsunabhängigen omnidirektionalen Totalreflexionsbereichs wurden in Abhängigkeit von Brechungsindexverhältnis $\frac{n_2}{n_1}$, Füllfaktor $\frac{d_2}{a}$ und vom Brechungsindex n_0 der Umgebung dargestellt. Zusammengefaßt läßt sich ein polarisationsunabhängiger omnidirektionaler Reflektor herstellen, wenn die folgenden Kriterien erfüllt werden:

1. Hoher Brechungsindexkontrast, damit ein weites Bandgap entsteht und der interne Brewsterwinkel bei relativ großen Winkeln liegt.
2. Hoher Brechungsindex der Materialien 1 und 2 des photonischen Kristalls, damit starke Brechung an der Oberfläche auftritt, so daß die Lichtlinie über der Brewsterwinkel-Linie liegt.

2.4 2D-photonische Kristalle

Bei 2D-photonischen Kristallen variiert der Brechungsindex innerhalb einer Ebene (x,y-Ebene). In der 3. Dimension ist der Brechungsindex homogen. Ideale 2D-photonische Kristalle bestehen daher aus periodischen Anordnungen von unendlich langen dielektrischen Stäben oder Poren. Das elektrische Feld \vec{E} in einer solchen 2D-periodischen Struktur läßt sich als Produkt aus einer 2D-Blochwelle und einer ebenen Welle entlang der homogenen z-Richtung beschreiben.

$$\vec{E}_{n,k_z,\vec{k}_{\parallel}} = \left(e^{i\vec{k}_{\parallel} \cdot \vec{\rho}} \vec{u}_{n,k_z,\vec{k}_{\parallel}} \right) e^{ik_z \cdot z} \quad (2.28)$$

Aufgrund der unendlich homogenen Ausdehnung der Struktur in z-Richtung stellt jede Ebene, die parallel zur x,y-Ebene ist, eine Spiegelebene dar. Aus diesem Grund lassen sich die elektromagnetischen Wellen, deren Wellenvektor in der x,y-Ebene liegt ($k_z=0$), in E- und H-polarisierte Moden unterteilen [16]. Für E-polarisierte Moden ist das \vec{E} -Feld parallel zur Porenachse (z-Richtung) gerichtet, während für die H-Polarisation das \vec{H} -Feld parallel zur z-Achse ausgerichtet ist. Für beide Polarisationen ergibt sich eine eigene Bandstruktur, die Bandlücken aufweisen kann. Eine vollständige 2D-Bandlücke tritt aber nur auf, wenn die Bandlücken von E- und H-Polarisation in einem bestimmten Spektralbereich überlappen. Elektromagnetische Wellen mit einer Frequenz innerhalb dieser kompletten 2D-Bandlücke können sich dann nicht im 2D-photonischen Kristall parallel zur x,y-Ebene ausbreiten. Falls eine solche

Welle auf den photonischen Kristall auftrifft, wird sie wie im Falle des 1D-photonischen Kristalls total reflektiert. In Abb.2.7 ist ein Beispiel für eine 2D Bandstruktur gezeigt.

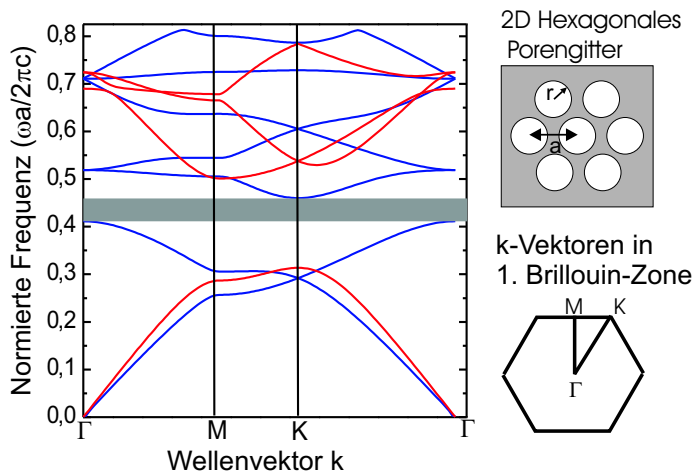


Abbildung 2.7: Bandstrukturrechnung für Moden mit k-Vektoren in der Periodizitätsebene für den Fall eines 2D-hexagonalen photonischen Kristalls bestehend aus Luftporen in einer Matrix mit $n_{\text{Matrix}} = 3,4$. Das $\frac{r}{a}$ -Verhältnis beträgt $\frac{r}{a} = 0,45$. Rot: H-polarisierte Moden, blau: E-polarisierte Moden [Bandstrukturrechnung von R. Hillebrand].

Der Rechnung liegt ein 2D-hexagonales Gitter aus runden Luftporen ($\epsilon_{\text{Luft}} = 1$) in einer Matrix mit dem Brechungsindex $n_{\text{Matrix}} = 3,4$ zugrunde. Für das gewählte Verhältnis aus Radius der Luftporen r zu Gitterkonstante a von $\frac{r}{a} = 0,45$ tritt eine komplette 2D-Bandlücke auf. Sie ist durch den grauen Balken gekennzeichnet. Wie theoretische und experimentelle Untersuchungen gezeigt haben, hängt die Größe der kompletten Bandlücke ähnlich wie bei 1D-photonischen Kristallen stark vom Brechungsindexkontrast ab. Theoretisch wurde ein Brechungsindexkontrast von $\frac{n_2}{n_1} = 2,7$ bestimmt, der mindestens notwendig ist, um eine komplette 2D-Bandlücke in einer 2D-hexagonalen Porenstruktur zu erreichen [18]. Außerdem beeinflusst der Füllfaktor der Struktur (repräsentiert durch das $\frac{r}{a}$ -Verhältnis) die Lage und die Größe der Bandlücke für beide Polarisationen. Wie in [15] gezeigt wurde, tritt erst für Füllkoeffizienten $\frac{r}{a} \geq 0,4$ eine vollständige 2D-Bandlücke auf. Sie erreicht für $\frac{r}{a} = 0,48$ die maximale Ausdehnung von $\frac{\Delta\omega}{\omega_{\text{centr}}} = 16\%$.

Bei der bisherigen Diskussion wurden nur die Moden betrachtet, die sich in der x,y-Ebene ausbreiten ($k_z = 0$). Für Wellen, deren Ausbreitungsrichtung nicht in der x,y-Ebene liegt ($k_z \neq 0$, sogenannte "off-plane"-Moden), kann eine Unterteilung in E- und H-Polarisation nicht vorgenommen werden. Für diese Moden kommt es zur Mischung der beiden Polarisationen.

Um die theoretischen Vorhersagen über 2D-photonische Kristalle zu verifizieren, ist die experimentelle Untersuchung von 2D-periodischen Porenstrukturen mit großen Aspektverhältnissen (Verhältnis aus Porenlänge zu Porendurchmesser) nötig. Die hohen Aspektverhältnisse bilden die Grundlage dafür, daß solche Strukturen in guter Näherung als ideale 2D-photonische Kristalle gelten können. Theoretisch konnte nachgewiesen werden, daß für ein Aspektverhältnis größer als 20 ein 2D-photonischer Kristall vorliegt [19]. Für den Bereich der Mikrowellen ist die Herstellung solcher Strukturen relativ einfach, da in diesem Falle die photonischen Kristalle durch Bohren von Löchern mit Durchmessern im mm-Bereich [18] bzw. durch Anordnen von dielektrischen Stäben ähnlicher Größe erreicht werden können. Für den Bereich der infraroten Wellenlängen stellt das in dieser Arbeit behandelte makroporöse Silizium eines der wenigen Systeme dar, die aufgrund des hohen Aspektverhältnisses (100-400) als ideale 2D-photonische Kristalle angesehen werden können [12].

Ein Nachteil der 2D-photonischen Kristalle besteht darin, daß Moden, deren Wellenvektoren eine k_z -Komponente besitzen nicht im photonischen Kristall geführt werden. Das Licht verläßt den photonischen Kristall nach einer gewissen Zeit. Eine vielversprechende Lösung dieses Problems sind 2D-periodische Sandwichstrukturen (sogenannte „slab“-Strukturen). Sie bestehen im allgemeinen aus 3 Schichten, wobei die mittlere („core“) einen höheren Brechungsindex hat als die darüber- bzw. darunterliegenden Schichten („claddings“). Zumindest die mittlere Schicht ist mit einem 2D-Porengitter versehen. Im Gegensatz zu makroporösem Silizium, wo versucht wird, durch relativ hohe Aspektver-

hältnisse den Zustand eines idealen 2D-Kristalls möglichst gut zu approximieren, werden bei diesen Strukturen absichtlich sehr flache Poren (Aspektverhältnis ≤ 1) angestrebt. Durch den niedrigeren Brechungsindex der „cladding“-Schichten kommt es zur Ausbildung von photonischen Zuständen, die im „core“ gebunden sind. Eine Ankopplung an die photonischen Zustände des umgebenden Mediums („claddings“) ist aufgrund von interner Totalreflexion nicht möglich. Auf diese Weise läßt sich die Ausbreitung der elektromagnetischen Welle auf die x,y-Ebene einschränken. Allerdings ist für die Berechnung der Dispersionsrelation dieser Strukturen der schichtartige Aufbau in z-Richtung zu berücksichtigen. Die Wellenausbreitung in der x,y-Ebene kann nicht mehr durch eine 2-dimensionale Wellengleichung beschrieben und die Moden nicht mehr in reine E- und H-polarisierte Moden unterteilt werden. Eine aufwendigere Rechnung, die alle 3 Raumrichtungen beinhaltet, ist nötig [20].

Ein besonderes Beispiel für eine solche Sandwich-Struktur zeigt Abb. 2.8. Dabei handelt es sich um eine sogenannte „airbridge“-Struktur. Das „core“ wird von einer dünnen Silizium-Schicht gebildet, in die durch einen Trockenätzprozeß ein periodisches Porengitter geätzt wurde. Die Bereiche oberhalb und unterhalb der durchlöcherten Siliziumschicht („claddings“) werden von der Luft selbst gebildet. Dadurch wird ein höchstmöglicher Brechungsindexkontrast zwischen „core“ und „cladding“ erreicht.

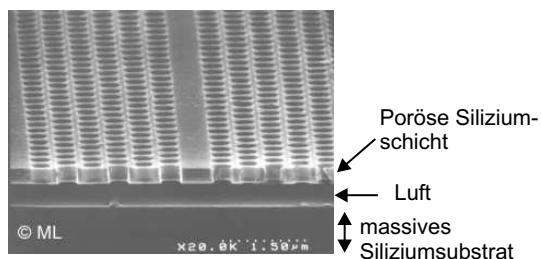


Abbildung 2.8: Spezialfall für eine Sandwichstruktur, bei der die beiden „claddings“ von der umgebenden Luft selbst gebildet werden (sogenannte „airbridge“-Struktur) (nach [21]).

2.5 3D-photonische Kristalle

In 3D-photonischen Kristallen variiert der Brechungsindex in allen drei Raumrichtungen periodisch. Es kommt zu einer Mischung der Polarisierungen der elektromagnetischen Wellen aufgrund von Mehrfachstreuung.

Von Anfang an galt das Interesse an 3D-photonischen Kristallen dem Finden einer vollständigen 3D-photonischen Bandlücke. In diesem Spektralbereich ist die Ausbreitung von elektromagnetischen Wellen im photonischen Kristall vollkommen verboten. Die photonische Zustandsdichte ist Null. Damit eröffnet sich die Möglichkeit zur Manipulation von Licht in allen drei Dimensionen.

Allerdings stellt die experimentelle Realisierung eines 3D-photonischen Kristalls mit einer vollständigen 3D-Bandlücke ein Problem dar. Einerseits kommen nur einige spezielle Kristallstrukturen in Frage, deren Herstellung schwierig ist. Andererseits muß noch ein hoher Brechungsindexkontrast in der Struktur erzielt werden, um eine vollständige 3D Bandlücke zu erzeugen. Dennoch gibt es einige experimentell realisierte Beispiele für 3D-photonische Kristalle, die eine vollständige 3D-Bandlücke aufweisen.

Die meisten basieren auf der Diamantstruktur, da für diese Struktur eine breite Bandlücke zwischen dem zweiten und dritten Band auftritt [22]. In Abb. 2.9 ist das Prinzip des „Yablonoviten“ dargestellt. Bei dieser Struktur werden im Winkel von 120° an definierten Stellen in drei verschiedenen Richtungen Löcher in ein dielektrisches Material gebohrt. Diese Bohrlöcher schneiden sich und der entstehende Kristall hat die Diamantstruktur. Ein solcher Kristall wurde zuerst für den Bereich der Mikrowellen erzeugt [5]. Inzwischen gibt es aber auch Versuche, eine solche Struktur zu miniaturisieren und für photonische Kristalle mit Bandlücken im IR anzuwenden. Eine Möglichkeit ist die Verwendung von Röntgenstrahlolithographie. Dazu wird eine Lochmaske auf eine dicke Schicht Photolack aufgelegt und dann mit einem kollimierten Röntgenstrahl aus drei verschiedenen Richtungen durch diese Lochmaske

hindurchgestrahlt. Die vom Röntgenstrahl belichteten Bereiche können im Entwicklungsprozeß herausgelöst werden und entsprechen den gebohrten Kanälen in der ursprünglichen Yablonovite-Struktur. Allerdings ist eine vollständige 3D-Bandlücke noch nicht demonstriert worden, da der Brechungsindexkontrast zwischen Luft und Photolack zu niedrig ist [23]. Andere Versuche, die Yablonovite-Struktur zu miniaturisieren basieren auf der Verwendung von makroporösem Silizium und werden in Kapitel 6 beschrieben [24, 25].

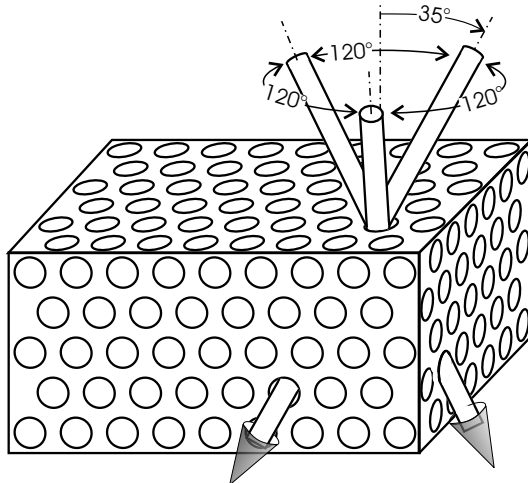


Abbildung 2.9: Herstellung der Struktur eines Yablonoviten (schematisch) [5].

Als weiteres interessantes Beispiel für einen 3D-photonischen Kristall sei hier die Herstellung mittels 3D-Interferenzlithographie erwähnt [26]. Dazu wird eine dicke Schicht aus Photolack auf ein Substrat aufgebracht. Danach werden vier oder mehr Laserstrahlen, die eine feste Phasenbeziehung zueinander aufweisen, so auf den Lack gerichtet, daß sie sich unter bestimmten Winkeln kreuzen. Die Interferenz dieser Laserstrahlen führt zu einem 3D-periodischen Gitter aus Intensitätsmaxima und -minima im Photolack. In dem nachfolgenden Entwicklungsschritt werden (im Falle eines Positivlacks) die stark belichteten Regionen (Bereiche der vorherigen Intensitätsmaxima) des Photolacks herausgelöst. Damit entsteht ein 3D-photonischer Kristall aus Photolack und Luft. Als Vorteil ergibt sich eine sehr schnelle Herstellung von Strukturen mit perfekter Periodizität. Die Gitterkonstante und die Struktur des photonischen Kristalls sind durch Wahl der Einstrahlwinkel der Laserstrahlen und durch die Wellenlänge der Laser beeinflussbar. Problematisch ist dagegen die Schwächung der Laserstrahlen in größeren Tiefen des Photolacks durch die Absorption der darüberliegenden Lackbereiche. Tiefere Bereiche werden nicht mehr so stark belichtet und im Entwicklungsprozeß nicht so stark aufgelöst. Dadurch kann der Füllfaktor mit der Tiefe der Struktur variieren. Außerdem konnte mit den bisherigen Strukturen noch keine vollständige 3D-Bandlücke erreicht werden, da der Brechungsindexkontrast zwischen Photolack und Luft zu gering war. Die Einbringung von Defekten in diese Kristalle wurde bisher auch noch nicht demonstriert.

Ein weiteres Beispiel für einen 3D-Kristall mit vollständiger 3D Bandlücke stellt die sogenannte "Lincoln-Log-Struktur" dar. Sie besteht aus einem Stapel von dielektrischen Stäben (Abb. 2.10) und wurde ebenfalls zuerst mit Bandlücken im Bereich der Mikrowellen hergestellt [27, 28].

Auch dieser Kristall hat die Symmetrie der Diamantstruktur. Eine Miniaturisierung der Struktur für den IR-Bereich ist durch vielfache Anwendung von planaren Strukturierungsmethoden [29] oder durch mehrfaches Waferbonden [30] möglich. Da die Struktur nach und nach schichtweise aufgebaut wird, können in jeder Schicht definierte Defekte eingebaut werden [31]. Dadurch eignet sich diese Struktur besonders gut zur Untersuchung von Defekten in 3D-photonischen Kristallen. Andererseits ist die Herstellung der Struktur durch die Vielzahl der Herstellungsschritte aufwendig. Besonders die Ausrichtung der einzelnen Schichten zueinander (korrekte Stapelung der Stäbe) stellt eine technologische Heraus-

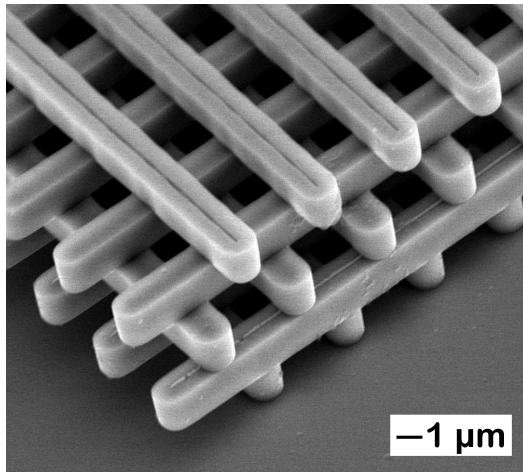


Abbildung 2.10: Beispiel für eine "Lincoln-log"-Struktur aus geschichteten Silizium-Stäben [29].

forderung dar. Trotz dieser Probleme konnte mit dieser Struktur eine vollständige 3D-Bandlücke für eine Wellenlänge von $1,5\mu\text{m}$ erreicht werden.

Daneben wird von mehreren Gruppen die Herstellung von künstlichen Opalen betrieben. Dabei sedimentieren z.B. SiO_2 -Kugeln aus einer Lösung und bilden eine dichte Kugelpackung. Unter besonderen Bedingungen kann eine ABC-Schichtung erreicht werden, was einer fcc-Struktur entspricht. Der große Vorteil dieses Verfahrens beruht darauf, daß keine aufwendigen Strukturierungsschritte notwendig sind, sondern daß der photonische Kristall praktisch "von alleine" durch Selbstorganisation wächst. Allerdings entstehen häufig Stapelfehler, Korngrenzen oder andere ungewollte Defekte während des Wachstums. Die Perfektionierung der Kristalle z.B. durch speziell geformte Substrate, die eine bestimmte Geometrie der ersten aufwachsenden Monolage vorgeben, wird daher weiter vorangetrieben. Der durch Sedimentation entstandene Kristall weist aber noch keine vollständige 3D-Bandlücke auf. Um das zu erreichen, muß ein sogenannter invertierter Opal hergestellt werden:

Dazu wird die Struktur gesintert, so daß die SiO_2 -Kugeln miteinander fest verbunden werden. Mit einem CVD-Prozeß kann dann ein Material mit einem hohen Brechungsindex (z.B. Silizium) in die Zwischenräume zwischen den Kugeln abgeschieden werden. Danach können die SiO_2 -Kugeln chemisch mittels HF herausgelöst werden, so daß nur noch das fragile Skelett des abgeschiedenen Hochindexmaterials übrig bleibt. Wie in [32] gezeigt wurde, besitzt eine solche Struktur dann eine vollständige 3D-Bandlücke. Ein Nachteil der Struktur ist, daß die gezielte Einbringung von Defekten aufgrund der Selbstorganisation der SiO_2 -Kugeln nur schwer möglich sein wird.

Kürzlich ist eine Struktur aus regelmäßig angeordneten Spiralen vorgeschlagen worden, die durch schräges Aufdampfen eines Materials unter gleichzeitiger Drehung des Substrates hergestellt werden kann [33]. Die Struktur besitzt tetragonale Symmetrie, und Bandstrukturrechnungen sagen eine photonische Bandlücke mit einer spektralen Breite von bis zu $\frac{\Delta\omega}{\omega} = 24\%$ voraus. Experimentell wurde die Bandlücke allerdings noch nicht nachgewiesen.

Zusammenfassend kann festgehalten werden, daß bereits verschiedene Strukturen und Herstellungsverfahren entwickelt wurden, um 3D-photonische Kristalle zu realisieren. Vollständige 3D-Bandlücken konnten basierend auf der Diamantstruktur (Yablonovite, Lincoln-Log) und einem invertierten fcc-Gitter (invertierter Opal) realisiert werden. Generell stellt die streng periodische Ausdehnung der Kristalle in die 3. Dimension ein Problem dar. Daneben weisen die Strukturen aber auch spezifische Probleme auf. Die Verfahren, die relativ einfach großflächige 3D-Kristalle liefern (Yablonovite, Opale, Interferenzlithographie), erlauben kaum die Einbringung von Defekten. Dagegen lassen sich in die Lincoln-Log-Struktur zwar leicht Defekte einbauen, der schichtweise Aufbau einer in Stapelrichtung ausgedehnten photonischen Kristallstruktur ist aber besonders für diese Struktur sehr aufwendig.

Aufgrund dieser Probleme ist die Suche nach alternativen Herstellungsverfahren für 3D-photonische Kristalle sinnvoll. Das Ziel ist die Herstellung eines in alle drei Raumrichtungen ausgedehnten 3D-photonischen Kristalls mit vollständiger 3D-Bandlücke im nahen Infrarot. Dabei ist zu beachten, daß im allgemeinen ein hoher Brechungsindexkontrast für das Auftreten einer 3D-photonischen Bandlücke nötig ist. Das schränkt die Wahl der Materialien stark ein.

3 Elektrochemisches Ätzen von Silizium

3.1 Einführung

Für das Auftreten von breiten photonischen Bandlücken ist ein hoher Brechungsindexkontrast zwischen den Materialien eines photonischen Kristalls nötig. Die Materialkombination Silizium/Luft erfüllt diese Bedingung auf vorzügliche Weise. In einem weiten Spektralbereich, der vom fernen Infrarot bis zu einer Wellenlänge von $1,1\mu\text{m}$ reicht, ist Silizium transparent und besitzt einen Brechungsindex von ca. $n_{\text{Si}}=3,4$. In Kombination mit Luft ergibt sich damit ein Brechungsindexkontrast von $\frac{n_{\text{Si}}}{n_{\text{Luft}}}=3,4$. V. Lehmann und H. Föll zeigten, daß mittels photoelektrochemischen Ätzens in Flußsäure (HF) ausgedehnte 2D-periodische Porenfelder in Silizium erzeugt werden können [10, 11]. Die Gitterkonstante lag dabei im μm -Bereich, und die 2D-Gitterstruktur wurde durch einen Vorstrukturierungsprozeß vorgegeben. Die Arbeiten von U. Grüning und A. Birner zeigten, daß solche 2D-hexagonale Porengitter aus makroporösem Silizium einen 2D-photonischen Kristall mit vollständiger Bandlücke im fernen Infrarot [13] und mittleren Infrarot [14, 15] darstellen.

Die in dieser Arbeit beschriebenen photonischen Kristalle aus makroporösem Silizium sind durch denselben photoelektrochemischen Ätzprozeß selbst hergestellt worden. Im folgenden wird daher eine Einführung in das elektrochemische Ätzen von Silizium gegeben.

3.2 Elektrochemisches Verhalten von Silizium in Flußsäure

Während Silizium sich in wässrigen alkalischen Ätzlösungen chemisch leicht auflösen läßt, ist es gegenüber einem Ätzangriff durch wässrige Säuren sehr resistent. Nur in Verbindung mit Flußsäure (HF) ist eine Auflösung unter Bildung des Komplexes $[\text{SiF}_6]^{2-}$ zu beobachten. Dazu ist die Existenz von Defektelektronen im Valenzband, sogenannten Löchern, an der Siliziumoberfläche nötig. Ein Loch an der Siliziumoberfläche führt zum Bruch einer Bindung eines Siliziumoberflächenatoms. Es wird ionisiert. Das so aktivierte Siliziumoberflächenion gibt weitere 3 Elektronen ab und bildet unter Anlagerung von F^- -Ionen den $[\text{SiF}_6]^{2-}$ -Komplex.

Wird Silizium in Kontakt mit wässriger Flußsäure (Elektrolyt) gebracht, so kommt es zu einem Angleich der elektrochemischen Potentiale an der Oberfläche des Siliziums. Dazu sammelt sich in einer Raumladungszone innerhalb des Siliziums an der Grenzfläche Si/HF eine Überschußladung Q in Form von ionisierten Dotieratomen an. Dieser steht auf der Elektrolytseite der Si/HF-Grenzfläche eine entgegengesetzte Ladung $-Q$ in einer elektrolytischen Doppelschicht gegenüber. Da in moderat bis hoch konzentrierten Elektrolytlösungen eine viel höhere Ladungsträgerkonzentration vorliegt als im Silizium, ist die Ladung auf der Elektrolytseite auf eine sehr dünne Schicht im Bereich 2-3nm begrenzt, während die Dicke der Raumladungszone im Silizium für moderate bis niedrige Dotierungen im μm Bereich liegt. Das gesamte elektrische Potential, das durch die Ladung Q in der Siliziumraumladungszone und der elektrolytischen Doppelschicht entsteht, fällt daher innerhalb des Siliziums ab. Auf der Elektrolytseite ist der Potentialabfall im allgemeinen vernachlässigbar. Mit dem Potentialabfall in der Raumladungszone des Siliziums ist eine Bandverbiegung an der Grenzfläche Si/HF innerhalb des Siliziums verbunden [Abb. 3.1]. Für p-typ Silizium sind Valenz- und Leitungsband an der Si/HF-Grenzfläche zu niedrigeren Elektronenenergien (nach unten) gekrümmt. Die Siliziumoberfläche ist daher an Löchern verarmt. Für n-typ Silizium sind die Bänder dagegen zu höheren Elektronenenergien (nach oben) gekrümmt. Die Siliziumoberfläche ist an Leitungsbandelektronen verarmt. Damit ähnelt

die Grenzfläche Si/HF einem Schottky-Kontakt, wobei der Elektrolyt das Metall repräsentiert und Silizium den Halbleiter bildet. Das elektrochemische Verhalten des Si/HF-Kontaktes kann daher in einem gewissen Spannungsbereich sehr gut mit der Diodenkennlinie einer Schottky-Diode verglichen werden. Das soll am Beispiel einer p-typ Siliziumelektrode gezeigt werden.

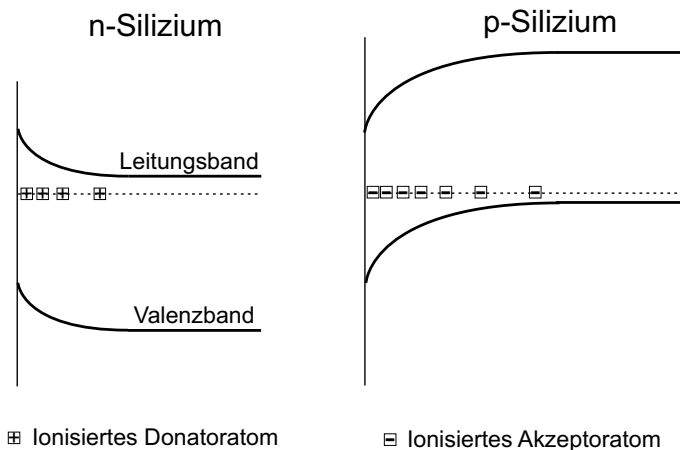


Abbildung 3.1: Bandverbiegung innerhalb des Siliziums bei Kontakt mit der Flußsäure. Es herrscht elektrochemisches Gleichgewicht. Der Nettotransfer an Ladungen über die Grenzfläche ist 0 (entspricht der Leerlaufspannung U_{oc} in der I-U-Kennlinie).

Dazu wird das mit HF in Kontakt gebrachte p-typ Silizium als Arbeitselektrode verwendet, während ein Platindraht die Gegenelektrode im HF-Elektrolyten bildet. Um die Einflüsse des Potentialabfalls im Elektrolyten und der nichtlinearen Strom/Spannungskennlinie am Pt/HF-Kontakt auf die Messung zu eliminieren, wird das Potential im Elektrolyten über eine Referenzelektrode abgegriffen. Als Referenzelektrode wurde eine Ag/AgCl-Elektrode benutzt. Der Meßaufbau entsprach damit einer Dreipunktmessung. Verändert man das elektrische Potential an der Silizium-Arbeitselektrode von negativen zu positiven Werten, so ergibt sich die in Abb. 3.2 gezeigte Strom-Spannungskennlinie - ein sogenanntes Voltammogramm.

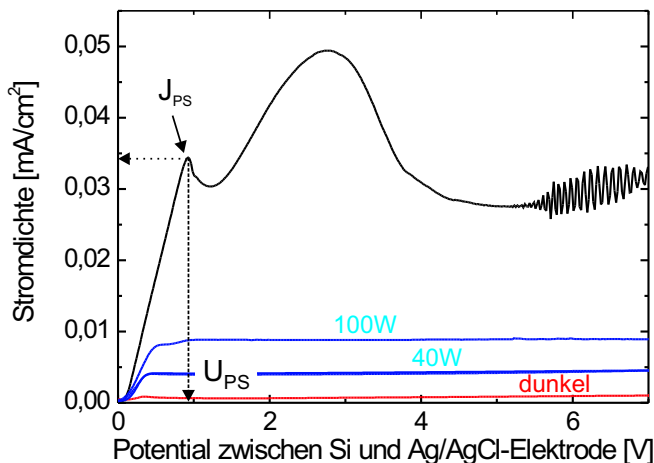


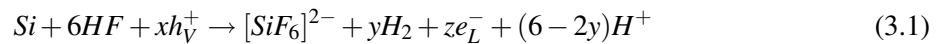
Abbildung 3.2: I-U-Kennlinie für p-typ Silizium und n-typ Silizium in HF für den anodischen Bereich. Schwarz: p-typ Silizium im Dunkeln, rot: n-typ Silizium im Dunkeln, blau: n-typ Silizium bei verschiedenen Beleuchtungsstärken der Waferrückseite. Die blauen Zahlen geben die Leistung der Lampe an.

Die charakteristische Kurve für p-typ Silizium ist durch das Ineinandergreifen von verschiedenen physikalischen und chemischen Prozessen beim Ladungstransfer über die Grenzfläche Si/HF zu erklären:

Im kathodischen Spannungsbereich herrscht negatives Potential an der Siliziumelektrode. Damit vergrößert sich die Bandverbiegung an der Oberfläche. Die Verarmung an Löchern verstärkt sich. Die Schottky-Diode, die den Si/HF-Kontakt repräsentiert, ist in Sperrichtung gepolt. Nur ein kleiner Sperrstrom von thermisch generierten Leitungsbandelektronen fließt. Diese führen an der Si/HF-Grenzfläche zur Reduktion von H^+ -Ionen. Wasserstoff entsteht. Steigt das Potential in anodischer Richtung an, so wird der Strom bei der Leerlaufspannung U_{oc} zu Null. In diesem Fall herrscht elektrochemisches

Gleichgewicht, und die in Abb. 3.1 gezeigten Verhältnisse für die Bandstruktur liegen vor. Bei einem leichten weiteren Anstieg des Potentials erhöht sich der Strom rapide. Das ist aus der Charakteristik der Schottky-Diode erklärbar. Für positive Potentiale verringert sich die Krümmung der Bänder. Dadurch gelangen mehr Löcher an die Siliziumoberfläche. Die Schottky-Diode ist in Durchlaßrichtung gepolt. Diese an die Oberfläche gelangenden Löcher führen zu der bereits beschriebenen Ionisierung von Siliziumoberflächenatomen und letztendlich zu deren Ablösung. Die Siliziumelektrode löst sich auf, sie wird geätzt. Die Auflösungsgeschwindigkeit und der fließende Strom wird durch die Versorgung der Siliziumoberfläche mit Löchern begrenzt.

Während die Notwendigkeit der Löcher für diesen ersten Ionisierungsschritt in der Literatur unbestritten ist, existieren für den weiteren Prozeß der zur Ablösung des einfach positiv geladenen Siliziumoberflächenions führt, mehrere Modellvorstellungen. Sie lassen sich allerdings in der Summenformel [34]

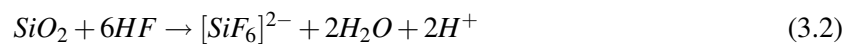


zusammenfassen. Sie beschreibt drei mögliche Wege, wie neutrale Siliziumoberflächenatome 4 Außenelektronen abgeben können und als $[SiF_6]^{2-}$ -Komplex in Lösung gehen.

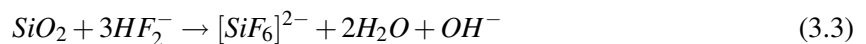
1. Eine Anzahl von x Löchern (xh_V^+) im Valenzband gelangen an die Oberfläche und werden von einem Siliziumoberflächenatom eingefangen. Da für die Initiierung des Ablöseprozesses eines Siliziumatoms mindestens 1 Loch nötig ist, gilt $x \geq 1$.
2. z Elektronen des Siliziumoberflächenatoms werden in das Leitungsband injiziert (ze_L^-).
3. 2y Elektronen des Siliziumoberflächenatoms gehen auf H^+ -Ionen über, so daß diese zu H reduziert werden und als gasförmiger Wasserstoff im Elektrolyten entweichen.

Alle drei Prozesse können auch parallel ablaufen, wobei die Gewichtung der einzelnen Prozesse von mehreren Faktoren wie z.B. pH-Wert, Siliziumdotierung und Elektrodenpotential der Siliziumelektrode abhängen. Wegen der Ladungsträgererhaltung muß immer $4 = x + 2y + z$ gelten.

Bei einer bestimmten Spannung U_{PS} erreicht die Strom-Spannungskennlinie ein lokales Maximum bei einer Stromdichte J_{PS} . Der weitere Verlauf der I-U Kennlinie kann nicht mehr alleine durch das Schottkymodell erklärt werden. Für $U > U_{PS}$ führen chemische Prozesse zur Strombegrenzung. Es wird die Bildung einer Oxidschicht beobachtet. Dabei werden pro abgeätztem Siliziumatom 4 Löcher verbraucht. Die Oxidschicht wird durch die Flußsäure über



oder



abhängig vom pH-Wert rein chemisch aufgelöst [34]. Für die Reaktion besteht ein dynamisches Gleichgewicht aus elektrochemischer Oxidbildung und chemischer Auflösung. Die Auflösung der Siliziumelektrode geschieht damit indirekt über die Zwischenstation der Oxidbildung. In diesem Fall ist der fließende Strom durch die Auflösungsgeschwindigkeit des Oxids begrenzt und hängt damit vom Antransport der F^- -Ionen bzw. HF_2^- -Moleküle im Elektrolyten ab. Dieser Antransport geschieht durch Diffusion. Der Strom ist daher diffusionsbegrenzt. Die Löcher werden nicht sofort bei ihrer Ankunft an der Si/HF-Grenzfläche für den Ätzprozeß verbraucht, sondern diffundieren an der Elektrodenoberfläche entlang und gelangen so in alle Unebenheiten der Siliziumelektrode. Die gesamte Oberfläche wird oxidiert. Erhöhungen werden von der HF schneller weggeätzt als Vertiefungen, da an ersteren die HF besser angreifen kann. Die Oberfläche wird eingeebnet - sie wird elektropoliert. Bei noch höheren anodischen Spannungen ($U > 6V$) treten häufig Oszillationen in der I-U-Kennlinie auf [35, 36].

Betrachtet man den Fall der unbeleuchteten n-typ Siliziumelektrode, ergibt sich eine umgekehrte I-U-Kennlinie: Im kathodischen Spannungsbereich kommt es zu einem exponentiellen Anstieg des Stroms, da in diesem Fall der Si/HF-Schottky Kontakt in Durchlaßrichtung gepolt ist. Die Bandverbiegung verringert sich, und es kommt zu einem starken Anstieg der Oberflächenkonzentration an Elektronen, da diese nun Majoritätsträger im Silizium sind. Ebenso wie im p-Si ist der Strom im kathodischen Spannungsbereich mit der Reduktion von H^+ zu H verbunden. Wird die n-Siliziumelektrode dagegen anodisch gepolt, kommt es zu einer Verstärkung der Bandverbiegung an der Oberfläche der Siliziumelektrode. Der Schottky-Kontakt ist in Sperrichtung gepolt und nur ein geringer Dunkelstrom fließt. Erst bei hohen anodischen Spannungen U , die U_{durch} übersteigen, kommt es zum Durchbruch. Die Stromdichte steigt dann steil an.

Bei der bisherigen Diskussion wurde die Siliziumelektrode im Dunkeln gehalten. Dadurch ergab sich eine eindeutige Strom-Spannungsbeziehung. Wird die Si-Elektrode mit Licht, das eine Energie größer als 1,1eV hat, beleuchtet, so werden durch die Absorption im Silizium Elektronen-Loch-Paare erzeugt. Wie bei einer Photodiode treten dadurch Photoströme auf. In Durchlaßrichtung bildet der Photostrom nur einen kleinen Beitrag zum Gesamtstrom und spielt daher keine Rolle. In der Sperrichtung stellt er dagegen fast den gesamten fließenden Strom dar. Das soll kurz am Beispiel der anodisch gepolten n-typ-Siliziumelektrode beschrieben werden:

Gelangen die durch Beleuchtung generierten Ladungsträger in die Raumladungszone des Siliziums an der Si/Elektrolyt-Grenzfläche, so werden Leitungsbandelektronen und Valenzbandloch räumlich durch die Bandverbiegung voneinander getrennt. Für anodische Spannungen sammeln sich die Löcher an der Grenzfläche Si/Elektrolyt, während die generierten Leitungsbandelektronen ins Innere des Siliziums abdriften. Dadurch stehen viele Löcher an der Siliziumoberfläche zur Verfügung, die zur Siliziumauflösung beitragen können. Es fließt ein Photostrom in Sperrichtung. Für niedrige Beleuchtungsstärken bleibt der Photostrom nach einem kurzen Anstieg für kleine anodische Spannungen über einen weiten Spannungsbereich hinweg konstant [Abb. 3.2]. Der Photostrom ist in diesem Fall durch die Versorgung der Grenzfläche Si/HF mit Löchern begrenzt. Eine Erhöhung der Beleuchtungsstärke führt zu verstärkter Generation von Löchern und verursacht damit einen höheren Photostrom. Wird die n-Siliziumelektrode äußerst stark beleuchtet, so daß sich sehr viele Löcher an der Siliziumoberfläche ansammeln, ähnelt die I-U-Kennlinie dem Voltammogramm einer p-Siliziumelektrode [11]. In diesem Fall bestimmt der elektrochemische Auflösungsprozeß des Siliziums den fließenden Photostrom, wie das schon für die p-Siliziumelektrode diskutiert wurde.

Für eine beleuchtete Siliziumelektrode gilt damit keine eindeutige Strom-Spannungscharakteristik mehr. Die Beleuchtungsstärke ist als neuer Parameter hinzugetreten. Dies hat entscheidenden Einfluß auf die Topographie der anodisch geätzten Siliziumelektrode, wie im nächsten Abschnitt gezeigt wird.

3.3 Porenwachstum in Silizium

Ist die über die gesamte Probe fließende globale Stromdichte J geringer als J_{PS} , so tritt bei anodischen Spannungen die Bildung von Poren in der Oberfläche der Siliziumelektrode auf. Das Silizium wird dabei selektiv in bestimmten Regionen weggeätzt, während es in anderen Bereichen stehen bleibt. In der Literatur sind mehrere Porenwachstumsregime abhängig von Dotierung, Stromdichte und Elektrolytkonzentration beschrieben worden. Die entstehenden porösen Siliziumstrukturen werden in nanoporöses (Strukturgröße kleiner als 2nm), mesoporöses ($2\text{nm} < \text{Strukturgröße} < 50\text{nm}$) sowie makroporöses (Strukturgröße $> 50\text{nm}$) Silizium eingeteilt.

Für p-typ Silizium ist der Fall $J < J_{PS}$ nur für Spannungen $U_{oc} < U < U_{PS}$ zu erfüllen. Während die Bildung von nanoporösem Silizium schon lange bekannt ist und aufgrund seiner Lumineszenzeigenschaften gründlich studiert wurde [37], wurden Makroporen in p-typ Silizium erst in den letzten Jahren intensiver untersucht [38, 39, 40]. Es wurde gezeigt, daß die verbleibende Siliziumwanddicke w genau zweimal der Raumladungszonenweite x_{RLZ} entspricht.

Für n-typ Silizium ist die Bedingung $J < J_{PS}$ durch die Wahl der geeigneten Beleuchtungsstärke unabhängig von der Spannung immer erreichbar, solange die Spannung im Bereich $U_{oc} < U < U_{durch}$ bleibt. Im speziellen ist es möglich, daß U im Bereich $U_{PS} < U < U_{durch}$ gewählt wird, während $J < J_{PS}$ gilt. In diesem Parameterbereich ist stabiles Makroporenwachstum seit längerem bekannt [11].

Im Falle der Makroporenbildung muß der Verlauf der Raumladungszone an der Grenzfläche Si/HF betrachtet werden. Im folgenden soll speziell die Entstehung der Makroporen in n-typ Silizium bei Beleuchtung der Probenrückseite und für Spannungen $U_{PS} < U < U_{durch}$ erklärt werden, da dieser Prozeß zur Herstellung der Proben in dieser Arbeit benutzt wurde. Abb. 3.3 veranschaulicht den Prozeß:

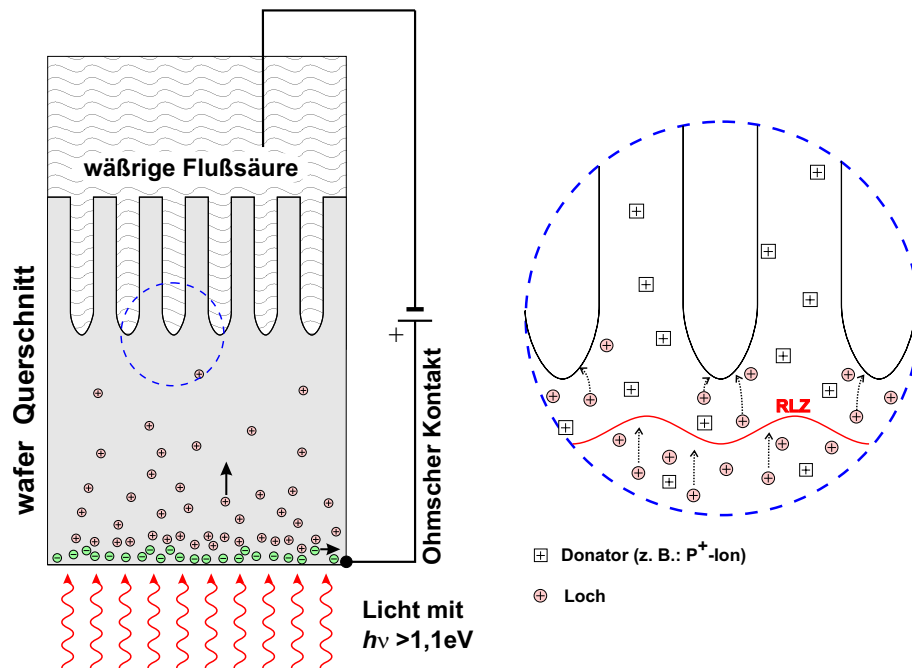


Abbildung 3.3: Ätzung von Makroporen in n-typ Silizium unter Rückseitenbeleuchtung. Die durch Absorption des Lichtes an der Waferrückseite generierten Löcher diffundieren durch den Wafer hindurch zur Ätzfront. Dort werden sie an den Porenspitzen für den Ätzprozeß verbraucht [15].

Der (100)-orientierte n-typ Siliziumwafer wird auf einer Seite mit HF in Kontakt gebracht. Der positive Pol der Spannungsquelle wird an die Rückseite des n-typ Siliziumwafers gelegt (Anode). Der negative Pol bildet in Form eines Platindrahtes in der HF die Kathode. Die Rückseite des Wafers wird mit Licht bestrahlt. Dadurch werden an der Waferrückseite Elektronen vom Valenz- ins Leitungsband gehoben und gleichzeitig Löcher im Valenzband generiert. Die Leitungsbandelektronen werden zum positiven Pol der Spannungsquelle abgesaugt, während die Löcher durch den Wafer hindurchdiffundieren und zur gegenüberliegenden Ätzfront gelangen. Der Verlauf der Raumladungszone (RLZ) an der Grenzfläche Si/HF folgt der Geometrie der Porenspitzen. Die Raumladungszone schmiegt sich der Porenform quasi an. In [41] und [42] wurde gezeigt, daß mit der damit verbundenen Krümmung der Raumladungszone im Bereich der Porenspitze auch eine Reduzierung der Raumladungszonendicke an den Porenspitzen auftritt. Das elektrische Feld ist daher im Bereich der stark gekrümmten Porenspitzen größer als im Bereich der Porenwände. Da die elektrischen Feldlinien senkrecht auf der gekrümmten Porenoberfläche stehen, werden die ankommenden Löcher auf die Porenspitze hin fokussiert. Überlappen die Raumladungszonen von 2 benachbarten Poren, so gehört die gesamte Porenwand zum Bereich der Raumladungszone. Alle ankommenden Löcher werden dann auf die Porenspitzen fokussiert und es gelangen keine Löcher mehr zwischen die Poren in die Porenwand. Die Porenwand ist damit ge-

gen Auflösung geschützt (passiviert) und die Pore wird nur an der Spitze weitergeätzt. Es kommt zum Wachstum der Pore senkrecht in die Tiefe entlang der [100]-Kristallrichtung.

Betrachtet man die äußersten Porenspitzen im Rasterelektronenmikroskop genauer [Abb. 3.4], so erscheinen diese sehr glatt, während an den Flanken der Porenböden und an den Porenwänden eine Rauigkeit zu beobachten ist, die von einer dünnen Schicht nanoporösen Siliziums herrührt.

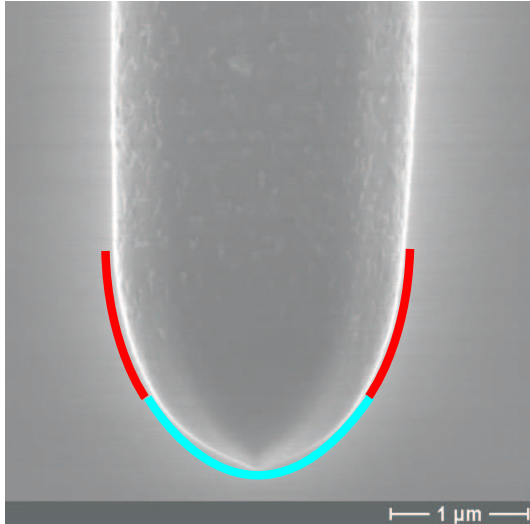


Abbildung 3.4: REM-Detaillaufnahme eines Porenbodens. Der blau markierte Bereich der äußersten Porenspitze erscheint sehr glatt. Hier tritt während des Ätzprozesses Elektropolieren ($J_{\text{norm}} \approx J_{PS}$) auf. Der rot markierte Bereich erscheint rau und besitzt eine nanoporöse Siliziumschicht an der Porenwand. Hier gilt $J_{\text{norm}} < J_{PS}$ (nach [11, 41]).

Die Ursache für das unterschiedliche Erscheinungsbild der Porenoberfläche liegt in der Stromverteilung im Bereich des Porenbodens. Die Krümmung der Raumladungszone ist im Bereich der äußersten Porenspitze am größten, so daß die Raumladungszone dort am dünnsten ist. Daher werden auf diesen Bereich des Porenbodens die meisten Löcher fokussiert. Hier herrscht die höchste lokale Stromdichte J_{norm} . Sie entspricht gerade J_{PS} , so daß es in diesem Bereich zum Elektropolieren kommt. An den seitlichen gekrümmten Flanken ist die Raumladungszone dicker und das elektrische Feld geringer. Es werden weniger Löcher auf diesen Bereich des Porenbodens fokussiert. Die lokale Stromdichte normal zur gekrümmten Porenwand ist kleiner als J_{PS} . Damit tritt in diesem Bereich keine Elektropolitur auf, sondern es bildet sich nanoporöses Silizium.

Damit eine Pore stabil in die Tiefe wächst, muß die Vortriebsgeschwindigkeit in [100]-Richtung in allen Bereichen des Porenbodens gleich sein [Abb. 3.5].

Da an der äußersten Porenspitze die lokale Ätzstromdichte J_{PS} beträgt, ergibt sich daraus die Wachstumsgeschwindigkeit der Pore:

$$v_{[100]} = \frac{J_{PS}}{n_{\text{val}}(-e)N_{Si}} \quad (3.4)$$

Dabei beschreibt N_{Si} die Teilchendichte des Siliziums und n_{val} die Auflösungsvalenz, d.h. wieviele Elektronen im äußeren Stromkreis fließen, um ein Siliziumatom abzulösen. Experimente ergaben $n_{\text{val}} \approx 2,6$ [11]. Um dieselbe Vortriebsgeschwindigkeit in [100]-Richtung auch an den geneigten Flanken des Porenbodens zu erhalten, muß dort eine Ätzgeschwindigkeit

$$v_{\text{norm}} = \cos \theta \cdot v_{[100]} \quad (3.5)$$

senkrecht zur gekrümmten Flanke des Porenbodens wirken. Das ergibt bei Annahme der gleichen Auflösungsvalenz n_{val} eine verringerte Stromdichte J_{norm} in diesem Bereich:

$$J_{\text{norm}} = \cos \theta \cdot J_{PS} \quad (3.6)$$

Damit bildet sich in diesem Bereich des Porenbodens eine nanoporöse Schicht an der Porenwand.

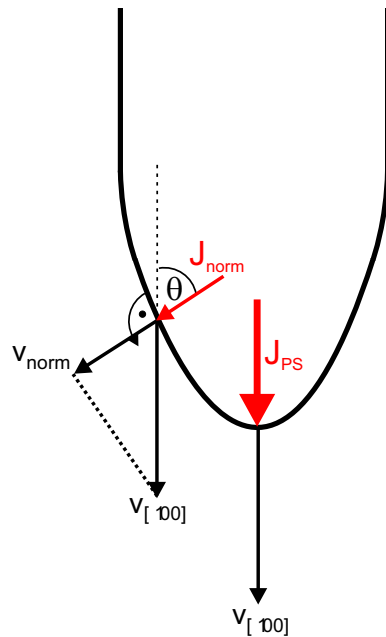


Abbildung 3.5: Porenätzungsgeschwindigkeit und lokale Stromdichte in verschiedenen Bereichen des Porenbodens.

Integriert man (3.6) über die gesamte geätzte Fläche des Porenbodens so erhält man den Ätzstrom pro Pore. Bezieht man diesen auf die Porenquerschnittsfläche, ergibt sich als Stromdichte J_{Pore} in [100]-Richtung der Pore [11]:

$$J_{\text{Pore}} = J_{PS} \quad (3.7)$$

Damit läßt sich auch die Porosität von makroporösen Siliziumschichten herleiten:

Die Porosität ist definiert als Verhältnis aus geätzter Fläche A_{aetz} zu Gesamtfläche A_{ges} ($p = \frac{A_{\text{aetz}}}{A_{\text{ges}}}$). Da die geätzte Fläche gleich der Querschnittsfläche aller Makroporen ist, ergibt sich $A_{\text{aetz}} = \frac{I}{J_{\text{Pore}}}$, wobei I den gesamten über die Probe fließenden Strom repräsentiert. Mit $A_{\text{ges}} = \frac{I}{J}$ und (3.7) gilt dann:

$$p = \frac{J}{J_{PS}} \quad (3.8)$$

Experimentelle Untersuchungen ergaben, daß J_{PS} nur von der Konzentration der HF und der Temperatur abhängt [11]:

$$J_{PS} = 3300 \frac{A}{\text{cm}^2} c^{\frac{3}{2}} e^{\frac{-0,345eV}{kT}} \quad (3.9)$$

(c Konzentration der HF in Gew.%)

Die Ätzgeschwindigkeit kann daher über Konzentration und Temperatur gesteuert werden. Die Beziehung (3.9) kann sich allerdings verändern, wenn Additive, z.B. Äthanol, zum Elektrolyten hinzugegeben werden [43].

Betrachtet man den zeitlichen Ablauf der Makroporenätzung bei Verwendung eines polierten glatten Siliziumwafers, so ist während einer ersten Nukleationsphase die Bildung von vielen kleinen willkürlich angeordneten Makroporen zu beobachten. Im weiteren Verlauf setzen sich dann einige Makroporen auf Kosten der anderen durch - mehrere Poren hören auf zu wachsen, während sich die benachbarten überlebenden Poren verbreitern. Dieser Prozeß geht solange, bis sich eine stabile Konfiguration herausgebildet hat. Dies wurde auch im Falle der Makroporenbildung für p-typ Silizium beobachtet [38]. Die Durchmesser und der mittlere Abstand der überlebenden Makroporen wird durch 2 Bedingungen bestimmt. Zum einen muß (3.8) erfüllt sein, zum anderen entspricht die Dicke der Porenwand w zwischen zwei benachbarten Poren im Mittel der zweifachen Raumladungszonenbreite x_{RLZ} : $w = 2 \cdot x_{RLZ}$. Ist die stabile Konfiguration erreicht, wachsen die Makroporen stabil in die Tiefe. Die Anordnung der

Poren ist aber immer noch amorph. Es bildet sich keine langreichweitige Selbstordnung der Makroporen aus.

3.4 Geordnete Makroporen in n-typ Silizium

Eine langreichweitige Ordnung der Makroporen kann erzwungen werden, indem die Nukleationspunkte der Poren von vornherein vorgegeben werden. Bei den hergestellten Proben wurde das durch Ätzgruben erreicht. Dazu wird der Siliziumwafer zuerst mit einer dünnen Oxidschicht versehen. Danach wird das beabsichtigte Porenmuster durch Photolithographie definiert und das thermische Oxid an den beabsichtigten Porennukleationspunkten weggeätzt. Eine nachfolgende Ätzung in KOH führt dann zu pyramidenförmigen Ätzgruben an den beabsichtigten Porenplätzen. Diese Ätzgruben bilden die Startpunkte für die Makroporen, die im nachfolgenden photoelektrochemischen Ätzprozeß geätzt werden. Wenn die Dotierung des Wafers und das Muster der Makroporen in etwa so aufeinander abgestimmt sind, daß die Bedingung $w = 2 \cdot x_{RLZ}$ erfüllt ist, dann können die Makroporen stabil in die Tiefe geätzt werden. Das Muster und der genaue Abstand der Makroporen wird dann durch die Lithographie bestimmt und kann daher relativ frei gewählt werden. Der Radius der Makroporen hängt dagegen von der mittleren Stromdichte J ab. Da die Porosität der Gleichung (3.8) folgt, gilt für ein 2D-hexagonales Gitter aus kreisrunden Poren:

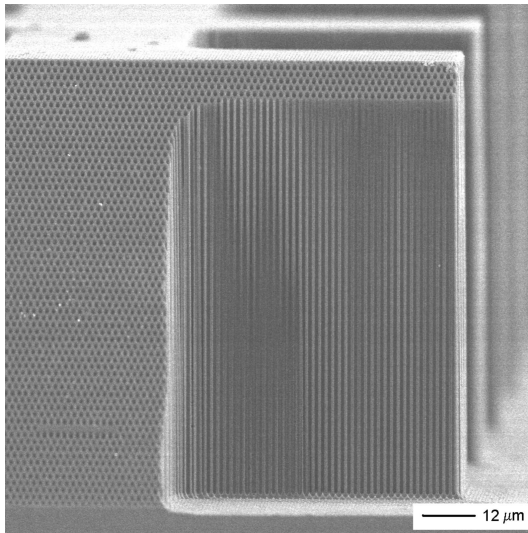


Abbildung 3.6: 2D hexagonales Makroporenfeld mit einer Gitterkonstante $a=1,5\mu\text{m}$. Im linken Teil des Bildes ist ein Schrägschliff der Struktur zu sehen [von A. Birner].

$$p = \frac{A_{\text{Poren}}}{A_{\text{ges}}} = \frac{2}{\sqrt{3}} \pi \left(\frac{r}{a} \right)^2 = \frac{J}{J_{PS}} \quad (3.10)$$

Daraus ist zu erkennen, daß der Porenradius bei gegebenem Porenabstand über

$$r = \sqrt{\frac{\sqrt{3}}{2\pi} \frac{J}{J_{PS}}} a \quad (3.11)$$

direkt von der Ätzstromdichte J abhängt. Hohe Beleuchtungsstärken ergeben hohe Ätzstromdichten J und damit weite Poren. Geringe Beleuchtungsstärken führen zu schmalen Poren. Damit läßt sich der Radius der Makroporen durch die Beleuchtungsstärke kontrollieren. Die Spannung bleibt während des gesamten Ätzprozesses konstant.

Um einen konstanten Porendurchmesser über große Porentiefen hinweg zu realisieren, muß die Konzentrationsabnahme der HF innerhalb der Poren mit zunehmender Porentiefe berücksichtigt werden. Der Stofftransport (Transport von HF und Reaktionsprodukt $[\text{SiF}_6]^{2-}$) innerhalb der Poren erfolgt

allein durch Diffusion. Dadurch kommt es in größeren Tiefen zur Verarmung an Ausgangsstoffen und Anreicherung von Reaktionsprodukten. Die HF-Konzentration an der Porenspitze nimmt ab. Damit sinkt auch der Wert für J_{PS} und die Ätzgeschwindigkeit $v_{[100]}$ bei größeren Tiefen ab (3.9). Um einen konstanten Porendurchmesser beizubehalten, muß die mittlere Stromdichte J während des Ätzprozesses daher reduziert werden. Eine Verringerung der Beleuchtung mit zunehmender Porentiefe ist nötig.

Unter Berücksichtigung aller dieser Bedingungen können hochgradig geordnete Porenfelder hergestellt werden. Das Aspektverhältnis (Verhältnis aus Porenlänge zu Porendurchmesser) liegt dabei standardmäßig bei 100, kann aber auch bis zu 450 betragen. Abb. 3.6 zeigt ein Beispiel für ein 2D hexagonales Porengitter. Diese Strukturen mit einer 2D-Gitterkonstante $a=1,5\mu\text{m}$ und einem Porendurchmesser von ca. $1\mu\text{m}$ bildeten zu Beginn der eigenen Arbeit den Stand der Technik.

4 Experimenteller Aufbau und verwendete Geräte

4.1 Aufbau zum photoelektrochemischen Ätzen von Silizium

Für den photoelektrochemischen Porenätzprozeß wurde eine Durchflußzelle [Abb. 4.1] benutzt. Dabei wurde die Siliziumprobe zwischen zwei Halbzellen eingeklemmt. Die vordere Halbzelle enthielt zwei Öffnungen zum Ein- und Ausstrom der Flußsäure, sowie die Kathode in Form eines Platindrathes. Die hintere Halbzelle ist offen, so daß die Probenrückseite während des Ätzprozesses beleuchtet werden kann. Der positive Pol der Spannungsquelle wird über eine Krokodilklemme an die Siliziumprobe gelegt. Dazu wurde die Probe vorher mit einem ohmschen Kontakt versehen, was entweder durch Einreiben eines InGa-Eutektikums oder durch eine hohe n^+ -Rückseitendotierung erfolgte.

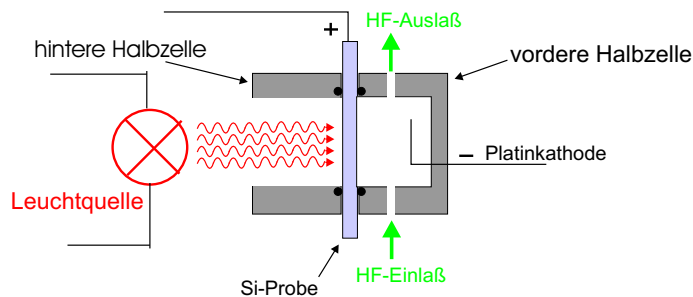


Abbildung 4.1: Verwendete Ätzzelle im Querschnitt.

Die Flußsäure wurde von einer Pumpe in einem Kreislauf durch die Ätzzelle gepumpt. Damit wurde eine konstante Konzentration der HF an der Probenoberfläche sichergestellt. Die Probenrückseite wurde von Licht mit einer Wellenlänge $\lambda \approx 880\text{nm}$ bestrahlt. Für diese Wellenlänge ist die Absorptionslänge im Silizium kurz, so daß das Licht nahe der Probenrückseite vollständig absorbiert wird. Damit dringt kein Licht bis zur Ätzfront (Vorderseite) hindurch. Eine Generation von elektronischen Löchern in den Porenwänden ist daher ausgeschlossen.

Als Spannungsquelle für den elektrochemischen Ätzprozeß wurde ein "Keithley Sourcemeter 2400" verwendet. Die Beleuchtungseinheit wurde von einer Stromquelle (FUG MCN 140-200) versorgt. Die maximale Beleuchtungsstärke war durch den maximal möglichen Strom der Beleuchtungseinheit begrenzt. Dieser Wert setzt eine experimentelle Grenze für die Anzahl an erzeugten Löchern im Silizium.

Der Ätzprozeß wurde mit Hilfe eines Computers überwacht und gesteuert. Damit konnte die Beleuchtung der Probenrückseite zu jedem Zeitpunkt so geregelt werden, daß der nach (3.8) für eine gewünschte Porosität nötige Ätzstrom fließt.

4.2 Fourier-Transformations-Infrarot-Spektrometer

Für die optische Untersuchung der Proben im infraroten Spektralbereich wurde ein Fourier-Transformations-Infrarot-Spektrometer (FTIR) benutzt. Das Kernstück dieses Spektrometers bildet ein Michelson Interferometer [Abb. 4.2].

Das weiße Licht der Quelle trifft dabei auf einen Strahlteiler und wird in zwei Strahlen aufgespalten. Diese Strahlen laufen zu jeweils einem Spiegel, werden dort reflektiert und passieren den Strahlteiler ein zweites Mal. Danach überlagern sich die Strahlen in einer Richtung. Es kommt zur Interferenz.

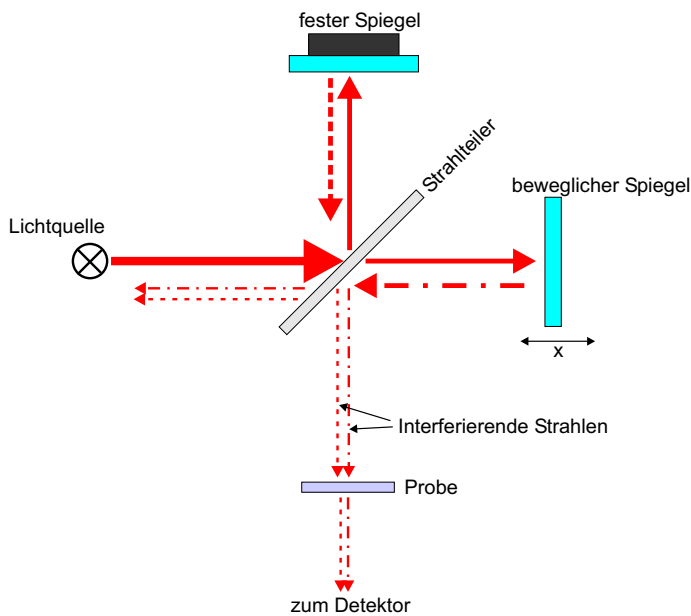


Abbildung 4.2: Michelson Interferometer im FTIR-Spektrometer. Die Lichtstrahlen sind als rote Pfeile gekennzeichnet.

Ein Spiegel des Michelson Interferometers ist fest, während der andere beweglich ist. Dadurch kann eine Veränderung der Weglängendifferenz zwischen beiden Strahlen erreicht werden. Für jede Position x des beweglichen Spiegels ergibt sich damit eine neue Weglängendifferenz Δl der Strahlen. Alle Wellenlängen mit $\Delta l = m\lambda$ interferieren konstruktiv und werden verstärkt, während die Wellenlängen mit $\Delta l = (m + \frac{1}{2})\lambda$ destruktiv interferieren und ausgelöscht werden. Wird der bewegliche Spiegel verfahren, so ändert sich Δl stetig und immer neue Wellenlängen werden verstärkt bzw. ausgelöscht. Im Detektor, der die Intensitäten aller ankommenden Wellenlängen integral mißt, ergibt sich damit ein Intensitätsspektrum in Abhängigkeit von der Spiegelposition x . Bei strenger mathematischer Betrachtung der Interferenz der beiden Strahlen stellt sich heraus, daß dieses Spektrum gerade die Fouriertransformierte des Spektrums im Frequenzraum darstellt. Durch Fourier-Rücktransformation des Spiegelpositionsspektrums im Rechner des Spektrometers wird dann das Spektrum im Frequenzraum erhalten.

4.2.1 Transmissionsmessung

Um ein Transmissionsspektrum der Probe zu messen, wird die Probe im Strahlengang der interferierenden Strahlen plaziert. Das Transmissionsspektrum der Probe wird durch Division des Spektrums mit Probe durch ein Referenzspektrum ohne Probe bestimmt. Für die Messungen im mittleren Infrarot ($\lambda = 20\mu m - 1,5\mu m$) wurde als Lichtquelle ein glühender SiC-Stab ("Globar"), ein Strahlteiler aus KBr und ein stickstoffgekühlter Quecksilber-Kadmium-Tellurid-(MCT)-Detektor verwendet.

4.2.2 Reflexionsmessung mit Infrarotmikroskop

Für die ortsaufgelöste Messung der Reflexion an 2D-photonischen Kristallen wurde das IR-Mikroskop "IR-scope II" von Bruker benutzt. Es ist mit einem FTIR-Spektrometer gekoppelt. Die im FTIR-Spektrometer interferierenden Strahlen werden durch das IR-Mikroskop geleitet und werden mittels eines Spiegelobjektivs [Abb. 4.3] auf die Probe fokussiert.

Der Öffnungswinkel des Objektivs beträgt 30° und bestimmt damit die Divergenz der auf die Probe auftreffenden Strahlen. Durch eine Blende im Strahlengang des Mikroskops können kleine Probenbereiche mit Durchmessern von $50\mu m$ und darunter ausgewählt werden, so daß die Reflexion auf eng begrenzten Probenbereichen gemessen werden kann.

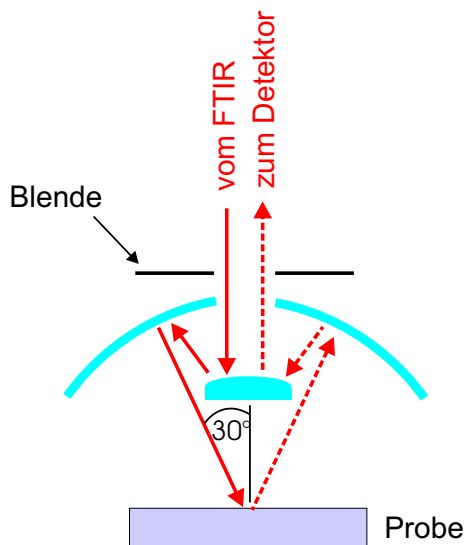


Abbildung 4.3: Cassé-grains-Spiegelobjektiv im IR-Mikroskop. Alle blau gekennzeichneten Flächen stellen Spiegel dar. Der einfallende Lichtstrahl ist als durchgezogener roter Pfeil gezeichnet. Der reflektierte Strahl ist als durchbrochener Pfeil dargestellt.

Das Reflexionsspektrum der Probe ergibt sich durch Division des Spektrums mit Probe durch ein Referenzspektrum mit einem hochreflektierenden Spiegel (z.B. Goldspiegel). Für die Messungen im nahen Infrarot ($\lambda = 2\mu\text{m} - 800\text{nm}$) wurde das Spektrometer mit einer Halogenlampe und einem Quarz-Strahlenteiler ausgerüstet. Als Detektor wurde ein am Mikroskop angebrachter MCT-Detektor verwendet.

5 2D-photonische Kristalle aus makroporösem Silizium

5.1 2D-photonischer Kristall mit fundamentaler Bandlücke im nahen Infrarot

5.1.1 Herstellung

Um einen 2D-photonischen Kristall mit einer vollständigen Bandlücke bei $\lambda=1,3\mu\text{m}$ zu erhalten, wurde als Gitterkonstante des 2D hexagonalen Porengitters $a=0,5\mu\text{m}$ gewählt. Nach Abschnitt 2.4 muß für eine vollständige photonische Bandlücke $\frac{t}{a} > 0,4$ gelten. Damit muß für die Dicke der Siliziumwände $w < 100\text{nm}$ gelten. Allerdings besteht die Möglichkeit, photoelektrochemisch geätzte Poren, die einen geringeren Durchmesser haben, nachträglich durch mehrfache Oxidation und Abätzung des Siliziumdioxids aufzuweiten. Photoelektrochemisch geätzte Porendurchmesser im Bereich 300-400nm können daher angestrebt werden, was $w=100\text{-}200\text{nm}$ entspricht. Da für stabiles Makroporenwachstum die Raumladungszone x_{RLZ} etwa halb so dick wie die Porenwand sein soll, muß x_{RLZ} ca. 100nm betragen. Das bestimmt die Dotierung der zu verwendenden Siliziumsubstrate. Als Probensubstrat wurden daher phosphordotierte (100)-orientierte Siliziumwafer mit einer Dotierungskonzentration von $N_D \approx 10^{17} \text{cm}^{-3}$ und einem spezifischen elektrischen Widerstand von $0,1\Omega \text{cm}$ gewählt. Ist die angelegte Spannung Null, so ergibt sich die Breite der Raumladungszone allein aus dem Flachbandpotential Φ_0 , das die Bandkrümmung im Gleichgewichtsfall beschreibt. Es gilt:

$$\bar{x}_{\text{RLZ}} = \sqrt{\frac{2\varepsilon_{\text{Si}}\varepsilon_0(-\Phi_0)}{qN_D}} \quad (5.1)$$

Für ein Flachbandpotential von $\Phi_0=-0,7\text{V}$ ergibt sich damit eine Raumladungszonenbreite von $\bar{x}_{\text{RLZ}} = 113\text{nm}$. Die hohe Dotierungskonzentration und die dünne Raumladungszone führen zu einer Reduzierung der Durchbruchsspannung. Nach Kapitel 3 ist stabiles Makroporenwachstum aber nur im Spannungsbereich $U_{\text{PS}} < U < U_{\text{durch}}$ möglich. Ist $U > U_{\text{durch}}$, so können Elektronen von den Siliziumoberflächenatomen durch die dünne Raumladungszone ins Leitungsband des dahinterliegenden massiven Siliziums tunneln [41]. Damit ist das Porenwachstum nicht mehr nur an die photogenerateden Löcher gebunden. Es entstehen Durchbruchsporen, so daß von der in [100]-Richtung wachsenden Hauptpore dendritische kleine Seitenporen in die Richtungen $\langle 010 \rangle$ und $\langle 001 \rangle$ abzweigen [42]. Diese erhöhen die Rauigkeit der Porenwände und würden in einem photonischen Kristall zu ungewollter Streuung führen. Durchbruchsporen sind daher möglichst zu vermeiden. Die Ätzspannung sollte deshalb unterhalb der Spannung U_{durch} liegen. Im folgenden soll eine Abschätzung von U_{durch} für $N_D \approx 10^{17} \text{cm}^{-3}$ vorgenommen werden:

Für die Durchbruchsspannung an einer ebenen Grenzfläche \bar{U}_{durch} gilt:

$$\bar{U}_{\text{durch}} = \frac{E_{\text{durch}}}{2} \cdot \bar{x}_{\text{RLZ}} = \frac{E_{\text{durch}}}{2} \sqrt{\frac{2\varepsilon_{\text{Si}}\varepsilon_0(U - \Phi_0)}{qN_D}} \quad (5.2)$$

E_{durch} bezeichnet dabei die Feldstärke an der Grenzfläche Si/HF, für die es zum Durchbruch kommt. Sie beträgt $E_{\text{durch}} = 3 \cdot 10^5 \frac{\text{V}}{\text{cm}}$ [42]. Es folgt:

$$\bar{U}_{\text{durch}} = \frac{E_{\text{durch}}^2}{4} \frac{\epsilon_{\text{Si}} \epsilon_0}{qN_D} \pm \sqrt{\left(\frac{E_{\text{durch}}^2}{4} \frac{\epsilon_{\text{Si}} \epsilon_0}{qN_D} \right)^2 + \frac{2\epsilon_{\text{Si}} \epsilon_0 \Phi_0}{qN_D}} = 3,49\text{V} \quad (5.3)$$

Für Spannungen kleiner als 3,49 V sollte noch kein Durchbruch auftreten. Da die Poren im Bereich der Porenböden aber stark gekrümmt sind, bildet sich dort eine dünnere Raumladungszone aus. Dadurch wird die Durchbruchfeldstärke bereits bei niedrigeren Spannungen erreicht. Nimmt man einen sphärischen Porenboden mit einem Krümmungsradius von 160nm und eine Spannung von 2V an, so beträgt die Feldstärke direkt an der Grenzfläche Si/HF nach [41] bereits $4 \cdot 10^5 \text{V}$ und liegt damit über der Durchbruchfeldstärke. Daran ist zu erkennen, daß Ätzspannungen im Bereich von 2V bereits kritisch sind und Durchbruchsporen auftreten können.

Andererseits ist für stabiles Makroporenwachstum mindestens eine Ätzspannung $U > U_{PS}$ nötig [11]. Nach Abb. 3.2 liegt U_{PS} bei ca. 1V. Das schränkt den zur Verfügung stehenden Spannungsbereich für Makroporenwachstum erheblich ein.

Im Rahmen eines Optimierungsprozesses wurden Proben bei verschiedenen Ätzspannungen U , unterschiedlichen Flußsäurekonzentrationen c_{HF} , Temperaturen T und Stromdichten J hergestellt. Für $c_{HF} = 6\%$, $U=2,8\text{V}$, $T=10^\circ\text{C}$ wurde stabiles Makroporenwachstum erreicht. Es konnten Makroporen bis zu einer Tiefe von $100\mu\text{m}$ geätzt werden. Die Ätzstromdichte J wurde so gewählt, daß der Soll-durchmesser der Poren nach (3.11) mindestens 340nm beträgt. Für geringere Stromdichten wurde das Absterben von einzelnen Makroporen während des Wachstums beobachtet. Die so hergestellten Poren weisen bereits Ansätze zu kleinen dendritischen Seitenporen auf, die von der Hauptpore in die Richtungen $\langle 010 \rangle$ und $\langle 001 \rangle$ abzweigen [Abb. 5.1]. Sie entsprechen Durchbruchsporen.

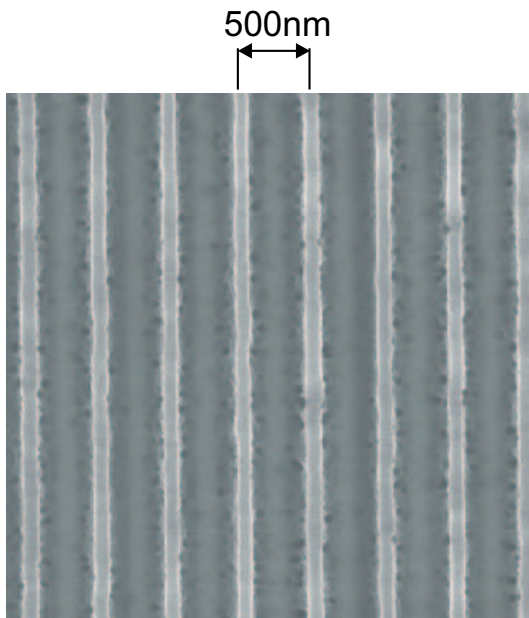


Abbildung 5.1: Betrachtung einer Bruchkante im REM. Innerhalb der Hauptporen treten Ansätze zu kleinen dendritischen Seitenporen auf.

Dies wird experimentell bestätigt, wenn eine Probe ohne Beleuchtung unter Anlegung der Spannung von 2,8V geätzt wird [Abb. 5.2]. Infolge der hohen Spannung kommt es zum Durchbruch, und ein signifikanter Dunkelstrom fließt, der mit zunehmender Ätzzeit ansteigt, da durch die Durchbruchsporenbildung die geätzte Oberfläche zunimmt. Betrachtet man einen Längsschnitt der entstandenen Durchbruchsporen, so sind deutlich die dendritischen Seitenporen zu erkennen.

Im Falle der beleuchteten Probe ist das Wachstum der Makroporen daher gleichzeitig mit der Entstehung von Durchbruchsporen verbunden. Eine signifikante Reduktion der Ätzspannung, um die Durch-

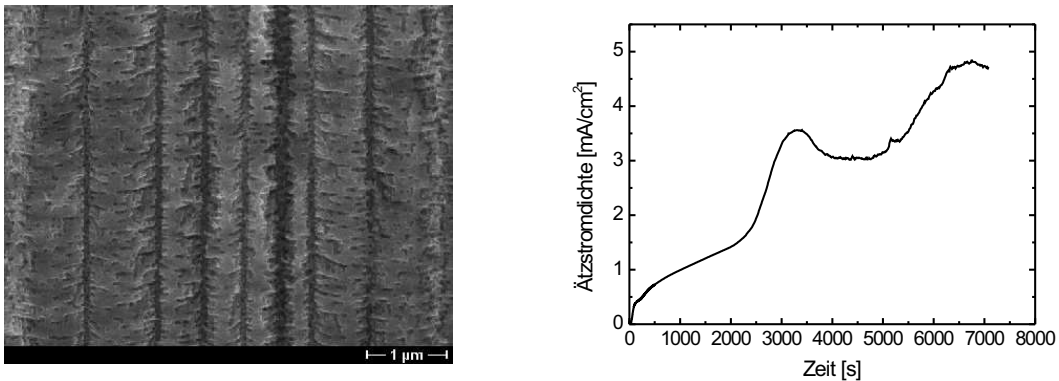


Abbildung 5.2: Links: REM-Längsschnitt von Durchschlagsporen, die sich für $U=2,8V$ im unbeleuchteten Fall ausbilden. Rechts: Ätzstrom während der Ätzung der Durchbruchsporen, Ätzparameter: $c_{HF}=6\%$, $T=10^{\circ}C$, $U=2,8V$.

bruchsporen zu verhindern, ist nicht möglich, da es dann zum Absterben von mehreren Hauptporen kommt.

Eine andere Möglichkeit, die Entstehung der Durchbruchsporen zu reduzieren, ist die Erhöhung der Beleuchtungsstärke und damit der Stromdichte. Dadurch vergrößert sich der Porendurchmesser. Die Raumladungszonen benachbarter Poren überlappen stärker und die Krümmung der Raumladungszone nimmt ab. Damit liegt nur noch an der äußersten Porenspitze eine dünne Raumladungszone vor. Nur dort kann es noch zur Durchbruchsporenbildung kommen. Die Raumladungszone im Bereich der Porenflanken ist dagegen durch den Überlappungseffekt größer [44]. Die Feldstärke ist dort geringer und die Bildung von dendritischen Durchbruchsporen wird reduziert [Abb. 5.3].

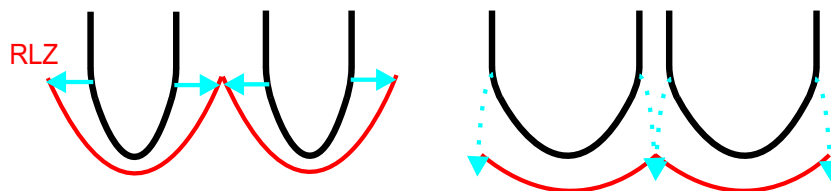


Abbildung 5.3: Reduzierung der Bildung von Durchbruchsporen durch größere Porendurchmesser. Links: Kleine Porendurchmesser. Die Raumladungszone im Bereich der Flanken des Porenbodens ist dünn und die Feldstärke daher hoch. Elektronen können tunneln (blaue Pfeile). Rechts: Durch den größeren Porendurchmesser ist die Krümmung geringer. Die Überlappung der Raumladungszonen führt zu geringeren Feldstärken im Bereich der Flanken der Porenböden. Dadurch wird die Tunnelwahrscheinlichkeit stark verringert.

Durch höhere Stromdichten läßt sich damit die Bildung von Durchbruchsporen reduzieren. Die Porenwände werden glatter [Abb. 5.4].

Um die Porenquerschnitte der in Abb. 5.4 gezeigten Porenstruktur zu untersuchen, wurden die obersten Mikrometer der Poren mit einem Ionenstrahl abgesputtert, da in diesem Bereich die Form der Porenquerschnitte noch durch die aufgeprägten KOH-Ätzgruben bestimmt wurde. Aus Abb. 5.5 ist zu entnehmen, daß auch in größeren Tiefen die Porenquerschnitte nicht kreisrund sind. Sie entsprechen eher abgerundeten Quadraten. Diese Porenform wurde bereits in [10] im Falle höherer Spannungen bzw. höherer Dotierungskonzentrationen beobachtet. Nähert man die Porenquerschnitte als Quadrate, so fallen die Seiten der Quadrate mit den $\{110\}$ -Ebenen des Siliziumsubstrats zusammen. Die Quadratecken bilden sich in den $\langle 010 \rangle$ und $\langle 001 \rangle$ -Richtungen aus. Die Ausrichtung der quadratischen Porenquerschnittsflächen kann durch die Anisotropie der charakteristischen Stromdichte J_{PS} erklärt werden. Sie ist in den $\langle 100 \rangle$ -Richtungen des Siliziumkristalls am höchsten [11], so daß in diesen Richtungen auch

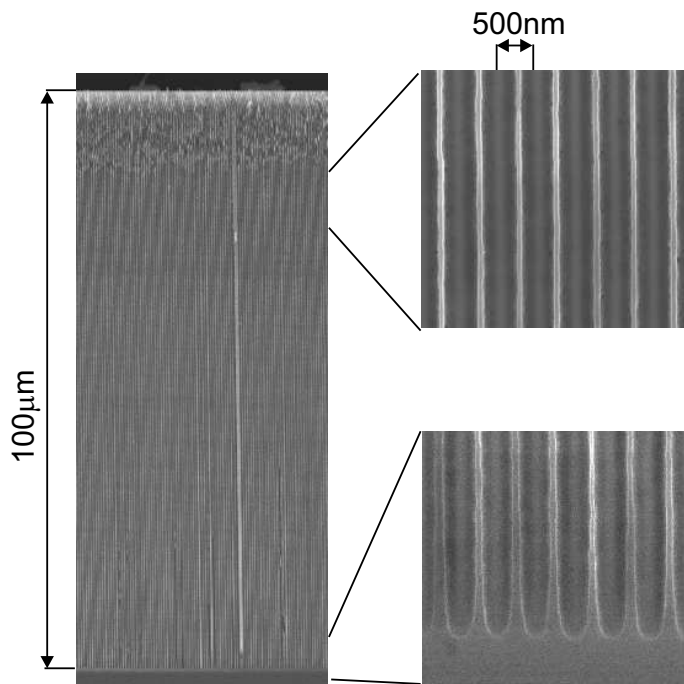


Abbildung 5.4: REM-Längsschnitt von Makroporen unter starker Beleuchtung. Die Porenwände sind sehr dünn. Bildung dendritischer Durchbruchsporen ist vermindert und die Porenwände erscheinen glatter.

eine erhöhte Ätzgeschwindigkeit herrscht. Die Poren wachsen daher auch lateral in diesen Richtungen etwas schneller. Als Folge ergibt sich die abgerundete quadratische Porenquerschnittsform.

Um die Porosität der Probe zu bestimmen, wurde Abb. 5.5 mit Hilfe des Bildverarbeitungsprogramms "NIH-Image" ausgewertet. Durch Vergleich der Flächenanteile von hellen (Siliziumwände)

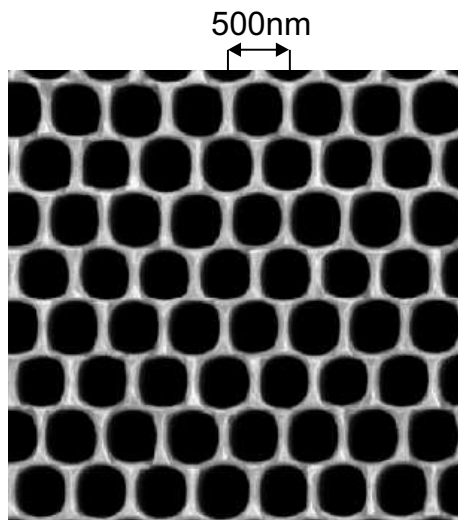


Abbildung 5.5: Porenquerschnitte in der Form abgerundeter Quadrate. Die Seiten der Quadrate sind parallel zu den {110}-Ebenen, während die Ecken in die <010> und <001>-Richtungen weisen.

und dunklen Bereichen (Poren) des Bildes ergab sich eine Porosität $p^{2D} = 0,655$. Im folgenden Abschnitt soll überprüft werden, ob die so hergestellte Porenstruktur einen 2D-photonischen Kristall mit den entsprechenden photonischen Bandlücken darstellt.

5.1.2 Optische Eigenschaften

5.1.2.1 Vorbetrachtungen

Um eine 2D-photonische Bandstruktur für die in Abb. 5.4 gezeigte Probe zu berechnen, werden die Porenquerschnitte als Kreise angenähert. Aus der in Abschnitt 5.1.1 ermittelten Porosität von $p^{2D} =$

0,655 ergibt sich mit (3.10) daher ein $\frac{r}{a}$ -Verhältnis von $\frac{r}{a} = 0,425$ für die Poren. In Abb. 5.6 ist eine 2D-Bandstruktur für diesen Fall gezeigt.

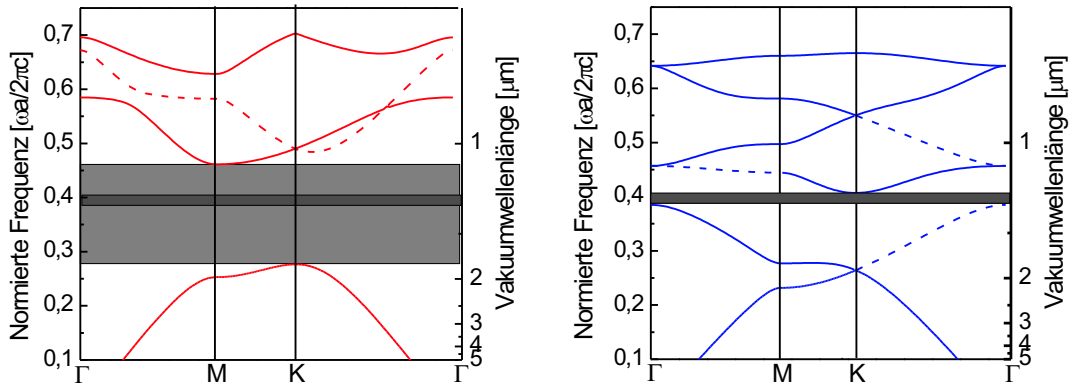


Abbildung 5.6: 2D-photonische Bandstruktur für Luftporen in Silizium ($\frac{r}{a}=0,425$). Rot: H-Polarisation (H-Feld parallel zur Porenachse), blau: E-Polarisation (E-Feld parallel zur Porenachse). Bänder mit asymmetrischer Feldverteilung sind gestrichelt gezeichnet. Sie koppeln nicht an von außen einfallende ebene Wellen an und führen wie Bandlücken zur Totalreflexion. Durchgehende Bandlücken sind als graue Balken gekennzeichnet. Der schmalere dunkle Balken repräsentiert die vollständige photonische Bandlücke für beide Polarisationen [Bandstrukturrechnung von R. Hillebrand].

Für die H-Polarisation existiert zwischen $0,277 < \frac{\omega a}{2\pi c} < 0,461$ eine durchgehende Bandlücke (hellgrauer Balken in Abb. 5.6), während die E-Polarisation eine durchgehende Bandlücke im Bereich $0,385 < \frac{\omega a}{2\pi c} < 0,407$ aufweist. Zusätzlich ist für die E-Polarisation in der Γ -M-Richtung noch eine Bandlücke zwischen $0,232 < \frac{\omega a}{2\pi c} < 0,277$ zu erkennen. Für die Γ -K-Richtung existiert in diesem Bereich aber keine Lücke, da es am K-Punkt zur Entartung der untersten beiden Bänder der E-Polarisation kommt. Da die durchgehende Bandlücke für die E-Polarisation mit der breiten Bandlücke für die H-Polarisation vollständig überlappt, besitzt die Struktur im Spektralbereich $0,385 < \frac{\omega a}{2\pi c} < 0,407$ eine vollständige 2D-Bandlücke für beide Polarisationen (dunkelgrauer Balken in Abb. 5.6). Weitere Bandlücken für die E- und H-Polarisation existieren für Frequenzen $\frac{\omega a}{2\pi c} > 0,5$. Allerdings befänden sich diese bei der vorliegenden Struktur mit der 2D-Gitterkonstante von $a=0,5\mu\text{m}$ alle bei Vakuumwellenlängen, die kleiner als $1,1\mu\text{m}$ sind. In diesem Spektralbereich absorbiert das Silizium bereits, und die Dielektrizitätskonstante $\epsilon_{Si}(\omega)$ wird komplex. Da für die hier gezeigte Bandstrukturrechnung aber nur ein reellwertiges, konstantes $\epsilon_{Si} = 11,7$ angenommen wurde, lassen sich ihre Vorhersagen über Position der Bandlücken für Frequenzen $\frac{\omega a}{2\pi c} > 0,5$ nicht auf die wirkliche Struktur übertragen. Im Spektralbereich $\lambda > 1,1\mu\text{m}$ ($\frac{\omega a}{2\pi c} < 0,45$) kann die Absorption dagegen vernachlässigt werden, so daß die vorliegende Bandstruktur in diesem Spektralbereich die richtigen Positionen der Bandlücken liefern sollte.

Zum experimentellen Nachweis der hier beschriebenen Bandlücken können Reflexions- oder Transmissionsmessungen senkrecht zu den Porenachsen durchgeführt werden. Da im Bereich einer photonischen Bandlücke die Lichtausbreitung verboten ist, verschwindet die Transmission in diesem Frequenzbereich. Licht mit Frequenzen innerhalb der photonischen Bandlücke wird total reflektiert.

Allerdings kann für 2D- und 3D-photonische Kristalle umgekehrt nicht geschlossen werden, daß jeder Bereich, der Totalreflexion bzw. verschwindende Transmission zeigt, auch zu einer photonischen Bandlücke gehört. Es gibt auch photonische Bänder, an die von außen nicht mit einer ebenen Welle angekoppelt werden kann [45]. Dieses Verhalten führt ebenfalls zur Totalreflexion der einfallenden Lichtwellen und die Transmission in diesen Spektralbereichen verschwindet [46, 47]. Der Grund dafür liegt in der asymmetrischen Feldverteilung der Blochmoden, die zu diesen Bändern gehören: Während für die einfallende ebene Welle die elektrische Feldstärke innerhalb der Ebenen senkrecht zur Ausbreitungsrichtung überall gleich ist, kommt es für die asymmetrischen Blochmoden zu einer Variation der

Feldstärke innerhalb der Ebenen senkrecht zum "k"-Vektor der Blochwelle [Abb. 5.7]. Das elektrische Feld der Blochmode ist an einigen Stellen der Ebene positiv, während es an anderen Stellen derselben Ebene negativ ist. Dabei existieren gleich viele Bereiche mit positiver wie mit negativer Feldstärke. Ein auf diese Weise örtlich variierendes Wellenfeld kann durch eine ebene Welle, deren Feldstärke in einer Ebene entweder nur positiv oder nur negativ ist, nicht angeregt werden.

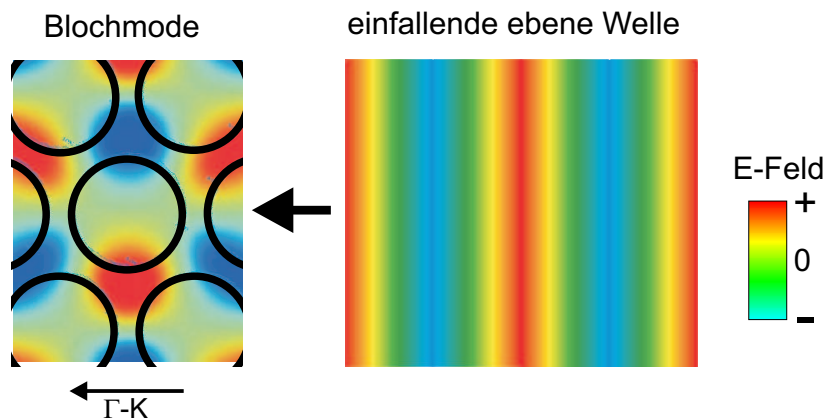


Abbildung 5.7: Links: E-Feld in Richtung der Porenachsen für eine antisymmetrische Blochmode (2. Band der E-Polarisation in Γ -K-Richtung). Rechts: E-Feld einer einfallenden ebenen Welle. Das Feld der Blochmode variiert innerhalb der Ebenen gleicher Phase der ebenen Welle zwischen positiven und negativen Werten. Das Feld der ebenen Welle ist dagegen in den Ebenen gleicher Phase konstant. Eine Ankopplung ist daher nicht möglich [Feldverteilung im Kristall von C. Jamois].

Solche asymmetrischen Bänder sind in der Bandstrukturrechnung gestrichelt gekennzeichnet [Abb. 5.6]. Für die Γ -K-Richtung besitzt das 2. Band eine solche asymmetrische Feldverteilung. In der Γ -M-Richtung besteht dagegen das sehr flach verlaufende 3. Band aus asymmetrischen Blochmoden. In den Spektralbereichen dieser beiden Bänder ist damit Totalreflexion zu erwarten.

Daneben muß beachtet werden, daß die beschriebene Totalreflexion in 2D- und 3D-photonischen Kristallen nicht zwangsläufig eine *spiegelnde* Totalreflexion an der bestrahlten Oberfläche des photonischen Kristalls darstellt. Es handelt sich dabei vielmehr um eine Interferenztotalreflexion, die durch Braggreflexion an den Netzebenen des photonischen Kristalls entsteht. Das zurückreflektierte Licht kann daher auch unter anderen Winkeln als dem Einfallswinkel aus der Oberfläche des photonischen Kristalls wieder austreten [48]. Es kommt zur Beugung [Abb. 5.8]. In der Röntgenbeugung ist diese Situation als asymmetrischer Bragg-Fall bekannt. Umgekehrt bedeutet die Transmission im Bereich eines photonischen Bandes im allgemeinen nicht, daß das gesamte transmittierte Licht senkrecht aus der rückwärtigen Oberfläche austritt. Auch hier kann es zur Beugung in andere Austrittsrichtungen kommen [49]. Das entspricht dem Laue-Fall der Röntgenbeugung.

Die Bedingung für die Entstehung eines gebeugten Strahls im Außenraum des photonischen Kristalls ist, daß die an der Oberfläche des photonischen Kristalls *sichtbare* Periode b der Streuzentren größer oder gleich der Vakuumwellenlänge λ_0 ist [50]. In normierten Frequenzen heißt das: $\frac{\omega a}{2\pi c} \geq \frac{a}{b}$. Das entspricht der Bedingung für das Auftreten der 1. Beugungsordnung bei einem Strichgitter mit dem Spaltabstand b . Soll bei einem 2D-hexagonalen photonischen Kristall eine Messung entlang der Γ -M-Richtung durchgeführt werden, ist die *sichtbare* Periode gleich der 2D-Gitterkonstante a des 2D-hexagonalen Gitters [Abb. 5.8]. Damit kommt es erst bei Frequenzen $\frac{\omega a}{2\pi c} \geq 1$ zur Beugung. Bei einer 2D-Gitterkonstante $a=500\text{nm}$ entspricht das Vakuumwellenlängen $\lambda_0 \leq 500\text{nm}$. Für eine Messung entlang Γ -K beträgt die *sichtbare* Periode $b = \sqrt{3}a$. Damit tritt Beugung für Frequenzen $\frac{\omega a}{2\pi c} \geq 0,577$

auf, was Vakuumwellenlängen $\lambda_0 \leq 866\text{nm}$ entspricht. Für Wellenlängen größer als $\lambda_0=1,1\mu\text{m}$ kommt es daher in beiden Richtungen noch nicht zur Beugung in andere Bragg-Ordnungen. Im Spektralbereich der hier untersuchten fundamentalen Bandlücken der E- und H-Polarisation wird das einfallende Licht daher allein *spiegelnd* reflektiert und das im Spektralbereich der hier betrachteten niederen Bänder transmittierte Licht tritt senkrecht aus der rückwärtigen Oberfläche aus. Prinzipiell lassen sich die photonischen Bandlücken in diesem niederfrequenten Spektralbereich daher einfach nachweisen.

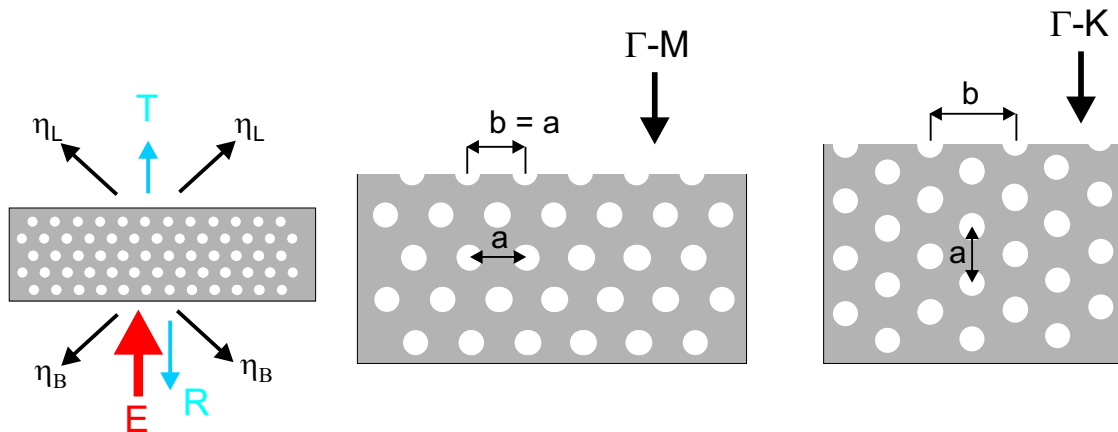


Abbildung 5.8: Beugung an einem photonischen Kristall. Links: Darstellung der im allgemeinen möglichen "optischen Antwort" eines photonischen Kristalls auf eine einfallende Lichtwelle (nach [49]). E= einfallende Welle, R= spiegelnd reflektierte Welle, T=gerade Transmission, η_B = Beugung in Rückwärtsrichtung (Bragg-Fall), η_L = Beugung in Vorwärtsrichtung (Laue-Fall). Mitte und Rechts: "Sichtbare" Periode b an den Kanten des photonischen Kristalls für Messungen entlang Γ -M und Γ -K.

Eine Transmissionsmessung an einem 2D-photonischen Kristall mit einer Gitterkonstante von $a = 0,5 \mu\text{m}$ stellt allerdings von der Seite der Probenpräparation her ein Problem dar. Da die Einstrahlrichtung senkrecht zu den Porenachsen liegt, muß ein schmaler Steg aus der Probe herauspräpariert werden [15], durch den hindurchgestrahlt wird. Die beiden Kanten dieses Steges müssen sehr glatt sein und sollten die Poren auf der gesamten Porentiefe nur innerhalb einer Porenreihe schneiden. Eine schräge oder rauhe Kante, die mehrere Porenreihen schneidet, führt zu verstärkter Oberflächenstreuung des Lichts, so daß an der Eintrittsgrenzfläche effektiv weniger Licht in den photonischen Kristall einkoppelt und an der Austrittsfläche ein großer Teil des transmittierten Lichtes in den gesamten Raumwinkel gestreut wird. Dadurch verringert sich die im Bereich der Bänder gemessene transmittierte Intensität. Die Unterscheidung zwischen den Spektralbereichen der Bänder und Bandlücken wird aufgrund der geringeren Intensität erschwert bzw. unmöglich.

Die Untersuchung der Reflexion eines 2D-photonischen Kristalls ist dagegen von der Seite der Probenpräparation her einfacher. Es ist nur *eine* glatte Kante der Probe erforderlich. Diese kann durch Brechen der Probe erzeugt werden. Im Idealfall verläuft die entstandene Spaltfläche auf einer atomaren (110)-Ebene des Siliziumkristalls. Bei der vorliegenden Probe ist die Porosität allerdings sehr hoch, so daß der Siliziumanteil im Bereich der Poren sehr gering ist. Der Einfluß der kristallinen (110)-Ebene auf die Richtung der Spaltebene ist daher im Porenbereich geringer. Hier läuft die Spaltfläche bevorzugt zwischen nächsten Nachbarporen, so daß die Poren an ihren schmalsten Stellen von der Spaltebene durchschnitten werden. Daher ergeben sich für den Porenbereich besonders entlang der Γ -K-Richtung Bruchkanten hoher Qualität [Abb. 5.4 und 5.13]. Die so entstandenen Grenzflächen bieten einen guten Ausgangspunkt für Reflexionsmessungen entlang der Γ -M-Richtung.

5.1.2.2 Optische Messungen

Für die Reflexionsmessung wurde das in Kapitel 4 beschriebene Infrarotmikroskop verwendet. Als Referenz wurde ein Goldspiegel benutzt.

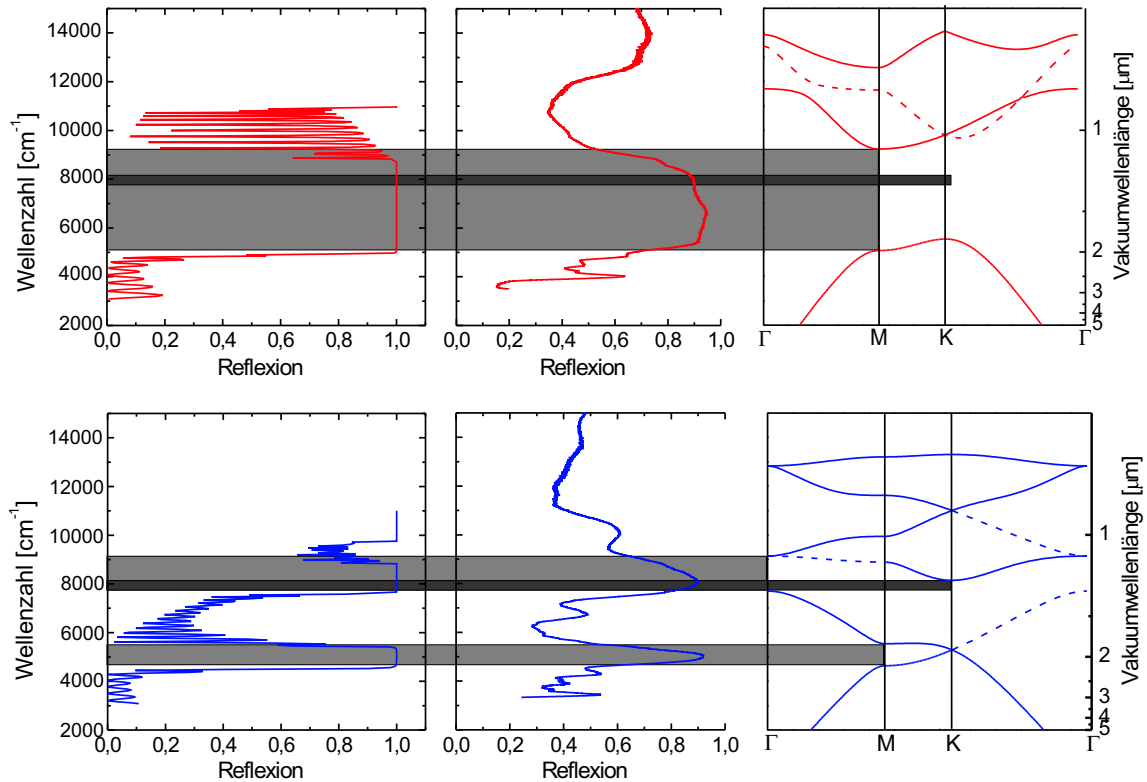


Abbildung 5.9: Reflexion eines 2D-hexagonalen photonischen Kristalls aus Luftporen in Silizium mit $\frac{r_a}{a}=0,425$ in Γ -M-Richtung. Blau: E-Polarisation, rot: H-Polarisation. Links: Reflexionsrechnung für endlichen photonischen Kristall aus 8 Porenreihen. Mitte: Reflexionsmessung an einem halbindefiniten photonischen Kristall. Rechts: Vergleich mit der Bandstruktur. Hellgraue Balken zeigen die Spektralbereiche mit Totalreflexion. Der schmale dunkle Balken bezeichnet die vollständige 2D-photonische Bandlücke bei 8000cm^{-1} ($\lambda_0 = 1,25\mu\text{m}$).

In Abb. 5.9 werden die gemessenen Spektren für die H- und die E-Polarisation mit Bandstrukturrechnungen und Reflexionsrechnungen verglichen. Aus der Bandstruktur können die spektralen Gebiete abgelesen werden, für die Totalreflexion erwartet wird (hellgraue Balken). Sie ergeben sich durch die Bereiche der Bandlücken. Das 3. Band der E-Polarisation in Γ -M-Richtung besitzt zudem noch eine antisymmetrische Feldverteilung, so daß auch in diesem Bereich Totalreflexion erwartet wird. Diese Bereiche stimmen sehr gut mit den Spektralbereichen hoher Reflexion in der Messung überein. Zwar erreicht die gemessene Reflexion im Bereich der Bandlücken nicht den theoretisch vorhergesagten Wert von 100%, aber immerhin beträgt sie für die H-Polarisation bis zu 95% und für die E-Polarisation bis zu 92% im Bereich der Bandlücken. Das ist ein Hinweis darauf, daß nur geringe Oberflächenstreuung auftritt und die Qualität der bestrahlten Bruchkante hoch ist.

Mit Hilfe des von A. Reynolds entwickelten Computerprogramms "Translight" [51], das auf einem 2D-Transfermatrixmodell basiert, konnte die Reflexion in Γ -M-Richtung berechnet werden. Dazu wurde ein photonischer Kristall mit einer endlichen Dicke von 8 Porenreihen angenommen. Der direkte Vergleich zwischen Reflexionsmessung und Reflexionsrechnung führt ebenfalls zu einer guten Übereinstimmung zwischen Theorie und Experiment. In der Reflexionsrechnung sind zusätzlich noch mehrere kurzweilige Oszillationen zu beobachten. Diese ergeben sich durch die mehrfache Reflexion

zwischen Vorder- und Rückseite des in der Rechnung als endlich angenommenen photonischen Kristalls. Sie entsprechen damit den aus der Optik bekannten Fabry-Perot-Interferenzen (siehe Anhang C). Im Experiment wurde dagegen die Reflexion an einem quasi halbinendlich ausgedehnten Kristallbereich gemessen. Fabry-Perot-Interferenzen treten in der Messung daher nicht mehr auf.

Betrachtet man die Anstiege der Reflexion am oberen und unteren Rand der Bandlücke, so erscheinen diese in der Reflexionsrechnung steiler als in der Messung. Der Grund dafür ist die Divergenz des eingestrahlten Lichtes infolge der Fokussierung durch das Spiegelobjektiv des IR-Mikroskops. Ein großer Teil der einfallenden Strahlung trifft daher nicht genau in Γ -M-Richtung auf, sondern unter einem gewissen Einfallswinkel α , der maximal 30° beträgt. Dabei sind 2 Fälle zu unterscheiden: Einige der einfallenden Strahlen liegen parallel zur Periodizitätsebene. Sie sind innerhalb der Ebene bis zu einem Winkel von $\alpha=30^\circ$ verkippt (sogenannte "in-plane"-Verkipfung). Im anderen Fall sind die Strahlen außerhalb der Periodizitätsebene geneigt (sogenannte "off-plane" Kippung). Beide Fälle wurden in der Literatur untersucht [46, 52] und eine Verschiebung der Bandlücken mit steigender Verkipfung wurde festgestellt. Für die verschiedenen Einfallrichtungen kommt es daher in unterschiedlichen Bereichen zur Totalreflexion. Das gemessene Reflexionsspektrum entspricht einer Mittelung über die Reflexionen für alle Einfallswinkel $0^\circ < \alpha < 30^\circ$. Das führt zu einer Verschmierung der Anstiegsflanken der Reflexionskurve am Rande der Γ -M-Bandlücken.

Zusammenfassend kann festgehalten werden, daß durch die gute Übereinstimmung der Reflexionsmessung mit der Reflexionsrechnung und der photonischen Bandstruktur die Gültigkeit der berechneten Bandstruktur für die vorliegende Probe bestätigt worden ist. Durch Vergleich mit der gesamten Bandstruktur kann daher geschlußfolgert werden, daß im Bereich $1,22\mu\text{m} < \lambda_0 < 1,3\mu\text{m}$ eine vollständige 2D-photonische Bandlücke für beide Polarisierungen vorliegt [53]. Damit ist das in der Einleitung dargestellte erste Ziel der Arbeit erreicht worden.

5.2 Opto-optisches Schalten

In Kapitel 2 wurde bereits dargestellt, daß die photonische Bandstruktur eines photonischen Kristalls von den Strukturgrößen (Gitterabstand, Porosität) und vom Brechungsindex der verwendeten Materialien abhängt. Durch geeignete Wahl dieser Strukturparameter (Design des photonischen Kristalls) können die Bandstruktur und insbesondere die Bandlücken in einen gewünschten Spektralbereich gelegt werden. Ist der photonische Kristall dann aber hergestellt, ist auch seine Bandstruktur festgelegt. Eine nachträgliche Verschiebung der Bandlücken ist im allgemeinen nicht mehr möglich. Allerdings wäre gerade das von technologischem Interesse. Für Anwendungen in der Telekommunikation muß die Lage der Bandlücken reproduzierbar sehr präzise eingestellt werden. Das erfordert eine Genauigkeit im nm-Bereich bei der Strukturierung der photonischen Kristalle. Diese Anforderungen können mit heutigen Strukturierungsmethoden nicht erreicht werden. Aus diesem Grunde wäre eine nachträgliche "Justierung der Bandstruktur" wünschenswert, um die hergestellten photonischen Kristalle einsetzen zu können. Außerdem ergibt sich durch die Verschiebung einer Bandlücke auch die Möglichkeit eines optischen Schalters: Durch das schnelle Verschieben einer Bandlücke kann ein Lichtstrahl, dessen Frequenz kurz vorher noch in einem photonischen Band lag und der daher durch den photonischen Kristall transmittiert wurde, plötzlich total reflektiert werden, da jetzt seine Lichtfrequenz in der Bandlücke liegt.

Die Verschiebung der Bandstruktur und der Bandlücken kann prinzipiell auf zwei Weisen erfolgen:

a) Die geometrische Struktur des photonischen Kristalls wird verändert: Durch mechanische Verformung können die Strukturabmessungen und damit die Gitterkonstante verändert werden. Eine Streckung führt zu höheren Gitterkonstanten entlang der Streckrichtung. Die Bragg-Bedingung wird daher schon für niedrigere Lichtfrequenzen (größere Wellenlängen) erfüllt. Da die Bandlücke durch die Bragg-Streuung verursacht wird, verschiebt sie sich ebenfalls zu niedrigeren Frequenzen.

b) Die Brechungsindizes der Materialien, aus denen der photonische Kristall besteht, werden verändert: Durch eine Erhöhung des Brechungsindex wird die Bragg-Bedingung ebenfalls schon für niedrigere Frequenzen erfüllt, so daß auch in diesem Falle die Bandlücken zu niedrigeren Frequenzen verschoben werden.

Der unter a) beschriebene Mechanismus ist für photonische Kristalle aus Silizium mit hohen Kräften verbunden und ist daher langsam und nur schwer realisierbar. Eine Veränderung des Brechungsindex (b) erscheint dagegen erfolgversprechender und dürfte auch höhere Schaltfrequenzen erlauben.

Es wurden bereits Versuche gemacht, bei denen Flüssigkristalle in die Poren eines 2D-photonischen Kristalls aus makroporösem Silizium eingefüllt wurden. Im nematischen Zustand (bei Raumtemperatur) waren die Moleküle vorzugsweise parallel zur Porenachse ausgerichtet, während sie bei erhöhter Temperatur in den isotropen Zustand übergingen und völlig regellos orientiert waren. Mit diesem temperaturinduzierten Phasenübergang des Flüssigkristalls war daher gleichzeitig auch eine Änderung des Brechungsindex innerhalb der Pore verbunden. Die sich ergebende Bandlückenverschiebung konnte theoretisch beschrieben und experimentell nachgewiesen werden [54].

Wenn nur eine "Feinabstimmung der Bandstruktur" erforderlich ist, so lassen sich mit dieser Methode bereits die nötigen Verschiebungen der photonischen Bänder erreichen. Ist aber ein schnelles "Umschalten" der Bandstruktur erforderlich, so gibt es prinzipielle Grenzen dieser Methode. Da die Veränderung des Brechungsindex in den Poren mit einem Umklappen der Flüssigkristallmoleküle verbunden ist und die Zeitskala für einen Umklappvorgang im μs -Bereich liegt, sind damit die erzielbaren Schaltfrequenzen auf den MHz-Bereich begrenzt.

Für das Schalten und Verteilen von Internetpaketen, die als Abfolge von Lichtpulsen in den Glasfaserkabeln transportiert werden, werden in Zukunft dagegen Schaltfrequenzen im 100 GHz-Bereich nötig sein. Im folgenden Abschnitt wird daher eine andere Methode geschildert, die ebenfalls zu einer Veränderung des Brechungsindex im photonischen Kristall führt, aber weit höhere Schaltfrequenzen zuläßt. Hierbei handelt es sich um eine optisch induzierte Brechungsindexänderung des Siliziums.

5.2.1 Konzept der optisch induzierten Brechungsindexänderung

Bei der Methode der optisch induzierten Brechungsindexänderung werden die Poren des 2D-photonischen Kristalls nicht mit einer anderen Substanz gefüllt, sondern es bleibt die Standardkonfiguration (Luftporen in Silizium) erhalten. Es wird der Brechungsindex des Siliziums selbst geändert.

Durch die Einstrahlung von intensivem Licht mit einer Energie, die über der elektronischen Bandlücke von Silizium liegt, werden Elektronen aus dem Valenzband in das Leitungsband des Siliziums angeregt (optisches Pumpen). Es entstehen Elektron-Loch-Paare im Silizium. Diese frei beweglichen Ladungsträger im Leitungs- und Valenzband führen zu einer Veränderung der dielektrischen Funktion ϵ_{Si} und damit auch zur Änderung des Brechungsindex n_{Si} des Siliziums ($\epsilon = n^2$). Für geringe freie Ladungsträgerdichten N kann die Absorption durch freie Ladungsträger vernachlässigt werden [55], so daß die Veränderung der Dielektrizitätskonstante des Siliziums durch die bekannte reelle Drude-Formel beschrieben wird:

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_b - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \quad (5.4)$$

mit

$$\omega_p^2 = \frac{Ne^2}{\epsilon_0 m^*}. \quad (5.5)$$

m^* stellt dabei die reduzierte effektive Masse $\frac{1}{m^*} = \frac{1}{m_e^*} + \frac{1}{m_h^*}$ dar. Neben der Frequenzabhängigkeit wird die Dispersion der dielektrischen Funktion des Siliziums nun nur noch von der Plasmafrequenz ω_p bestimmt. Die Plasmafrequenz hängt über (5.5) mit der Plasmadichte N zusammen, so daß die dielektrische Funktion durch Veränderung der Plasmadichte ebenfalls verändert wird. Durch das Einsetzen der speziellen Drude-Form von $\epsilon(\omega)$ in (2.5) erhält man folgende Form der Wellengleichung:

$$\frac{1}{\epsilon_b(\vec{r})} \nabla \times \nabla \times \vec{E}(\vec{r}) + \frac{\omega_p^2(\vec{r})}{c^2 \epsilon_b(\vec{r})} \vec{E}(\vec{r}) = \frac{\omega^2}{c^2} \vec{E}(\vec{r}) \quad (5.6)$$

die wiederum unter Anwendung der Methode der ebenen Wellen gelöst werden kann [55, 56, 57]. In Abb. 5.10 ist die sich daraus ergebende photonische Bandstruktur für einen hexagonalen 2D-photonischen Kristall aus makroporösem Silizium in Abhängigkeit von der Plasmafrequenz aufgetragen. Für die Berechnung wurden 400 ebene Wellen angesetzt. Der mittlere Teil der Abbildung zeigt die Bandstruktur für den optisch ungepumpten Fall ($\omega_p = 0$). Links und rechts davon ist die Verschiebung der Bandkanten in Abhängigkeit von der Plasmafrequenz aufgetragen. Deutlich ist eine Verschiebung der Bandkanten zu höheren Frequenzen (Blauverschiebung) mit steigender Plasmafrequenz zu erkennen. Erwartungsgemäß bedeutet eine Erhöhung der Plasmafrequenz eine Verringerung von $\epsilon(\omega)$. Die Bragg-Bedingung wird somit erst für höhere Frequenzen erfüllt.

5.2.2 Experimenteller Nachweis einer optisch induzierten Bandkantenverschiebung

Zum experimentellen Nachweis des beschriebenen Mechanismus wird die Verschiebung einer photonischen Bandlücke infolge der Generation freier Ladungsträger durch Reflexionsmessungen nachgewiesen. Dazu wird die Stirnseite (Bruchkante) eines 2D-photonischen Kristalls aus makroporösem Silizium mit einem Abtastlaser bestrahlt und sein Reflexionsspektrum aufgenommen [Abb. 5.11]. Im spektralen Bereich der photonischen Bandlücke wird der Abtastlaser total reflektiert. Wird derselbe Bereich der Probe mit einem intensiven Pumplaser ($\lambda < 1,1 \mu\text{m}$) bestrahlt, so entstehen freie Ladungsträger im Silizium und führen zu der bereits theoretisch beschriebenen Veränderung der dielektrischen Funktion und zur Verschiebung der Bandlücke. Diese Verschiebung der Bandlücken verursacht auch eine Verschiebung des Bereichs der Totalreflexion, was im Reflexionsspektrum des Abtastlasers beobachtet werden kann.

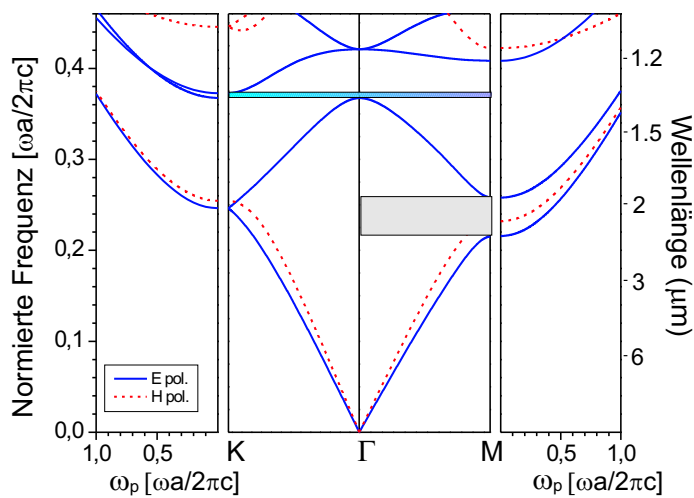


Abbildung 5.10: Photonische Bandstruktur für einen 2D-hexagonalen photonischen Kristall aus makroporösem Silizium ($r/a=0,41$) in Abhängigkeit von der Plasmafrequenz des angeregten Siliziums. Mitte: Bandstruktur für $\omega_p=0$. Links und rechts: Verschiebung der Bandkanten mit steigender Plasmafrequenz (nach [55])

Die hier gezeigten Ergebnisse entstanden in enger Zusammenarbeit mit den Kooperationspartnern Dr. S.W. Leonard und Prof. H.M. van Driel von der University of Toronto. Als Probe wurde ein 2D-photonischer Kristall aus makroporösem Silizium mit einer Gitterkonstanten $a=500\text{nm}$ und einem r/a -Verhältnis von $\frac{r}{a}=0,41$ verwendet. Die Probe wurde im Rahmen dieser Arbeit von mir selbst hergestellt. Die optischen Messungen wurden von Dr. S.W. Leonard mit einem speziellen Lasersystem in Toronto durchgeführt.

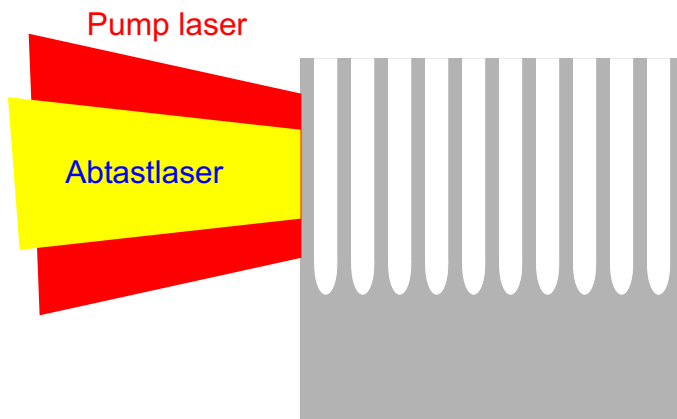


Abbildung 5.11: Experiment zum Nachweis der Verschiebung einer Bandkante. Der Pumplaser (rot) erzeugt freie Ladungsträger im Silizium, die eine Brechungsindexänderung und damit die Verschiebung der Bandlücke hervorrufen. Die Änderung in der Reflektivität des Abtastlasers (gelb) wird benutzt, um die Verschiebung der Bandkante nachzuweisen.

Um die Verschiebung einer Bandlücke in Reflexion nachzuweisen, reicht es aus, die spektrale Verschiebung einer die Bandlücke begrenzenden Bandkante zu zeigen. Dazu ist nur eine Reflexionsmessung in einem relativ kleinen, diese Bandkante umschließenden spektralen Bereich nötig. Für einen erfolgreichen Nachweis der Bandkantenverschiebung sind allerdings noch zwei einschränkende Bedingungen zu beachten:

1. Die beobachtete Bandkante muß zu einem dielektrischen Band gehören: Da die Feldstärken der Moden eines dielektrischen Bandes im Dielektrikum (Silizium) konzentriert sind, beeinflusst die Veränderung der dielektrischen Funktion $\epsilon(\omega)$ des Siliziums die spektrale Lage dieser dielektrischen Moden viel stärker als die der Moden eines Luftbandes. Damit ist auch eine viel stärkere Verschiebung für eine dielektrische Bandkante zu erwarten. Ein Beispiel für ein dielektrisches Band ist das unterste Band der H-Polarisation (Abb. 5.10). Es verschiebt sich mit steigender Plasmafrequenz schnell zu höheren Frequenzen. Das zweite Band der H-Polarisation ist dagegen ein Luftband und hängt viel schwächer von der Plasmafrequenz ab.

2. Die untersuchte Bandkante muß die Bandlücke von der Hochfrequenzseite her (von oben) begrenzen: Da der Pumplaser die Stirnseite (Bruchkante) der Probe bestrahlt, wird sein Licht innerhalb einiger Porenreihen im Silizium absorbiert. Dadurch kommt es in dieser bestrahlten Oberflächenschicht zur Anregung der freien Ladungsträger, zur Veränderung der dielektrischen Funktion $\epsilon(\omega)$ und zur Verschiebung der Bandlücke. Der dahinterliegende Bereich der Probe wird dagegen vom Pumplaserlicht nicht mehr erreicht. Die Dielektrizitätskonstante des Siliziums und auch die Lage der Bandlücke ändert sich nicht. Aufgrund dieser inhomogenen Verteilung des Plasmas kann die Probe grob in zwei Bereiche eingeteilt werden. Den Oberflächenbereich, dessen Bandstruktur vom optisch erzeugten Plasma beeinflusst wird und den Tiefenbereich, der unbeeinflusst bleibt. Wird die Reflexion an der Bandkante der Niedrigfrequenzseite der Bandlücke beobachtet, so verschiebt sich die Bandkante der Oberflächenschicht zwar zu höheren Frequenzen, diese Verschiebung ist aber in der Reflexion nicht zu bemerken [Abb. 5.12]. Durch die Verschiebung der Bandlücke an der Oberfläche zu höheren Frequenzen dringen einige Lichtfrequenzen durch die Oberflächenschicht hindurch, die vorher wegen der Bandlücke total reflektiert wurden. Allerdings treffen diese Wellen in größeren Tiefen auf den ungepumpten Bereich des photonischen Kristalls, dessen Bandlücke noch im ursprünglichen Spektralbereich liegt. Die betrachteten Lichtwellen werden also nicht mehr an der Oberfläche total reflektiert, wohl aber in größeren Tiefen. Für die beobachtete reflektierte Intensität macht das aber keinen Unterschied. Die Verschiebung der Bandlücke in der gepumpten Oberflächenschicht ist mit einer niederfrequenten Bandkante somit nicht nachzuweisen. Wird dagegen eine Bandkante an der Hochfrequenzseite der Bandlücke untersucht, so kann ihre Verschiebung zu höheren Frequenzen nachgewiesen werden. Im optisch ungepumpten Kristall können Lichtfrequenzen kurz oberhalb der ursprünglichen, unverschobenen Bandlücke in den photonischen Kristall eindringen, da sie im Bereich eines transmittierenden Bandes liegen. Die Reflexion für diese Lichtfrequenzen ist im ungepumpten Zustand daher niedrig. Verschiebt sich die Bandlücke der Oberflächenschicht durch optisches Pumpen zu höheren Frequenzen, so werden diese betrachteten Lichtfrequenzen plötzlich von der Oberflächenschicht total reflektiert. Das sollte im Reflexionsspektrum beobachtbar sein.

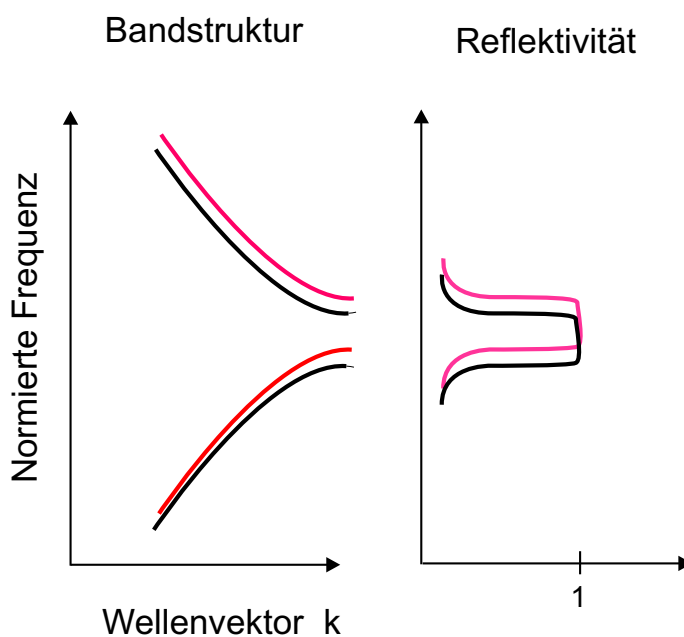


Abbildung 5.12: Verschiebung der Bandlücke in der optisch gepumpten Oberflächenschicht (schematisch). Während sich die photonische Bandlücke in der Oberflächenschicht zu höheren Frequenzen verschiebt (rot), bleibt die spektrale Lage der Bandlücke im Tiefenbereich des photonischen Kristalls (schwarz) unverändert.

Die Probe war entlang der Γ -K-Richtung gebrochen worden. Die Oberflächennormale an der bestrahlten Stirnseite entsprach daher der Γ -M-Richtung [Abb. 5.13]. Für diese Ausbreitungsrichtung weist die Probe bei $\lambda \approx 2\mu\text{m}$ eine Bandlücke in der E-Polarisation auf.

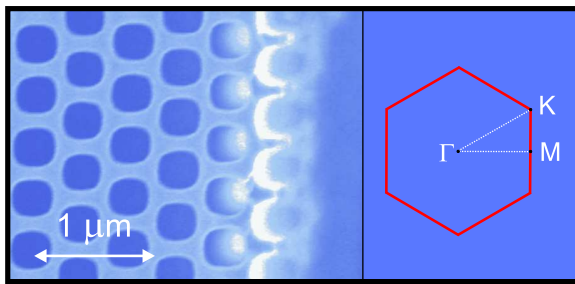


Abbildung 5.13: Rasterelektronenmikroskopische Aufnahme der untersuchten Probe. Rechts: Orientierung der 1. Brillouinzone des 2D hexagonalen Kristalls (nach [55]).

Diese kann ähnlich wie in Abb. 5.9 durch den Totalreflexionsbereich in einem Reflexionsspektrum nachgewiesen werden. Die Besonderheit daran ist, daß das obere, die Bandlücke begrenzende Band, ebenso wie das untere ein dielektrisches Band ist.

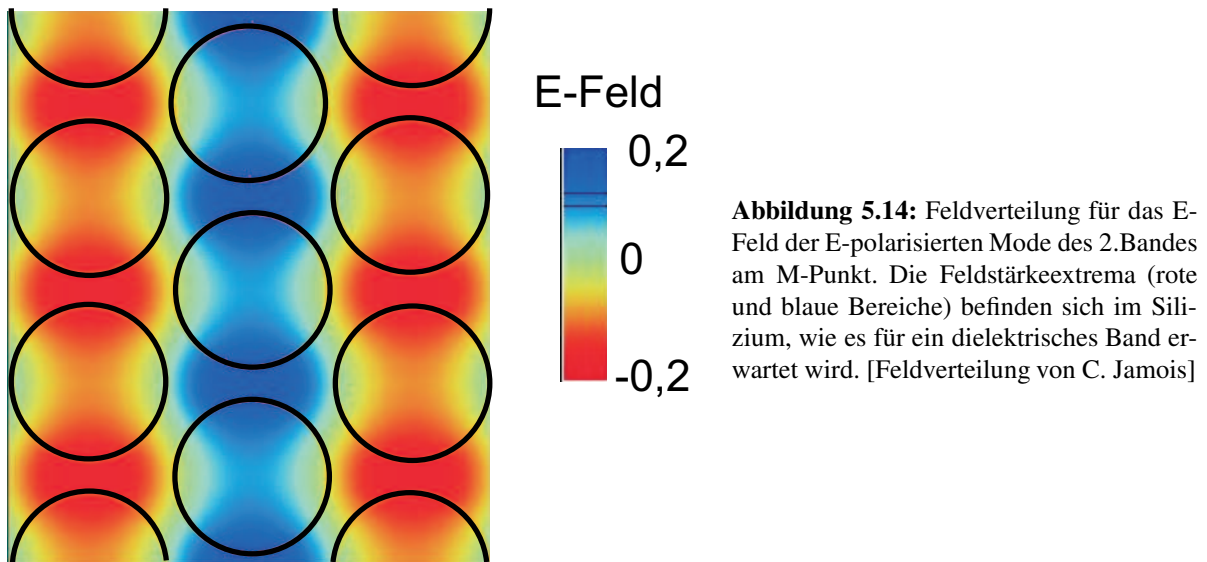


Abbildung 5.14: Feldverteilung für das E-Feld der E-polarisierten Mode des 2. Bandes am M-Punkt. Die Feldstärkeextrema (rote und blaue Bereiche) befinden sich im Silizium, wie es für ein dielektrisches Band erwartet wird. [Feldverteilung von C. Jamois]

In 1D-photonischen Kristallen ist dieser Fall unmöglich, dort werden die Hochfrequenzkanten der Bandlücken stets von Luftbändern gebildet. Erst im 2D-photonischen Kristall tritt der Fall auf, daß eine Bandlücke zwischen zwei Bändern besteht, deren beider Feldstärkemaxima vorrangig im Dielektrikum konzentriert sind. Die obere Bandkante bei $\lambda = 1,9\mu\text{m}$ erfüllt damit die Bedingungen, um die Verschiebung der Bandlücke zu höheren Frequenzen nachzuweisen [Abb. 5.14]. Für die Reflexionsmessungen stand ein Lasersystem von Coherent, bestehend aus einem Ti:Saphir Laser, einem regenerativen Verstärker und einem parametrischen Verstärker zur Verfügung. Der Ti:Saphir Laser, kombiniert mit dem regenerativen Verstärker, lieferten den Ausgangsstrahl mit einer Wellenlänge von $\lambda = 800\text{nm}$, der mit einer Wiederholfrequenz von 250 kHz gepulst war. Die Pulsdauer betrug 200fs, was einer spektralen Bandbreite von 10nm entspricht. Im parametrischen Verstärker konnte der Ausgangsstrahl mit Hilfe eines BBO-Kristalls in 2 niederenergetische Strahlen (Signal und Idler) zerlegt werden. Dabei war es möglich, die Wellenlänge des Idler-Strahles im Bereich $1,6\mu\text{m} < \lambda < 2,4\mu\text{m}$ einzustellen.

Für das beabsichtigte Experiment wurde ein Teil des Ausgangslaserstrahls mit einer Wellenlänge von 800nm und einer durchschnittlichen Leistung von 300mW als Pumplaserstrahl benutzt. Er wurde senkrecht auf die Stirnseite der Probe in einen Bereich von $75 \pm 6\mu\text{m} \times 106 \pm 20\mu\text{m}$ fokussiert.

Als Abtastlaser wurde der Idler-Strahl des parametrischen Oszillators benutzt. Seine Wellenlänge wurde auf $\lambda = 1,9\mu\text{m}$ eingestellt und er wurde ins Zentrum des vom Pumplaser bestrahlten Bereichs der Probe auf eine Fläche von $34 \pm 2\mu\text{m} \times 27 \pm 4\mu\text{m}$ fokussiert (Abb. 5.11). Dadurch wurde sicherge-

stellt, daß der Abtastlaser einen Bereich mit lateral homogener Plasmadichte ausleuchtete. Aufgrund der sehr kurzen Laserpulse (200fs), zeigte der Idler Strahl ein relativ ausgedehntes Frequenzspektrum mit einer spektralen Bandbreite von ca. 120nm, so daß der spektrale Bereich oberhalb und unterhalb der Bandkante mit abgedeckt wurde. Der Laser wirkte daher primärseitig als Quasi-Weißlichtquelle. Die Wellenlängenseparation wurde sekundärseitig vorgenommen, indem der reflektierte Strahl mit Hilfe eines Gitterspektrometers spektral zerlegt wurde. Die Intensität für die einzelnen Wellenlängen wurde mit einem pyroelektrischen Detektor gemessen.

In den Strahlengang des Pumplasers war ein Retroreflektor (verschiebbarer Spiegel) eingebaut, mit dem die Länge des Strahlwegs des Pumplasers gegenüber dem des Abtastlaser verändert werden konnte. Dadurch war es möglich, variable Zeilverzögerungen zwischen dem Auftreffen des Pumplaserpulses auf der Probe und dem Eintreffen des Abtastlaserpulses einzustellen.

5.2.3 Ergebnisse und Diskussion

5.2.3.1 Spektrale Verschiebung der Bandkante

Um die spektrale Verschiebung der Bandkante nachzuweisen, wurde die Verzögerung zwischen Auftreffen des Pumplaserpulses und des Abtastlaserpulses auf 13,5ps eingestellt. Mit dieser Zeitverzögerung wurde sichergestellt, daß der Pumplaserpuls vollständig absorbiert war und die Plasmaerzeugung abgeschlossen war (siehe Abschnitt 5.2.3.2). Abb. 5.15 zeigt die Veränderung der Reflektivität im spektralen Bereich um die Bandkante. Im Spektrum für den ungepumpten photonischen Kristall ist deutlich die steile Flanke bei 1910nm zu erkennen, die mit der Hochfrequenzbandkante der untersten Bandlücke der E-Polarisation zusammenhängt. Zu kürzeren Wellenlängen hin erstreckt sich das zweite Band. Strahlung mit dieser Frequenz kann in den photonischen Kristall eindringen und wird transmittiert. Die beobachtete Reflexion ist niedrig. Bei größeren Wellenlängen ($\lambda > 1910\text{nm}$) schließt sich der Bereich der Bandlücke an. Die einfallende Strahlung wird total reflektiert. Die Reflektivität in diesem Bereich erreicht Werte um 97%, was beweist, daß die Stirnseite (Bruchkante) sehr eben ist und dadurch die Verluste durch Oberflächenstreuung niedrig sind.

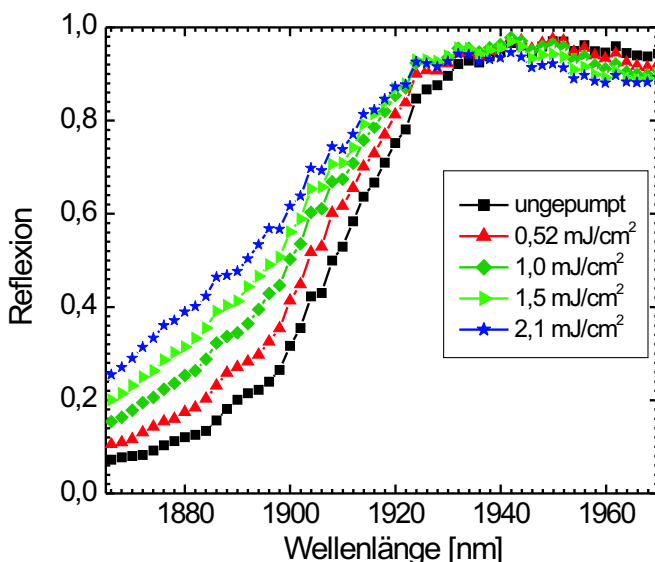


Abbildung 5.15: Reflexion des Abtastlaserstrahls in Abhängigkeit von der Pumplaserleistung. Mit zunehmender Pumplaserleistung ist eine Verschiebung der Flanke der Reflexionskurve (repräsentiert die Bandkante) zu kürzeren Wellenlängen zu beobachten (nach [55])

Mit steigender Leistung des bestrahlenden Pumplasers verschiebt sich die Flanke in der Reflexionskurve immer weiter zu kürzeren Wellenlängen (höhere Frequenzen). Diese Blauverschiebung hängt mit der erwarteten Verschiebung der Bandkante zu höheren Frequenzen zusammen, die auf die Verringerung der dielektrischen Funktion des Siliziums infolge des Plasmas zurückzuführen ist.

Allerdings ist die Verschiebung der Flanke nicht gleichmäßig. Bei niedrigeren Reflektivitäten ist sie stärker ausgeprägt als bei höheren, was zu einer Verschmierung der Flanke führt. Der Grund dafür ist die inhomogene Verteilung des Plasmas in der Probentiefe. Wie bereits erläutert beschränkt sich der Bereich der Plasmaanregung nur auf eine dünne Oberflächenschicht, so daß es auch nur dort zu einer spektralen Verschiebung der Bandlücke kommt. Licht, dessen Frequenz sich nahe der Bandkante (aber schon in der Bandlücke) der Oberflächenschicht befindet, wird nun nicht vollständig in der dünnen Oberflächenschicht reflektiert. Als evaneszente Welle wird sie zwar in der Oberflächenschicht exponentiell gedämpft, ein Teil des Lichts kann die dünne Oberflächenschicht aber durchdringen und trifft dann auf den dahinterliegenden Tiefenbereich der Probe. Da die Bandlücke dort die ursprüngliche unverschobene spektrale Lage aufweist, kann das Licht an das 2. Band ankoppeln und breitet sich im Tiefenbereich der Probe weiter aus. Die sich ergebende Gesamtrefektivität für diese Frequenz ist daher niedriger als 100%, was die geringere Verschiebung der Flanke in der Reflektionskurve erklärt. Um die Verschiebung der Bandkante im optisch gepumpten Oberflächenbereich zu bestimmen, darf daher nicht die Verschiebung der Flanke bei hohen Reflektivitäten ($R=0,7$ oder $0,8$) herangezogen werden. Ein solches Vorgehen würde die Bandkantenverschiebung in der optisch gepumpten Oberflächenschicht unterschätzen. Dagegen führt eine Messung der Flankenverschiebung bei kleinen Reflektivitäten zu relativ genauen Ergebnissen, wie anhand eines 1D-Modells gezeigt werden konnte [55].

Abb. 5.16 zeigt die Verschiebung der Flanke mit steigender Energie der Pumplaserpulse, wie sie aus Abb. 5.15 für eine Reflektivität von $R=0,3$ bestimmt wurde. Der lineare Anstieg stimmt sehr gut mit einer Bandkantenverschiebung überein, die für Plasmadichten zwischen $0,2 < N < 1,9 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ nach dem Drude-Modell mit Hilfe der Methode der ebenen Wellen berechnet wurde (Abb. 5.10).

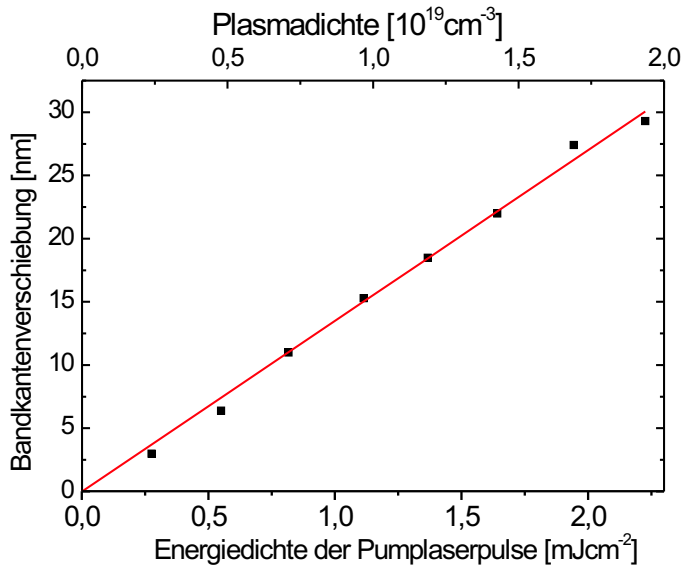


Abbildung 5.16: Verschiebung der Bandkante der optisch gepumpten Oberflächenschicht in Abhängigkeit von der Energie der Pumplaserpulse. Die experimentellen Werte wurden für $R=0,3$ bestimmt. Sie können sehr gut durch die nach der ebenen Wellenmethode errechnete Bandkantenverschiebung gefittet werden (rote Kurve) (nach [55]).

Die maximal gemessene Verschiebung von $\Delta\lambda = 29 \pm 1 \text{ nm}$ ergibt sich für die höchste verwendete Intensität des Pumplasers von $2,1 \pm 0,4 \frac{\text{mJ}}{\text{cm}^2}$. Sie geht einher mit einer relativen Änderung der Reflektivität von bis zu 250% für Wellenlängen um $\lambda \approx 1890 \text{ nm}$.

Über die Beziehung

$$N = \frac{I(1-R)}{\hbar\omega_{\text{pump}}l} \quad (5.7)$$

kann eine effektive Eindringtiefe l des Pumplasers in den photonischen Kristall abgeschätzt werden. Dabei bezeichnen I die Energiedichte der Pumplaserpulse, R den reflektierten Anteil des Pumplasers und $\hbar\omega_{\text{pump}}$ die Energie eines Pumplaserphotons. Die Abschätzung beruht auf der Annahme, daß die Mode des Pumplaserlichtes vollständig in den Siliziumwänden der Poren lokalisiert ist. Die so ermittelte effektive Eindringtiefe l bildet somit eine untere Schranke für die Dicke der Oberflächenschicht, in der

es zur Erzeugung der freien Ladungsträger kommt. Bei der Verwendung der maximalen Plasmadichte von $N = 1,9 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ ergibt sich $l = 2 \pm 0,4 \mu\text{m}$. Das umfaßt in etwa die ersten 5 Porenreihen des photonischen Kristalls entlang der $\Gamma - M$ -Richtung, da der Abstand benachbarter Porenreihen entlang der $\Gamma - M$ -Richtung $\frac{\sqrt{3}}{2}a = 433 \text{ nm}$ beträgt. Diese relativ dicke optisch gepumpte Oberflächenschicht ist nötig, um den Effekt der Bandlückenverschiebung im Reflexionsspektrum beobachten zu können. Für eine dreimal größere Gitterkonstante ($a = 1,5 \mu\text{m}$) werden nur die ersten anderthalb Porenreihen optisch gepumpt. Damit besteht auch der Bereich des photonischen Kristalls, in dem die Brechungsindexänderung auftritt nur aus anderthalb Porenreihen. Die Verschiebung einer Bandlücke ist in diesem Falle noch nicht zu beobachten [58].

5.2.3.2 Zeitaufgelöste Messung der Reflektivität

Für die Anwendung der optisch induzierten Verschiebung der photonischen Bandlücke für optische Schalter ist besonders der zeitliche Verlauf der Reflektivitätsänderung nach Plasmaanregung durch einen Pumplaserpuls von Bedeutung. Aus diesem Grund wurde die Reflektivität zeitaufgelöst gemessen (Abb. 5.17). Die blaue Kurve zeigt die Korrelation von Pump- und Abtastlaserpuls bei einer Verzögerung von 0s (gleichzeitiges Auftreffen von Pump- und Abtastlaserpuls auf der Probe). Dazu wurde der zeitliche Verlauf der Summenfrequenzerzeugung in einem BBO-Kristall benutzt, der anstatt der Probe eingespannt wurde. Damit repräsentiert diese Kurve den Zeitpunkt des Auftreffens des Pumplaserpulses auf die Probe. Die rote Kurve stellt dagegen die Reflektivität des Abtastlasers dar, die für verschiedene Zeitverzögerungen an der Probe gemessen wurde. Die betrachtete Wellenlänge der reflektierten Strahlung beträgt $\lambda = 1900 \text{ nm}$ und die Intensität des Pumplaserpulses $1,3 \frac{\text{mJ}}{\text{cm}^2}$.

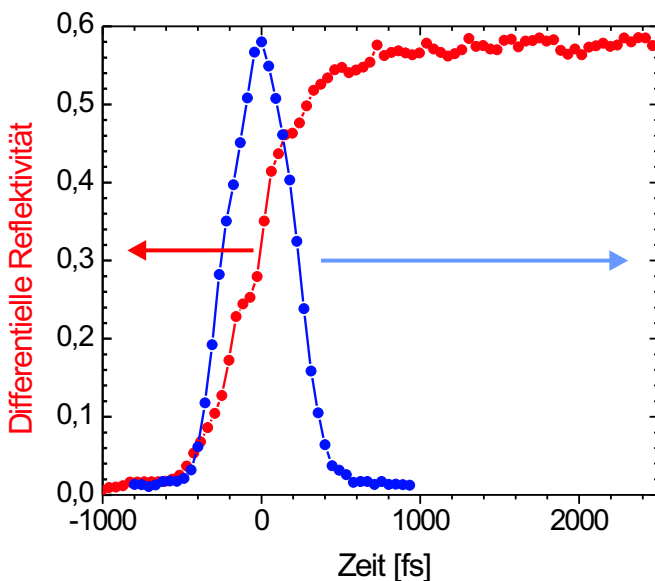


Abbildung 5.17: Zeitlicher Verlauf des Anstiegs der Reflektivität (rot) für $\lambda = 1900 \text{ nm}$ nach dem Eintreffen des Pumplaserpulses (blau) (nach [55]).

Deutlich ist ein sehr schnelles Anwachsen der Reflektivität innerhalb eines Zeitraums von 400 fs nach Auftreffen des Pumplaserpulses zu beobachten. Danach bildet sich ein Plateau in der Reflexionskurve aus, das bis zu der maximal gemessenen Zeitverzögerung von 70ps konstant bleibt. Die kurze „Einschaltzeit“ von 400fs stellt eine wichtige Grundvoraussetzung für einen opto-optischen Schalter mit potentielltem Anwendungsgebiet in der Telekommunikation dar. Um einen effizienten optischen Schalter zu realisieren muß die „Ausschaltzeit“ allerdings ebenfalls gering sein.

5.2.4 Rekombinationsgeschwindigkeiten

Der Grund für die lange „Ausschaltzeit“ liegt im Materialcharakter des Siliziums. Silizium ist ein indirekter Halbleiter, so daß die Rekombinationsraten von angeregten Ladungsträgern nur gering sind. Bei einer freien Ladungsträgerdichte von 10^{19}cm^{-3} rekombinieren die Elektron-Loch-Paare in reinem Silizium vorrangig über den Augerprozeß. Dabei wird die bei der Rekombination von Leitungsbandelektron und Valenzbandloch freiwerdende Energie auf ein zweites Leitungsbandelektron übertragen, das dann zu höheren Energien im Leitungsband angeregt wird. Die Relaxationszeiten für diesen Augerprozeß hängen von der Plasmadichte N ab. Für $N=10^{19} \text{cm}^{-3}$ ergibt sich $\tau_{\text{Auger}} \approx 13 \text{ns}$ [55].

Um die Rekombinationsrate von angeregten Ladungsträgern im Silizium zu erhöhen, bieten sich folgende zwei Möglichkeiten an:

1. In das Silizium werden Rekombinationszentren wie z.B. Fremdatome eingebracht. Ein mögliches Material ist Gold. Inkorporierte Goldatome bilden elektronische Defektzustände in der elektronischen Bandlücke des Siliziums aus. Diese Defektzustände wirken dann als Zwischenstation im Rekombinationsprozeß. Die angeregten Leitungsbandelektronen können über diesen Defektzustand schneller mit den Valenzbandlöchern rekombinieren (Shockley-Read-Hall Mechanismus), was zu einer Verkürzung der Lebensdauer der freien Ladungsträger in Leitungs- und Valenzband führt.
2. Da makroporöses Silizium im Vergleich zu massivem Silizium eine große Oberfläche besitzt, könnte auch eine Verstärkung der Oberflächenrekombination zu einer insgesamt niedrigeren Lebensdauer der freien Ladungsträger führen. Die freien Ladungsträger diffundieren dann aus dem Inneren der Porenwände an die Grenzflächen zwischen Silizium und Luft und rekombinieren dort. Ein Material, was die Oberflächenrekombinationsgeschwindigkeit von Silizium erhöht, ist Nickel. Es scheidet sich bevorzugt an der Oberfläche von Silizium ab [59].

Um abzuschätzen, welcher der beiden Effekte überwiegt, wird in Anhang A die zweidimensionale Diffusion der elektronischen Löcher im Silizium betrachtet. Dabei werden beide Rekombinationsmechanismen berücksichtigt. Es ergibt sich, daß sich für sehr schnelle Oberflächenrekombination die Lebensdauer der freien Ladungsträger bis zu 10ps reduzieren läßt. Den Hauptanteil an dieser kurzen Lebensdauer hat die Rekombination an der Oberfläche des Siliziums.

Es ist also möglich, die Lebensdauer der angeregten Ladungsträger stark zu verringern. Damit geht auch der Brechungsindex während dieses Zeitraums wieder auf seinen ursprünglichen Wert zurück und die Bandlücke erreicht ihre ursprüngliche spektrale Position wieder. Ein schneller opto-optischer Schalter erscheint daher möglich, der die Anforderungen für das "packet switching" erfüllen könnte.

6 3D-photonische Kristalle aus makroporösem Silizium

6.1 Einführung

Im Kapitel 2 wurden bereits einige Realisierungsmöglichkeiten für 3D-photonische Kristalle vorgestellt. Eine wichtige Voraussetzung, um eine 3D-photonische Bandlücke zu erhalten, ist ein großer ϵ -Kontrast. Die Verwendung einer porösen Siliziumstruktur liegt daher nahe. Der invertierte Opal und die „Lincoln-Log“-Strukturen sind Beispiele dafür. In letzter Zeit wurden zwei Vorschläge gemacht, wie ein 3D-photonischer Kristall aus photoelektrochemisch geätzten Makroporenstrukturen hergestellt werden kann. Beide Methoden zielen darauf ab, eine yablonovitartige Struktur herzustellen. Im ersten Fall [24] wird zuerst ein 2D-hexagonaler photonischer Kristall hergestellt, in den danach weitere Kanäle unter schrägen Winkeln mit Hilfe eines fokussierten Ionenstrahls hineingetrieben werden. Eine andere Möglichkeit stellt das Wachstum von Makroporen in einem Siliziumwafer mit (111)-orientierter Oberfläche dar. In diesem Fall wachsen die Poren nicht senkrecht in die Tiefe (wie bei den bisher betrachteten (100)-orientierten Wafern), sondern entlang der $\langle 113 \rangle$ -Richtungen. Da von einer (111)-Fläche sich drei gleichberechtigte $\langle 113 \rangle$ -Richtungen anbieten, wachsen von jedem Nukleationspunkt drei Poren schräg in die Tiefe. Die Poren schneiden sich in der Tiefe unter Winkeln von jeweils $74,7^\circ$ und bilden damit ein Netzwerk ähnlich dem eines Yablonoviten [25]. Bisher wurden allerdings nur Strukturen hergestellt, bei denen die Nukleationspunkte zufällig auf der Oberfläche verteilt waren. Der experimentelle Nachweis einer photonischen Bandlücke war damit noch nicht möglich.

Prinzipiell ist mit beiden Methoden die Herstellung eines Yablonoviten bzw. einer yablonovitartigen Struktur möglich, die dann auch eine vollständige 3D Bandlücke im IR aufweist. Der experimentelle Nachweis steht bei beiden allerdings noch aus.

Die eigene Aufgabe bestand darin, eine dritte Methode zur Herstellung eines 3D-photonischen Kristalls aus makroporösem Silizium zu erproben und danach eine optische Charakterisierung der Struktur vorzunehmen. Ein 2D-photonischer Kristall aus makroporösem Silizium wird dabei zu einem 3D-photonischen Kristall erweitert, indem zusätzlich zur 2D-lateralen Periodizität des Brechungsindex eine periodische Variation des Brechungsindex entlang der Porenachse eingeführt wird. Dies wird durch eine periodische Variation des Porendurchmessers mit der Porentiefe erreicht. Diese Modulation der Makroporen konnte zwar bereits gezeigt werden [60], optische Messungen wurden aber noch nicht durchgeführt. Die hier dargelegte optische Charakterisierung des entstehenden 3D-photonischen Kristalls aus modulierten Makroporen ist daher neu.

Dieses Kapitel 6 ist wie folgt aufgebaut: Nach einer Darstellung der Herstellungsmethode der modulierten Poren in Abschnitt 6.2 folgen in den Abschnitten 6.3-6.6 die Experimente zur Charakterisierung der optischen Eigenschaften, die mit der eingeführten Modulation zusammenhängen.

6.2 Herstellung von 3D-photonischen Kristallen durch Porenmodulation

6.2.1 Konzept

Wie in Kapitel 3 bereits ausgeführt wurde, wird die Porosität durch den Ätzstrom bestimmt. Ist die Anzahl der Poren durch die Ätzkeime definiert, so ist mit einem bestimmten Ätzstrom auch der Po-

rendurchmesser festgelegt. Der Ätzstrom hängt von der Beleuchtungsstärke an der Probenrückseite ab. Variiert man die Beleuchtungsstärke periodisch, so führt das ebenfalls zu einer periodischen Variation des Ätzstromes. Damit variiert auch der Durchmesser der Poren periodisch mit der Tiefe – es entstehen modulierte Poren. Die Periodizität in z-Richtung (entlang der Porenachse) wird durch die Periodendauer der Beleuchtungsvariation und die Ätzgeschwindigkeit bestimmt. Sind die Konzentration der Flußsäure (HF) und die Temperatur konstant, so ist auch die Ätzgeschwindigkeit konstant, und allein die Variation der Beleuchtung bestimmt die Modulation des Porendurchmessers. Durch die Periode der Beleuchtungsstärke in der Zeit τ_{modul} wird somit die Modulationsperiode l_z der Probe bestimmt. Kurze Perioden τ_{modul} in der Zeit führen zu niedrigen Modulationsperioden l_z in der Probe. Die Periodizität in der x-y-Ebene wird dagegen weiterhin durch die Lithographie definiert.

Nimmt man kreisrunde Porenquerschnitte an, so stellt die sich ergebende Struktur einen einfachen 3D-hexagonalen photonischen Kristall dar [Abb. 6.1]. Die Gittervektoren in der xy-Ebene \vec{a} und \vec{b} sind dieselben wie für den 2D-hexagonalen photonischen Kristall. Durch die Modulationsperiode tritt beim 3D-hexagonalen photonischen Kristall aber noch ein 3. Gittervektor \vec{l}_z in z-Richtung entlang der Porenachse hinzu. Sein Betrag entspricht der Modulationsperiode des Porendurchmessers l_z .

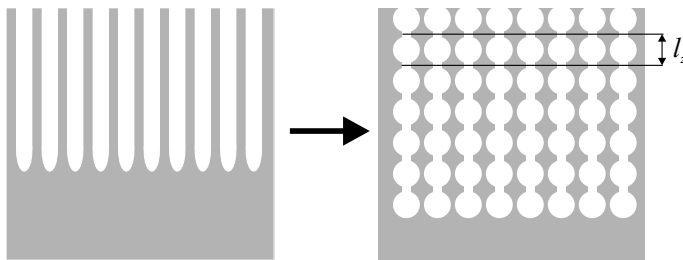


Abbildung 6.1: Erweiterung eines 2D-photonischen Kristalls aus makroporösem Silizium (links) zu einem 3D-photonischen Kristall (rechts) durch Modulation des Porendurchmessers.

Bei der Herstellung ist zu beachten, daß während der photoelektrochemischen Ätzung der Poren die Ätzgeschwindigkeit mit größeren Porentiefen absinkt, da die Konzentration der Flußsäure an der Porenspitze abnimmt. Diese Veränderung der Ätzgeschwindigkeit muß berücksichtigt werden, wenn die Periode der Porenmodulation und die Amplitude der Durchmesservariation während des gesamten Porenätzprozesses konstant bleiben soll. Durch die geringere Ätzgeschwindigkeit in der Tiefe muß die zeitliche Periode der Beleuchtungsvariation im Verlauf des Ätzprozesses etwas vergrößert werden, um eine konstante Periode der Modulation zu erzielen. Außerdem muß die Beleuchtungsintensität mit zunehmender Ätzzeit insgesamt etwas verringert werden, um eine konstante Modulationsamplitude zu gewährleisten.

6.2.2 Modulationsprofile in Abhängigkeit von der Modulationsperiode

Zur Untersuchung der Modulationsprofile der Poren wurden vier Proben mit einer 2D-Gitterkonstante $a = 1,5\mu\text{m}$, aber verschiedenen Modulationsperioden l_z hergestellt. Die Ätzparameter für alle Poren waren: $c_{\text{HF}}=4\%$; $T=17^\circ\text{C}$; $U=1,5\text{V}$. Das Ätzstromprofil wurde so gewählt, daß sich ein zick-zack-förmiger Verlauf des Porenradius mit der Porentiefe ergeben sollte. Der Porenradius sollte bei allen Proben zwischen $r_{\text{min}}=0,35\mu\text{m}$ und $r_{\text{max}}=0,7\mu\text{m}$ linear variieren [Abb. 6.2(links)].

Da die Porosität in der Ebene $p_{2\text{D}}$ quadratisch vom Porenradius abhängt, ergäbe sich damit eine Variation der Porosität zwischen $p_{2\text{Dmin}}^{\text{theorie}}=0,198$ in den Ebenen mit dem kleinsten Porenradius und $p_{2\text{Dmax}}^{\text{theorie}}=0,792$ in den Ebenen mit größtem Porenradius. Aus der so definierten Modulation lassen sich eine mittlere Porosität $p_{2\text{D},0}^{\text{theorie}}=0,495$ und eine Amplitude der Porositätsvariation $\Delta p_{2\text{D}}^{\text{theorie}}=0,297$ ableiten.

Da der Ätzstrom direkt proportional zur Porosität $p_{2\text{D}}$ ist, muß er somit während des Ätzprozesses um einen Faktor $\frac{p_{2\text{Dmax}}^{\text{theorie}}}{p_{2\text{Dmin}}^{\text{theorie}}}=4$ variieren. Das sich ergebende Profil des Ätzstromes weist somit

keinen linearen zick-zack Verlauf mehr auf. Die ansteigenden und abfallenden Flanken entsprechen Parabelabschnitten [Abb. 6.2(rechts)].

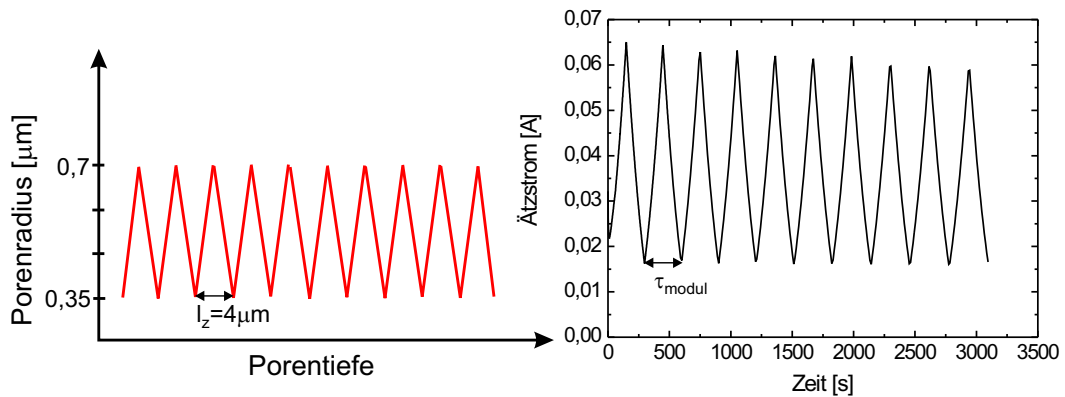


Abbildung 6.2: Zusammenhang zwischen beabsichtigtem Modulationsprofil (links) und Ätzstrom (rechts) am Beispiel der Probe mit $l_z^{\text{theorie}} = 4 \mu\text{m}$. Es gilt $\tau_{\text{modul}} = \tau_{\text{Anstieg}} + \tau_{\text{Abfall}}$.

Die beabsichtigten Modulationsperioden l_z für die 4 verschiedenen Proben betragen $l_z^{\text{theorie}} = 4 \mu\text{m}$, $3 \mu\text{m}$, $2 \mu\text{m}$ und $1 \mu\text{m}$. Da die Ätzgeschwindigkeit für die Parameter $c_{\text{HF}} = 4\%$ und $T = 17^\circ\text{C}$ vom Fall der Ätzung gerader Poren her bekannt war, konnte die zeitliche Periode τ_{modul} der Beleuchtungs- und Ätzstrommodulation so eingestellt werden, daß die beabsichtigten Modulationsperioden l_z^{theorie} erreicht werden sollten. Die Steuerung des Ätzstromes über die Beleuchtung wurde wieder vollständig vom Computerprogramm übernommen. Die Verringerung der Ätzgeschwindigkeit mit zunehmender Porentiefe wird wie im Falle der geraden Poren berücksichtigt, so daß die Modulationsperiode in allen Porentiefen konstant sein sollte.

Die so hergestellten Proben wurden gebrochen und die Bruchkanten im REM untersucht [Abb. 6.3].

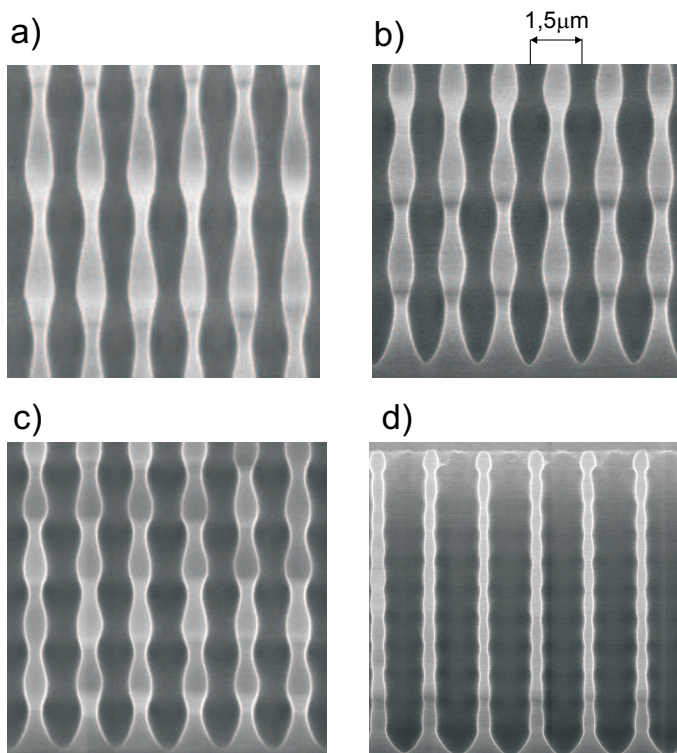


Abbildung 6.3: REM-Bilder von Längsschnitten der modulierten Poren mit unterschiedlichen Modulationsperioden. a) Beabsichtigte Modulationsperiode $l_z^{\text{theorie}} = 4 \mu\text{m}$; b) $l_z^{\text{theorie}} = 3 \mu\text{m}$; c) $l_z^{\text{theorie}} = 2 \mu\text{m}$ und d) $l_z^{\text{theorie}} = 1 \mu\text{m}$

Für die Proben mit $l_z^{\text{theorie}}=4\mu\text{m}$, $3\mu\text{m}$ und $2\mu\text{m}$ sind die Modulationen des Porendurchmessers mit der Tiefe deutlich zu erkennen. Dagegen ist die Amplitude der Modulation bei der Probe mit $l_z^{\text{theorie}}=1\mu\text{m}$ so gering, daß eine Modulation kaum erkennbar ist. Um die geätzte Modulationsperiode l_z^{exp} der Proben zu bestimmen, wurde beginnend von der Probenoberfläche die Tiefe jeder Ebene mit maximalem Porendurchmesser aus Abb. 6.3 bestimmt und in Abb. 6.4 gegen die Nummer der Modulationsperiode aufgetragen.

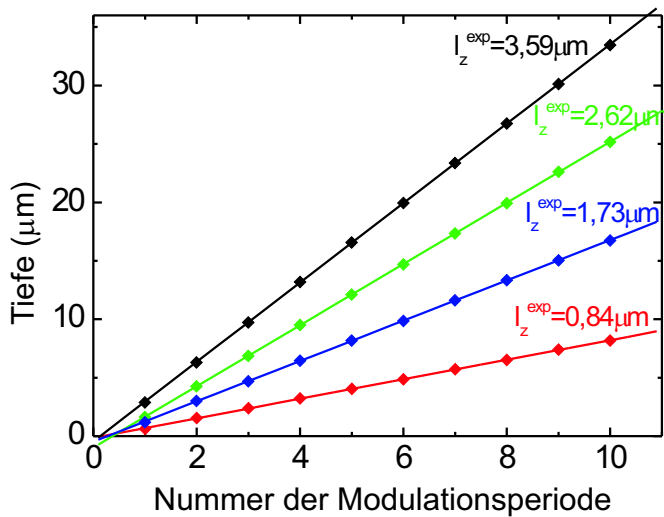


Abbildung 6.4: Tiefenposition der Ebenen mit maximalem Porendurchmesser. Die Tiefe 0 entspricht der Oberfläche der Probe. Die Punkte stellen die Meßwerte aus Abb. 6.3 dar, an die die Geraden angefügt wurden. Schwarz: Probe mit $l_z^{\text{theorie}}=4\mu\text{m}$; grün: $l_z^{\text{theorie}}=3\mu\text{m}$; blau: $l_z^{\text{theorie}}=2\mu\text{m}$; rot: $l_z^{\text{theorie}}=1\mu\text{m}$.

Da jede Probe aus 10 Modulationsperioden bestand, konnten jeweils 10 Meßwerte erhalten werden, die für jede Probe auf einer Geraden lagen. Dies beweist, daß die Modulationsperiode l_z^{exp} bei allen Proben konstant mit der Porentiefe ist. Aus der Steigung der an die Meßwerte angefügteten Geraden ergibt sich ein genauer Wert für die wirklich geätzte Modulationsperiode l_z^{exp} [Abb. 6.4]. Vergleicht man die beabsichtigten Modulationsperioden l_z^{theorie} mit den tatsächlich erhaltenen l_z^{exp} , so fällt auf, daß generell l_z^{exp} kleiner als l_z^{theorie} ist. Die relative Abweichung $\frac{(l_z^{\text{exp}} - l_z^{\text{theorie}})}{l_z^{\text{theorie}}}$ nimmt außerdem mit kürzerer Modulationsperiode zu [Tab. 6.1].

l_z^{theorie} in μm	l_z^{exp} in μm	$(l_z^{\text{exp}} - l_z^{\text{theorie}}) / l_z^{\text{theorie}}$
4	3,59	10,3 %
3	2,62	12,7 %
2	1,73	13,5 %
1	0,84	16 %

Tabelle 6.1: Zusammenstellung der Modulationsperioden l_z^{exp} und ihrer relativen Abweichungen von den beabsichtigten Werten l_z^{theorie}

Betrachtet man in Abb. 6.3 die Form der Modulationen genauer, so ist bei keiner der Proben eine scharfe zick-zack-Modulation des Porendurchmessers zu beobachten. Am ehesten scheint das zick-zack-Profil mit den linearen Anstiegen des Porendurchmessers für die Probe mit $l_z^{\text{theorie}}=4\mu\text{m}$ erfüllt zu sein. Mit kürzerer Modulationsperiode verrundet das Profil zunehmend. Das beabsichtigte zick-zack-Profil für den Porenradius "verschmiert" zu einem wellenförmigen Profil.

Bisher wurde nur die Form der Poren entlang der z-Achse betrachtet. Dabei wurde stillschweigend vorausgesetzt, daß die Poren einen kreisrunden Querschnitt haben. In diesem Falle könnte aus den REM-Längsschnitten der Verlauf des Porendurchmessers in Abhängigkeit von der Tiefe bestimmt werden, wenn man davon ausgeht, daß die Schnittebene durch das Porenzentrum verläuft. Die Porosität ergäbe sich dann über (3.10). Wie in Kapitel 5.1 gezeigt wurde, können die Porenquerschnitte aber

auch andere Formen aufweisen. Ist der Porenquerschnitt quadratisch oder elliptisch geformt, ergibt die alleinige Betrachtung der Porenlängsschnitte kein korrektes Bild. Die Betrachtung der Längsschnitte reicht für eine genaue Untersuchung der Porenmodulation daher nicht aus.

Um die Variation der Porosität mit der Tiefe bestimmen zu können, ist eine direkte Betrachtung der Porenquerschnitte in verschiedenen Probentiefen vorzunehmen. Zu diesem Zweck wird die Probe unter einem Winkel von $\alpha=3^\circ$ schräg angeschliffen. Durch die Neigung von 3° schneidet die Schliffebene die Poren in verschiedenen Tiefen. An der Oberfläche des geschliffenen Bereiches erscheinen daher die Porenquerschnitte gerade so, wie sie von der Schliffebene in der Tiefe angeschnitten wurden [Abb. 6.5].

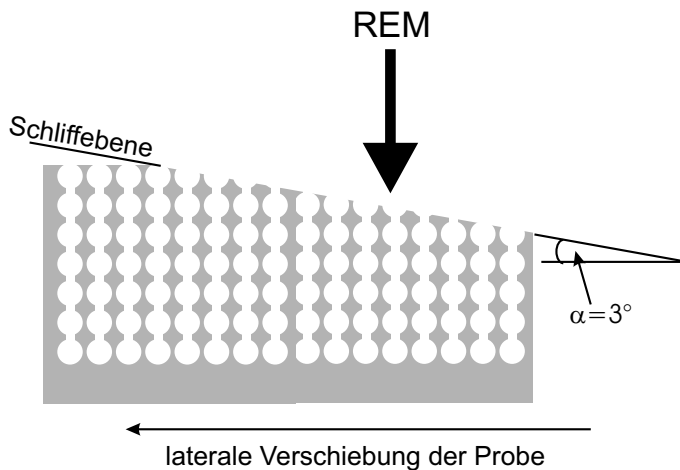


Abbildung 6.5: Betrachtung der unter einem Winkel von 3° angeschliffenen modulierten Proben im REM

Durch eine laterale Verschiebung der Probe im REM und Betrachtung der Schliffkante können somit Informationen über die Tiefenabhängigkeit der Porenquerschnitte gewonnen werden.

Aus Abb. 6.6 ist ersichtlich, daß die Porenquerschnitte wie in Kapitel 5.1 Quadraten mit abgerundeten Ecken ähneln. Zur Bestimmung der Porenquerschnittsflächen wurden mit Hilfe des Bildverarbeitungsprogramms "NIH Image (Version 1.55)" mehrere REM-Aufnahmen der Schliffflächen vermessen. Der Schliff war so angebracht, daß Poren, die in Abb. 6.6 zur selben Porenreihe gehören, von der Schliffebene in derselben Tiefe geschnitten wurden. Daher konnte über mehrere Poren derselben Porenreihe gemittelt werden. Auf diese Weise wurden Fluktuationen der Porendurchmesser benachbarter Poren herausgemittelt und eine durchschnittliche Porenquerschnittsfläche bei verschiedenen Tiefeniveaus bestimmt. Durch Division mit der Fläche der primitiven 2D-Elementarzelle $A_{2D-Zelle} = \frac{\sqrt{3}}{2}a^2 = 1,949\mu\text{m}^2$ konnte dann die Porosität p_{2D} in Abhängigkeit von der Nummer der gemessenen Porenreihe berechnet werden [Abb. 6.7]. Eine höhere Nummer der Porenreihe ist aufgrund des geeigneten Schliffes gleichbedeutend mit einer größeren Tiefe.

Der Verlauf der Porosität für die Proben mit $l_z^{\text{exp}}=3,59\mu\text{m}$ und $l_z^{\text{exp}}=1,73\mu\text{m}$ läßt sich gut durch eine Sinusfunktion

$$p_{2D}^{\text{exp}}(z) = p_{2D,0}^{\text{exp}} + \Delta p_{2D}^{\text{exp}} \sin\left(\frac{2\pi z}{l_z}\right) \quad (6.1)$$

annähern. Für die Probe mit $l_z^{\text{exp}}=0,84\mu\text{m}$ ist die Streuung der Meßwerte dagegen sehr groß. Die Fluktuationen der Porenquerschnitte benachbarter Poren überwiegen oft die darunterliegende systematische Modulation. Die angefittete Sinusfunktion gibt daher nur einen groben Anhaltspunkt für die Amplitude der Porositätsvariation $\Delta p_{2D}^{\text{exp}}$ und die mittlere Porosität $p_{2D,0}^{\text{exp}}$.

Die aus den gefitteten Sinusfunktionen erhaltenen Parameter $p_{2D,0}^{\text{exp}}$ und $\Delta p_{2D}^{\text{exp}}$ sowie die bereits aus Abb. 6.3 bestimmten Werte für l_z^{exp} sind in Tab. 6.2 zusammengestellt.

Vergleicht man die Sollwerte $p_{2D,0}^{\text{theorie}}=0,495$ und $\Delta p_{2D}^{\text{theorie}}=0,297$ mit den Istwerten, so ist für kürzere Modulationsperioden eine immer stärkere Abweichung zu beobachten. Die Amplitude $\Delta p_{2D}^{\text{exp}}$ der

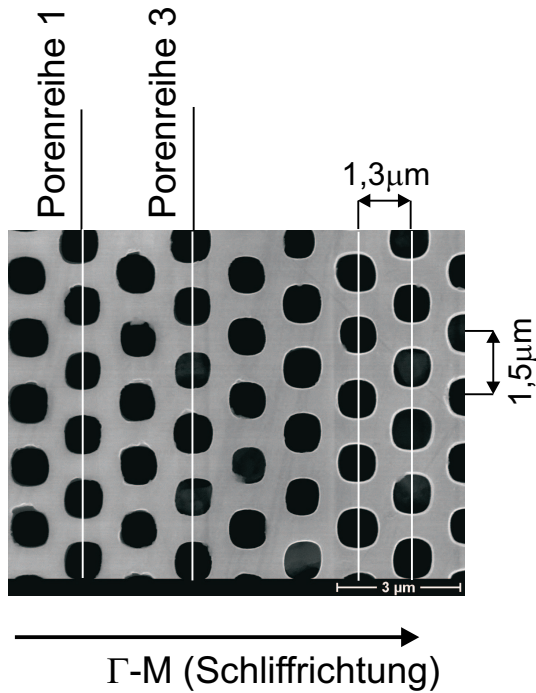


Abbildung 6.6: Beispiel für ein REM-Bild der Schliiffläche der Probe mit $l_z^{\text{exp}} = 1,73 \mu\text{m}$. Die Porenquerschnitte haben die Form abgerundeter Quadrate. Da die Schliifrichtung der Γ -M-Richtung entspricht, werden alle Poren, die derselben Porenreihe angehören, von der Schliifebene in derselben Tiefe geschnitten.

$l_z^{\text{theorie}} [\mu\text{m}]$	$l_z^{\text{exp}} [\mu\text{m}]$	$p_{2D,0}^{\text{theorie}}$	$p_{2D,0}^{\text{exp}}$	$\Delta p_{2D}^{\text{theorie}}$	$\Delta p_{2D}^{\text{exp}}$
4	3,59	0,495	0,445	0,297	0,207
2	1,73		0,518		0,152
1	0,84		0,595		0,046

Tabelle 6.2: Zusammenstellung der aus dem Fit mit einer Sinusfunktion erhaltenen Parameter für die Variation der Porosität mit der Porentiefe

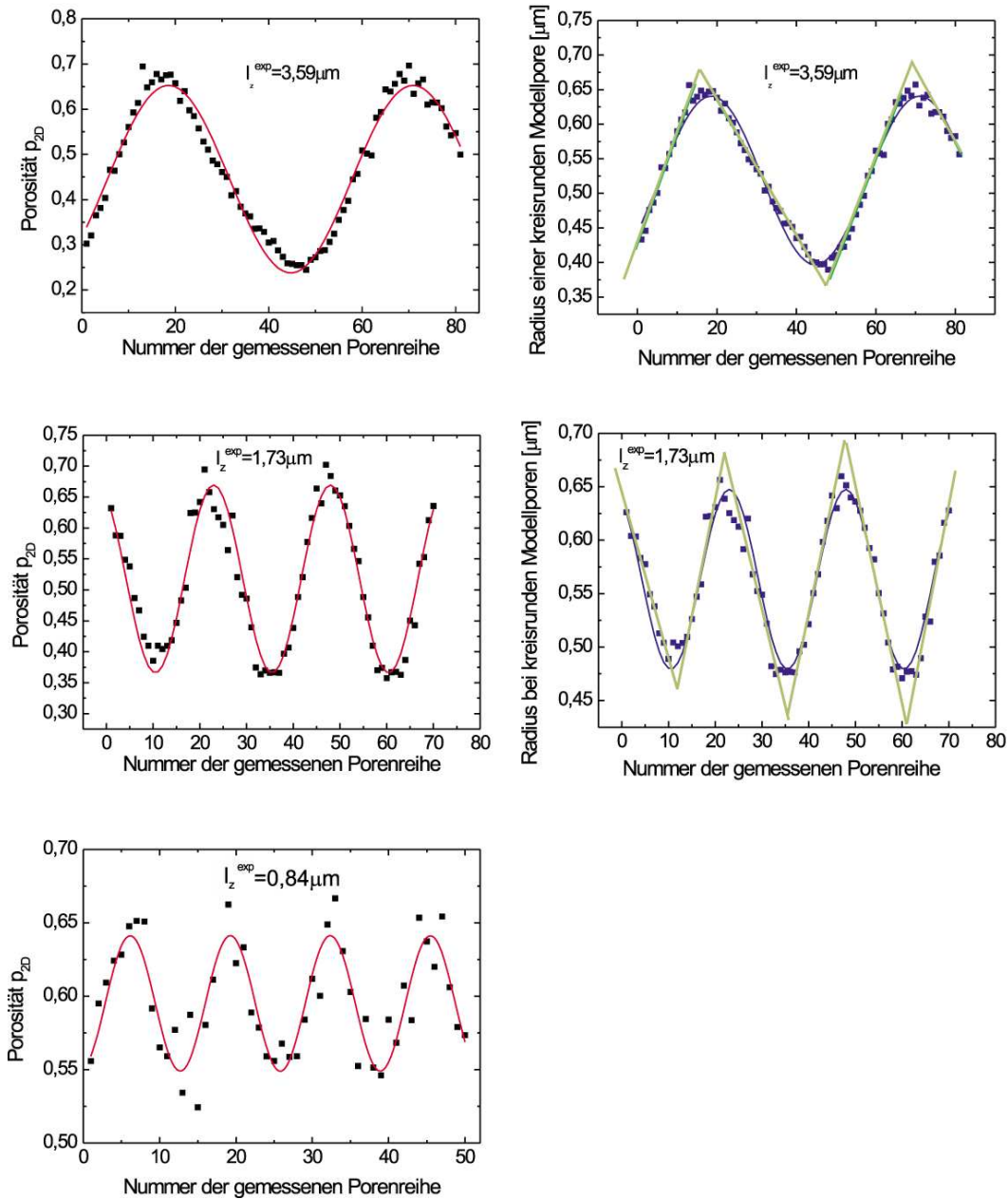


Abbildung 6.7: Modulationsprofile aus der Untersuchung der Schrägschliffe. Links: Variation der Porosität für die Proben mit $l_z^{\text{exp}}=3,59\mu\text{m}$, $l_z^{\text{exp}}=1,73\mu\text{m}$ und $l_z^{\text{exp}}=0,84\mu\text{m}$. Punkte entsprechen den Meßwerten, die Kurven stellen angefittete Sinusfunktionen dar. Die Erhöhung der Nummer der Porenreihe entspricht einer fortschreitenden Tiefe der Porenquerschnitte. Rechts: Variation des Porenradius einer kreisrunden Modellpore. Die Punkte sind die aus den Meßwerten abgeleiteten Radien. Die blauen Kurven repräsentieren wiederum gefittete Sinusfunktionen. Gelbgrün: Lineare Fits an die ansteigenden und abfallenden Flanken.

Porositätsvariation nimmt mit kürzer werdender Modulationsperiode stark ab. Für eine Modulationsperiode von $l_z^{\text{exp}}=0,84\mu\text{m}$ beträgt sie nur noch ca. ein sechstel der beabsichtigten Amplitude $\Delta p_{2D}^{\text{theorie}}$. Dies entspricht dem bereits beobachteten Trend der Verschmierung der Modulation mit sinkender Modulationsperiode. Gleichzeitig steigt mit kürzer werdender Modulationsperiode die mittlere Porosität $p_{2D,0}^{\text{exp}}$ an.

Die aus den Schliffuntersuchungen erhaltenen Werte für die Modulation der Porenquerschnittsfläche können wieder in die Modulation eines Porenradius für eine kreisrunde Modellpore umgerechnet werden [Abb.6.7(rechts)]. Auch hier kann das Modulationsprofil durch eine Sinusfunktion angefitet werden. Es ist möglich, einen Vergleich mit dem ursprünglich beabsichtigten linearen zick-zack-Profil des Porenradius zu ziehen. Die Flanken der Modulationsprofile für die Proben mit $l_z^{\text{exp}}=3,59\mu\text{m}$ und $l_z^{\text{exp}}=1,73\mu\text{m}$ können durch lineare Funktionen gut angenähert werden. Werden diese verlängert, ergibt sich ein zick-zack-Profil. Diese Näherung versagt allerdings in den Bereichen der maximalen und minimalen Porendurchmesser. Die scharfen Extremwerte des zick-zack-Profils werden nicht erreicht. Hier tritt der "Verschmierungseffekt" deutlich hervor.

Für die Probe mit $l_z^{\text{exp}}=3,59\mu\text{m}$ ist außerdem eine leichte Asymmetrie der zick-zack-Kurve beobachtbar. Das äußert sich in den Anstiegen der gefitteten Geraden. Während die Anstiege für die monoton steigenden Flanken $0,0155\pm 0,0005\mu\text{m}$ pro Porenreihe betragen, sind die fallenden Flanken mit $-0,0106\pm 0,0008\mu\text{m}$ pro Porenreihe flacher. Diese Asymmetrie ist bereits bei Betrachtung des Fits mit der Sinusfunktion bemerkbar. Während die steigenden Flanken gut mit dem Anstieg der Sinusfunktion übereinstimmen, weicht die fallende Flanke stärker ab. Bei der Probe mit $l_z^{\text{exp}}=1,73\mu\text{m}$ tritt diese beschriebene Asymmetrie nicht mehr deutlich auf. Allerdings basieren die linearen Fits für diese Probe auch auf viel weniger Stützstellen als für die Probe mit $l_z^{\text{exp}}=3,59\mu\text{m}$, so daß die Bestimmung der Anstiege ungenauer ist als für die Probe mit $l_z^{\text{exp}}=3,59\mu\text{m}$.

Die wesentlichen Ergebnisse der Untersuchungen der Modulationsprofile in Abhängigkeit von der Modulationsperiode können folgendermaßen zusammengefaßt werden:

1. Die geätzte Modulationsperiode ist geringer als erwartet.
2. Mit Verkürzung der Modulationsperiode kommt es zu einer Verringerung der Amplitude der Porositätsvariation. Die Modulation verschmiert.
3. Für längere Modulationsperioden ist trotz eines symmetrischen aufgeprägten Ätzstromprofils eine leichte Asymmetrie des Modulationsprofils beobachtbar. Die Anstiege (Aufweitungen) sind kürzer und steiler, die abfallenden Flanken (Einengungen) länger und damit flacher.

6.2.3 Modell zur Erklärung der Modulation

Im folgenden soll eine anschauliche Erklärung für die experimentellen Beobachtungen gegeben werden [61]. Betrachtet man die Spitze einer modulierten Pore zum Zeitpunkt $t=0$, zu dem der Ätzstrom I ein Minimum hat, so wird nur eine kleine Fläche $A_{\text{min}} = \frac{l_{\text{min}}}{j_{\text{PS}}}$ an der äußersten Porenspitze geätzt [Abb. 6.8 (links)].

Alle ankommenden Löcher werden durch die Raumladungszone auf diesen kleinen Bereich fokussiert. Die Löcher oxidieren das Silizium in einer dünnen Schicht zu SiO_2 , welches dann chemisch durch die Flußsäure abgeätzt wird. Oxidbildung und chemische Abätzung sind im Gleichgewicht. Wird die Beleuchtung erhöht, steigt der Ätzstrom an. Es treffen mehr Löcher an den Porenspitzen ein. Diese zusätzlichen Löcher können nicht über den bereits oxidierten Bereich der Porenspitze abfließen, da das Oxid eine Barriere darstellt. Sie diffundieren innerhalb der Raumladungszone entlang der Porenoberfläche hoch, bis sie in einen nicht mehr oxidierten Bereich gelangen. Dort führen sie zur Oxidbildung. Auch dieses Oxid wird von der Flußsäure chemisch abgeätzt, so daß auch in diesem zusätzlich geätzten Gebiet die Stromdichte j_{PS} auftritt. Damit wird die Pore nicht mehr nur an der direkten Porenspitze geätzt, sondern auch noch an den Seiten. Der Anstieg des Ätzstromes führt daher zu einer nachträglichen

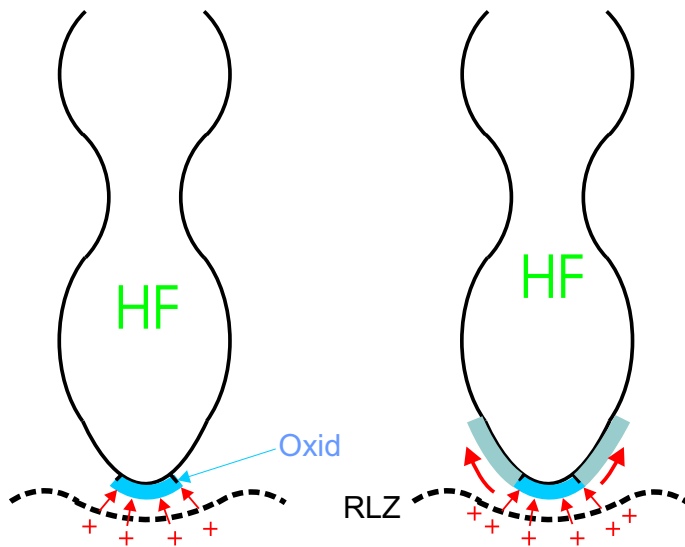


Abbildung 6.8: Zur Erklärung der Verschmierung des Modulationsprofils. Links: Es fließt der minimale Ätzstrom. Nur die äußerste Porenspitze ist mit Oxid (blau) belegt und wird geätzt. Alle ankommenden elektronischen Löcher werden in dieser Region verbraucht. Rechts: Ansteigender Ätzstrom. Elektronische Löcher wandern an den Seiten hoch bis sie in einen Bereich gelangen, wo noch keine Oxidschicht existiert. Bildung einer neuen Oxidschicht an den Seiten der Pore (grau). Nachträgliche Aufweitung durch Abätzung dieses Oxids. RLZ=Raumladungszone

Aufweitung bereits geätzter Porenbereiche. Die beabsichtigte Porosität $p_{2D,min}^{theorie}$ wird nicht erreicht, da durch den nachfolgenden Anstieg des Ätzstromes der bereits geätzte enge Porenbereich wieder aufgeweitet wird. Die beabsichtigte Porosität $p_{2D,max}^{theorie}$ wird ebenfalls nicht erreicht, da einige Löcher in höherliegende Bereiche diffundieren und somit nicht zur Ausbildung eines maximalen Porendurchmessers an der direkten Porenspitze beitragen. Die Amplitude der Modulation ist somit geringer als beabsichtigt – die Modulation "verschmiert".

Am deutlichsten macht sich diese Verschmierung für sehr steile Anstiege des Ätzstromes $\frac{\partial I}{\partial t}$ bemerkbar [Abb. 6.9].

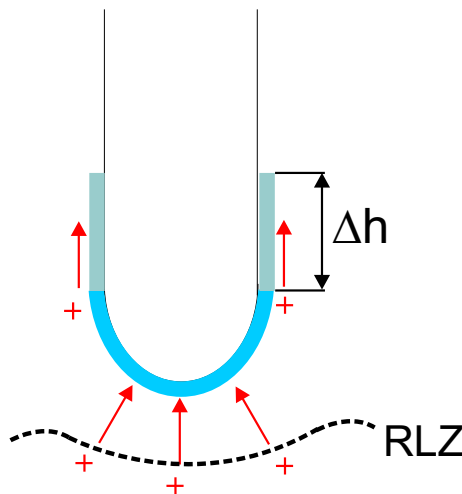


Abbildung 6.9: Beispiel einer sprunghaften Erhöhung des Ätzstromes. Die zusätzlich generierten elektronischen Löcher wandern an den Seiten der Poren bis zu einer Höhe Δh hoch und bilden in den geraden Bereichen der Poren eine neue Oxidschicht (grau). Nachfolgend kommt es zur Aufweitung dieses Porenabschnitts durch Abätzung des Oxids.

Nimmt man als Extremfall eine sprunghafte Erhöhung des Ätzstromes von I_1 auf $I_2 = I_1 + \Delta I$ an, so erhöht sich die geätzte Fläche von $A_1 = \frac{I_1}{j_{PS}}$ auf $A_2 = \frac{I_2}{j_{PS}}$. Das entspricht einem Anstieg der geätzten Fläche von $\Delta A = \frac{\Delta I_{\text{ätz}}}{j_{PS}}$. Setzt man weiterhin gerade zylindrische Poren mit kreisrundem Porenquerschnitt voraus, so entfällt dieser Zuwachs an geätzter Fläche nahezu vollständig auf den Bereich der geraden Porenwand. Die zylindrische Porenwand wird daher in einem Abschnitt

$$\Delta h = \frac{\Delta A}{2\pi r N} = \frac{\Delta I}{2\pi r N j_{PS}} \quad (6.2)$$

aufgeweitet, wobei N die Anzahl der Poren der Probe bezeichnet. Eine beabsichtigte Erhöhung des Porenradius um Δr ist mit einer Erhöhung der Porenquerschnittsfläche um $\Delta A_{\text{Pore}} \approx 2\pi r \cdot \Delta r$ verbunden.

Daraus folgt aber außerdem noch eine Erhöhung der gesamten geätzten Fläche um $\Delta A = \Delta A_{\text{pore}} \cdot N$. Mit (6.2) ergibt sich daraus, daß $\Delta h = \Delta r$. Die beabsichtigte sprunghafte Aufweitung des Porendurchmessers um Δr führt zu einer Aufweitung der bereits geätzten Pore auf einer Länge von ebenfalls Δr . Das verursacht die Verschmierung des beabsichtigten stufenförmigen Aufweitungsprofils.

Für langsamere Anstiege $\frac{\partial I}{\partial t}$ ist die Verschmierung geringer. Ein linearer Anstieg wie im Experiment kann gedanklich in mehrere kleine Sprünge dI unterteilt werden, die jeweils nur zu einem kleinen Anstieg dA der geätzten Fläche führen. Da die Pore während des linearen Anstiegs des Stromes auch noch weiter in die Tiefe wächst, kommt es nicht zu einem so weiten Hochwandern der zusätzlichen Löcher in bereits geätzte Porenabschnitte. Ein flacherer Anstieg führt daher zu einer geringeren Verschmierung des Modulationsprofils.

Mit diesen Modellvorstellungen ist die Verschmierung des Modulationsprofils und die Abnahme der Modulationsamplitude zu verstehen. Die Verkürzung der Modulationsperiode l_z^{exp} gegenüber den erwarteten l_z^{theorie} ist damit allein aber noch nicht zu erklären. Das liegt daran, daß bisher die Stromdichte j_{PS} während des Anstiegs des Ätzstromes als konstant angenommen wurde. j_{PS} bestimmt über (3.4) die Ätzgeschwindigkeit v und ist nur von der Konzentration der Flußsäure c_{HF} und der Temperatur T an der Porenspitze abhängig [siehe (3.9)]. Während die Temperatur als konstant angesehen werden kann, gilt das für c_{HF} während eines Ätzstromanstiegs nicht. Durch eine schlagartige Erhöhung im Angebot an elektronischen Löchern infolge der Erhöhung der Beleuchtungsstärke, kommt es zu einer starken Intensivierung der chemischen Reaktion. Es werden mehr Siliziumatome zusammen mit HF-Molekülen zu $[\text{SiF}_6]^{2-}$ umgesetzt, so daß c_{HF} an der Porenspitze sinkt und die Konzentration der Reaktionsprodukte ($[\text{SiF}_6]^{2-}$) steigt. Dadurch verlangsamt sich die chemische Oxidauflösung. j_{PS} sinkt. Damit verringert sich auch die Ätzgeschwindigkeit während der Anstiegszeit τ_{Anstieg} des Ätzstromes. Sie ist während dieses Zeitraumes geringer als bei einer geraden Pore gleicher Tiefe. Dadurch ist auch der während τ_{Anstieg} geätzte Abschnitt der Pore kürzer als vom Modell der geraden Poren her erwartet.

Sinkt der Strom während des Zeitraumes τ_{Abfall} dagegen ab, so geht die Verarmung an Flußsäure an den Porenspitzen wieder zurück. c_{HF} steigt und damit nehmen auch j_{PS} und die Ätzgeschwindigkeit v zu. Daher ist der während der Abfallzeit τ_{Abfall} geätzte Porenabschnitt länger als der während der Anstiegszeit τ_{Anstieg} geätzte. Das erklärt die leichte Asymmetrie im Anstieg und Abfall des Modulationsprofils, was sich in den unterschiedlichen Anstiegen der linearen Fits für die Probe mit $l_z^{\text{exp}} = 3,59 \mu\text{m}$ äußerte. Die Verkürzung der gesamten Modulationsperiode l_z^{exp} gegenüber den Erwartungen l_z^{theorie} ergibt sich ebenfalls aus der Verkürzung des während τ_{Anstieg} geätzten Porenabschnitts.

Mit diesem qualitativen Modell lassen sich somit alle drei wesentlichen experimentellen Beobachtungen des letzten Abschnitts erklären.

Als wichtiges Ergebnis dieses Abschnitts bleibt festzuhalten, daß die Variation der Modulationsperiode und des Modulationsprofils durch die Variation der Beleuchtung während des Ätzprozesses möglich ist. Bei zu kurzen Modulationsperioden ($l_z < a$) tritt aber eine starke Verringerung der Amplitude auf – die Modulation wird stark verschmiert bzw. verschwindet ganz.

6.3 Photonische Bandlücke durch Modulation des Porendurchmessers

6.3.1 Vorbetrachtung

Um die 3D-Bandstruktur für eine Probe mit moduliertem Porendurchmesser zu berechnen, muß die Variation des Porendurchmessers mit der Tiefe genau bekannt sein. Das Anschleifen der Probe unter einem kleinen Winkel und das nachfolgende Ausmessen der Porenquerschnitte anhand der REM-Bilder (siehe Kapitel 6.2) liefert einen genauen Eindruck von der Variation der Porosität mit der Porentiefe. Wie aus den REM-Bildern zu sehen war, entsprechen die Porenquerschnitte aber nicht perfekten Kreisen, sondern eher Quadraten mit abgerundeten Ecken. Näherungsweise werden im folgenden aber kreisrunde Poren angenommen. Erst im nächsten Kapitel wird auf die Auswirkungen der quadratischen Porenquerschnittsform eingegangen.

Der Durchmesser der kreisrunden Modellporen wird so gewählt, daß die kreisrunde Porenquerschnittsfläche A_{Kreis} der Modellporen mit der aus den REM-Aufnahmen erhaltenen Querschnittsfläche der abgerundeten Quadrate A_{quad} übereinstimmt. Somit wird die periodische Variation der Porenquerschnittsfläche entlang der Porenachse (z-Richtung) in eine Variation des Porendurchmessers r von idealisierten kreisrunden Poren übersetzt. In Abb. 6.10 ist diese Vorgehensweise am Beispiel einer Probe mit einer 2D-Gitterkonstante $a=1,5\mu\text{m}$ und einer Modulationsperiode von $l_z=2\mu\text{m}$ dargestellt. Die Probe enthielt insgesamt 15 Modulationsperioden.

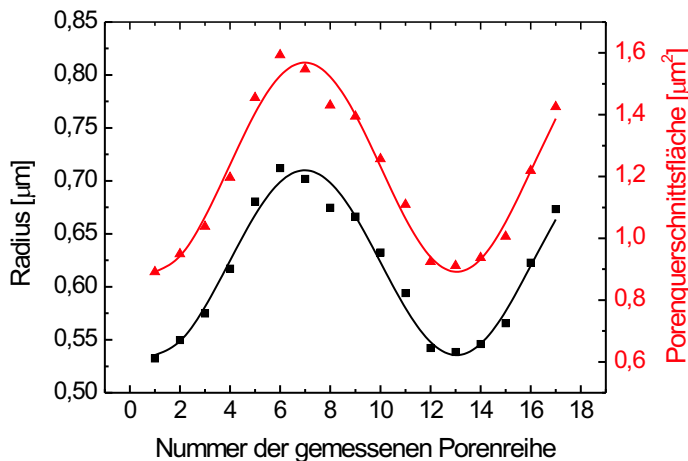


Abbildung 6.10: Modulationsprofil der Probe mit $l_z=2\mu\text{m}$. Rot: Porenquerschnittsfläche aus den REM-Aufnahmen, schwarz: daraus abgeleiteter Radius der kreisrunden Modellporen. Die Punkte stellen die Meßwerte aus den REM-Aufnahmen dar, während die Kurven gefittete Sinusfunktionen repräsentieren.

Wie aus Abb. 6.10 zu sehen ist, lassen sich die Variation der Querschnittsfläche und des Porenradius gut durch eine Sinusfunktion fitten, so daß sich für die Tiefenabhängigkeit des Porenradius der Modellporen folgende Funktion ergibt:

$$r(z) = r_0 + \Delta r \cdot \sin\left(\frac{2\pi z}{l_z}\right) \quad (6.3)$$

r_0 stellt dabei den mittleren Radius der Pore dar. Die Amplitude der Radiusvariation wird durch Δr ausgedrückt und l_z bezeichnet die Periodenlänge der Modulation entlang der Porenachse (z-Richtung). Die Periodenlänge der Modulation wurde wie in Kapitel 6.2 aus einem Längsschnitt der Poren ermittelt und beträgt $l_z=2\mu\text{m}$ ($l_z/a=1,33$). Die Parameter $r_0=0,62\mu\text{m}$ ($r_0/a=0,413$) und $\Delta r=0,09\mu\text{m}$ ($\Delta r/a=0,06$) wurden aus dem Fit aus Abb. 6.10 ermittelt. Da die Poren durch die Lithographie in einem 2D-hexagonalen Gitter angeordnet sind, läßt sich die 3D-Gesamtstruktur durch ein einfaches 3D-hexagonales Gitter beschreiben, wobei l_z die Gitterkonstante in z-Richtung bestimmt. Die 1. Brillouinzone hat somit ebenfalls eine hexagonale Form [Abb. 6.11].

Die 3D-Bandstruktur [Abb. 6.11] wurde von K. Busch, Universität Karlsruhe, mit der Ebenen-Wellen-Methode unter Verwendung von 847 ebenen Wellen berechnet. Die Abweichungen der Frequenzwerte im Vergleich zu Bandstrukturrechnungen mit einer höheren Anzahl ebener Wellen war

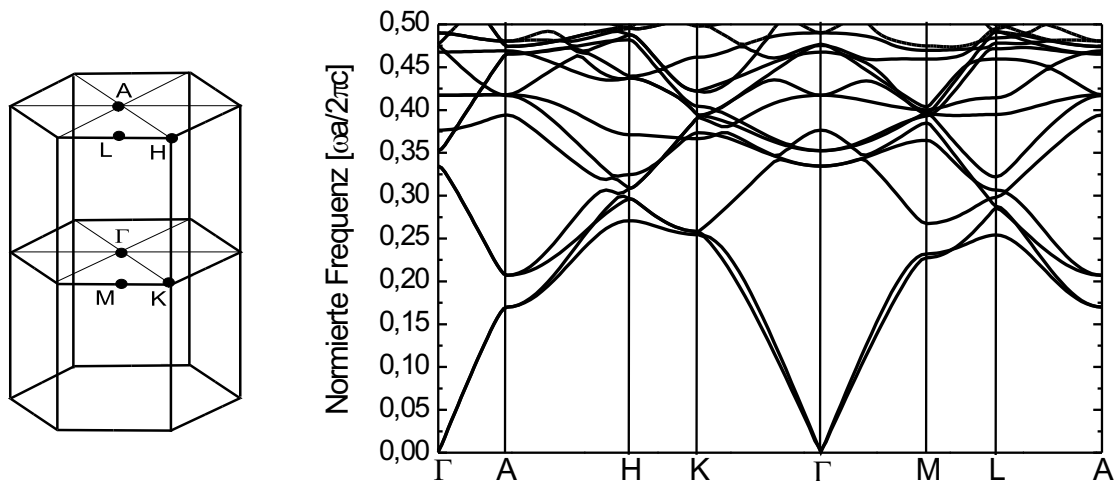


Abbildung 6.11: Links: 1. Brillouinzone des hexagonalen Gitters mit Bezeichnung der Hochsymmetriepunkte. Rechts: 3D-Bandstruktur für sinusförmig modulierte Poren mit $l_z/a=1,33$; $r_0/a=0,413$; $\Delta r/a=0,06$ [Bandstrukturechnung von K. Busch].

kleiner als 1%. Damit wurde die Konvergenz der Bandstrukturechnung bestätigt. Der abgeschrittene k -Pfad in der ersten Brillouinzone umfaßt alle Hochsymmetriepunkte. Die k -Vektoren in der Γ -K-M-Ebene repräsentieren dabei Ausbreitungsrichtungen in der xy -Ebene des Kristalls. Dies ist analog zur Wellenausbreitung in der Periodizitätsebene des 2D-hexagonalen photonischen Kristalls mit geraden (unmodulierten) Poren. Die in dieser Ebene laufenden Wellen spüren wie im 2D-Kristall vor allem die starke Variation des Brechungsindex zwischen Siliziumwänden und Luftporen. Die Bandstruktur in der Γ -K-M-Ebene ähnelt daher zumindest für die unteren Bänder stark dem 2D-Fall (siehe Abb. 5.6). Allerdings lassen sich im 3D-Kristall die Moden nicht mehr in E- und H-Polarisation aufspalten. Diese Aufspaltung war nur für 2D-Kristalle möglich, da dort die Struktur homogen in z -Richtung ausgedehnt war und jede Ebene, die parallel zur xy -Ebene lag, eine Spiegelebene darstellt [16]. Im 3D-hexagonalen photonischen Kristall ist die Lage der Spiegelebenen eingeschränkt. Sie können nur auf dem Niveau der maximalen oder minimalen Porendurchmesser liegen, aber nicht dazwischen. Im allgemeinen kommt es daher zu einer Mischung von E- und H-Polarisation für k -Vektoren in der Γ -K-M-Ebene ähnlich wie in 2D-Sandwich-Strukturen [20]. Für die untersten Bänder ist diese Mischung der Polarisationen aber noch gering, was wiederum die starke Ähnlichkeit der 2D- und 3D-Bandstruktur im Bereich der Γ -K-M-Ebene für diesen langwelligen Spektralbereich begründet.

Betrachtet man nun die Bandstruktur entlang Γ -A, so existiert eine Bandlücke im Bereich $0,17 < \frac{\omega a}{2\pi c} < 0,207$. Mit einer Zentrumsfrequenz von $\frac{\omega_{\text{zentr}} a}{2\pi c} = 0,189$ ergibt sich damit eine relative Breite der Bandlücke von $\frac{\Delta\omega}{\omega_{\text{zentr}}} = 19,6\%$. Diese Bandlücke stellt die fundamentale Bandlücke in z -Richtung dar, die von der Bragg-Streuung an der periodischen Modulation des Porendurchmessers hervorgerufen wird. Das entspricht der Beugung an den (001) Netzebenen des 3D-hexagonalen Kristalls. Die große relative Breite der Bandlücke von $\frac{\Delta\omega}{\omega_{\text{zentr}}} = 19,6\%$ folgt aus der hohen relativen Modulationsamplitude von $\Delta r/r_0 = 14,5\%$. Dadurch ist der dielektrische Kontrast zwischen den Ebenen mit hohem Siliziumanteil (Porendurchmesser minimal) und niedrigem Siliziumanteil (Porendurchmesser maximal) hoch.

Die betrachtete Bandlücke ist die unterste in der gesamten Bandstruktur. In diesem langwelligen Spektralbereich tritt noch keine Beugung von Licht in andere Bragg-Reflexe auf. Die fundamentale Bandlücke in Γ -A-Richtung sollte sich daher durch spiegelnde Totalreflexion und Verschwinden der Transmission im entsprechenden Spektralbereich nachweisen lassen.

6.3.2 Optische Messung

Da Transmissionsmessungen entlang der Porenachse einfach durchzuführen sind, wurde diese Methode gewählt, um die Bandlücke entlang der Γ -A-Richtung nachzuweisen. Die Messung wurde mit einem FTIR-Spektrometer durchgeführt. Die Strahlung war unpolarisiert und wurde durch eine Spiegeloptik leicht auf die Probe fokussiert. Die maximale Winkelabweichung von der optischen Achse betrug dabei $\alpha=6,4^\circ$. Diese geringe Divergenz der Strahlung verringert sich innerhalb des photonischen Kristalls noch weiter, da die Strahlen beim Übergang in den photonischen Kristall zum Lot hin gebrochen werden. Eine einfache Abschätzung für die Divergenz innerhalb des photonischen Kristalls kann durch Berechnung des Brechungswinkels β unter Annahme einer effektiven dielektrischen Konstante ϵ_{eff} im langwelligen Spektralbereich angegeben werden:

$$\frac{\sin\alpha}{\sin\beta} = n_{\text{eff}} \quad (6.4)$$

Der effektive Brechungsindex n_{eff} kann aus der effektiven dielektrischen Konstante ϵ_{eff} , die über die Maxwell-Garnet-Formel berechnet wird, erhalten werden [62]:

$$\frac{(\epsilon_{\text{eff}} - \epsilon_{\text{Si}})}{(\epsilon_{\text{eff}} + 2\epsilon_{\text{Si}})} = p^{3D} \frac{(\epsilon_{\text{Luft}} - \epsilon_{\text{Si}})}{(\epsilon_{\text{Luft}} + 2\epsilon_{\text{Si}})} \quad (6.5)$$

p^{3D} bezeichnet dabei die über die gesamte Struktur gemittelte Porosität und beträgt:

$$p^{3D} = \frac{V_{\text{Luft}}}{V_{3D\text{-Zelle}}} = \frac{\int_0^{l_z} \pi r^2(z) dz}{\frac{\sqrt{3}}{2} a^2 \cdot l_z} \quad (6.6)$$

Für die betrachtete sinusförmige Porenmodulation mit den experimentell bestimmten Parametern $r_0 = 0,62 \mu\text{m}$ ($r_0/a=0,413$) und $\Delta r=0,09 \mu\text{m}$ ($\Delta r/a=0,06$) ergibt sich damit $p^{3D} = \frac{2}{\sqrt{3}} \frac{\pi}{a^2} (r_0^2 + \frac{\Delta r^2}{2}) = 0,63$. Daraus folgt nach (6.5) $\epsilon_{\text{eff}}=4,1$ und weiter $n_{\text{eff}}=2,02$. Damit reduziert sich die maximale Abweichung der Strahlrichtung von der Γ -A-Richtung auf $\beta = 3,2^\circ$ innerhalb des photonischen Kristalls. Divergenzeffekte sind daher vernachlässigbar.

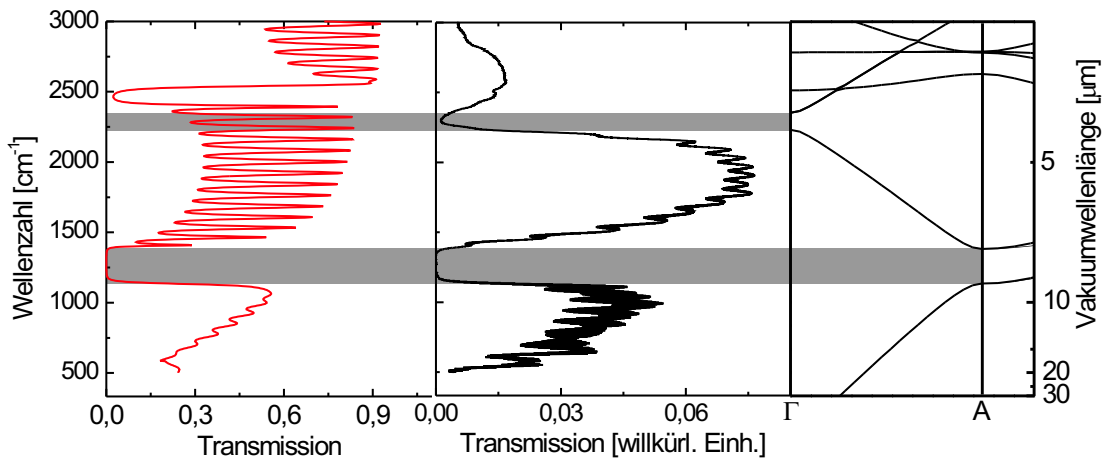


Abbildung 6.12: Transmission für die Probe mit $l_z=2\mu\text{m}$. Links: 1D-Transmissionsrechnung entlang Γ -A, Mitte: Transmissionsmessung entlang Γ -A, Rechts: 3D-Bandstruktur für Γ -A.

Betrachtet man das gemessene Transmissionsspektrum [Abb. 6.12(Mitte)], so ist im Bereich $1160 \text{ cm}^{-1} < \omega < 1380 \text{ cm}^{-1}$ ein Verschwinden der Transmission erkennbar. In diesem Bereich befindet sich die experimentell bestimmte photonische Bandlücke der Probe. Vergleicht man damit die aus der

Bandstruktur ermittelte spektrale Lage der fundamentalen Bandlücke, so ist eine exzellente Übereinstimmung zu erkennen. Der untere graue Balken, der die spektrale Lage der Bandlücke in der 3D-Bandstruktur verdeutlicht, deckt sich perfekt mit dem Bereich der verschwindenden Transmission. Eine ebenfalls sehr gute Übereinstimmung zwischen Experiment und Theorie ergibt sich für die Bandlücke 2. Ordnung bei einer Frequenz von 2300cm^{-1} , die durch den oberen schmalen grauen Balken in Abb. 6.12 repräsentiert wird.

Im folgenden soll getestet werden, inwieweit die Lage der Bandlücken noch durch eine 1D-Transfer-Matrix-Transmissionsrechnung reproduziert werden kann. Hierbei wird die Periodizität des Brechungsindex innerhalb der xy -Ebene vernachlässigt. Für jede Ebene wird aus der dort vorliegenden 2D-Porosität $p_{2D} = \frac{A_{\text{Luft}}}{A_{2D\text{-Zelle}}}$ ein effektiver Brechungsindex $n_{\text{eff}}(z)$ bestimmt. Dafür wird wiederum die Maxwell-Garnet-Formel aus (6.5) verwendet, wobei jetzt statt p^{3D} nun p_{2D} verwendet wird. Der höchste effektive Brechungsindex ergibt sich für die Ebenen, in denen der Porenradius minimal wird und ein großer Flächenanteil von massivem Silizium eingenommen wird. Die Ebenen mit maximalem Porendurchmesser und somit maximalem Luftanteil weisen den niedrigsten effektiven Brechungsindex auf [Abb. 6.13].

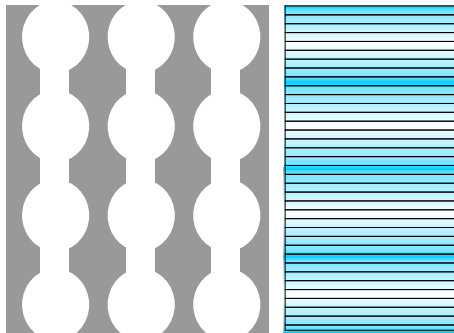


Abbildung 6.13: Prinzip der Definition eines effektiven Brechungsindex $n_{\text{eff}}(z)$ und Zerlegung der Struktur in einzelne Lamellen entlang der z -Richtung (Γ -A). Links: Schema der modulierten Porenstruktur, rechts: Übergang zu einem 1D-Lamellenmodell. Blau: hoher effektiver Brechungsindex, weiß: niedriger effektiver Brechungsindex.

Um eine Transmissionsrechnung entlang der z -Achse zu ermöglichen, wird die Struktur in einzelne Lamellen zerlegt. Jede Lamelle besitzt einen eigenen konstanten effektiven Brechungsindex. Breitet sich eine Welle in z -Richtung in dieser Lamellenstruktur aus, so wird sie an jeder Grenzfläche zwischen zwei benachbarten Lamellen teilweise reflektiert und transmittiert. In jeder Lamelle laufen daher zwei Wellen. Eine vorwärts (nach unten), die von darüber liegenden Lamellen transmittiert wurde und eine rückwärts (nach oben), die von tieferliegenden Lamellen zurückreflektiert wurde. Mit Hilfe eines Transfer-Matrix-Formalismus [63] werden diese Wellen in den verschiedenen Lamellen über die Fresnel-Formeln miteinander verknüpft. Am Ende läßt sich die Transmission für die gesamte Lamellenstruktur analytisch exakt angeben. Dieser 1D Transfer-Matrix-Formalismus liegt dem von W. Theiß entwickelten Computerprogramm "Scout 98" zugrunde, das zur Berechnung der Transmission des 1D Lamellenmodells der Probe benutzt wurde [Abb. 6.12(links)].

Auch in der 1D-Transmissionsrechnung verschwindet die Transmission im Bereich $1180\text{cm}^{-1} < \omega < 1380\text{cm}^{-1}$, was sehr gut mit dem Experiment und der 3D-Bandstrukturrechnung übereinstimmt. Diese gute Übereinstimmung gilt allerdings nicht mehr für die Bandlücke 2. Ordnung. Sie liegt in der 1D-Transmissionsrechnung bei zu hohen Frequenzen. Für diese höheren Frequenzen kann die Periodizität der 3D-photonischen Kristallstruktur in der xy -Ebene offensichtlich nicht mehr vollkommen vernachlässigt werden.

Neben den photonischen Bandlücken fallen im gemessenen Transmissionspektrum und vor allem in der 1D-Transmissionsrechnung scharfe Oszillationen im Bereich der photonischen Bänder auf. Sie entstehen durch die Mehrfachreflexion des Lichts an der Oberseite (Grenzfläche Luft/modulierte Poren) und Unterseite (Grenzfläche Porenspitzen/massives Silizium Substrat) des 3D-photonischen Kristalls. Damit entsprechen sie den aus der Optik bekannten Fabry-Perot Oszillationen von dünnen Schichten (siehe Anhang C und Kapitel 6.5).

Ein großer Vorteil der modulierten Porenstruktur liegt darin, daß verschiedene Modulationsperioden relativ einfach erzeugt werden können. Eine Verkürzung der Modulationsperiode l_z führt zu einer kleineren Wellenlänge, bei der die Braggbedingung für Streuung an den (001)-Ebenen erfüllt wird. Die fundamentale Bandlücke in Γ -A-Richtung verschiebt sich somit zu höheren Frequenzen. Um das zu demonstrieren, wurde eine Probe mit einer Modulationsperiode von $l_z=1,69\mu\text{m}$ ($l_z/a=1,13$) hergestellt. Die Variation des Porendurchmessers wurde ebenfalls wieder durch eine Sinusfunktion modelliert. Die Parameter r_0 und Δr wurden jetzt zu $r_0=0,63\mu\text{m}$ ($r_0/a=0,42$) und $\Delta r=0,09\mu\text{m}$ ($\Delta r/a=0,053$) bestimmt. 1D-Transmissionsrechnung, experimentell bestimmtes Transmissionsspektrum und 3D-Bandstruktur in Γ -A-Richtung für diese Probe sind in Abb. 6.14 dargestellt. Auch hier ist eine gute Übereinstimmung bei der Lage der fundamentalen Bandlücke zwischen allen drei Diagrammen zu erkennen. Die

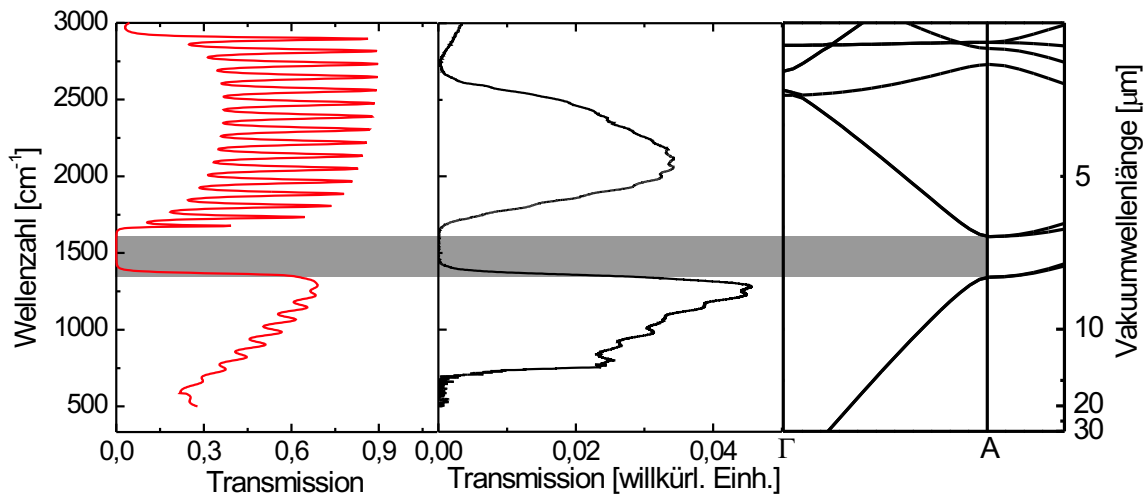


Abbildung 6.14: Transmission für die Probe mit $l_z=1,69\mu\text{m}$. Links: 1D-Transmissionsrechnung entlang Γ -A, Mitte: Transmissionsmessung entlang Γ -A, Rechts: 3D-Bandstruktur für Γ -A [64]

leichten Abweichungen zwischen Transmissionsmessung und 3D-Bandstruktur sowie zwischen 1D-Transmissionsrechnung und 3D-Bandstruktur werden in den Abschnitten 6.3.3.2 und 6.3.3.3 diskutiert. Zunächst soll geklärt werden, ob mit der 3D-hexagonalen Struktur aus modulierten Poren eine vollständige 3D-photonische Bandlücke erreichbar ist.

6.3.3 Diskussion

6.3.3.1 Ist eine komplette 3D-Bandlücke erreichbar?

Ein wichtiges Ziel bei der Herstellung modulierter Poren war es, einen 3D-photonischen Kristall herzustellen, der zusätzlich zur vollständigen Bandlücke in der xy -Ebene, die von der 2D-hexagonalen Anordnung der Poren herrührt, noch eine Bandlücke entlang der z -Richtung besitzt. Die Idee bestand darin, die Modulationsperiode so zu wählen, daß die vollständige 2D-Bandlücke mit der Bandlücke in der 3. Dimension überlappt und so eine komplette 3D-Bandlücke erzeugt.

Abb. 6.15 zeigt eine Bandstruktur für sinusförmig modulierte Poren mit den Parametern $l_z/a=0,55$; $r_0/a=0,42$) und $\Delta r/a=0,06$. Die Modulationsperiode ist so gewählt worden, daß es zu einer Überlappung der vollständigen 2D-Bandlücke in der Γ -M-K-Ebene (grauer Balken) mit der Bandlücke am A-Punkt kommt. Eine komplette 3D-Bandlücke bildet sich allerdings nicht heraus. Verantwortlich dafür sind Bänder, die in der Nähe der H- und L-Punkte den Spektralbereich der Bandlücke kreuzen. Zusätzlich tritt noch in Γ -A-Richtung ein Band auf, was in den Bereich der Bandlücke hineinreicht (in Abb. 6.15 rot eingrahmt). Damit ist eine vollständige 3D-Bandlücke in dieser Struktur nicht möglich.

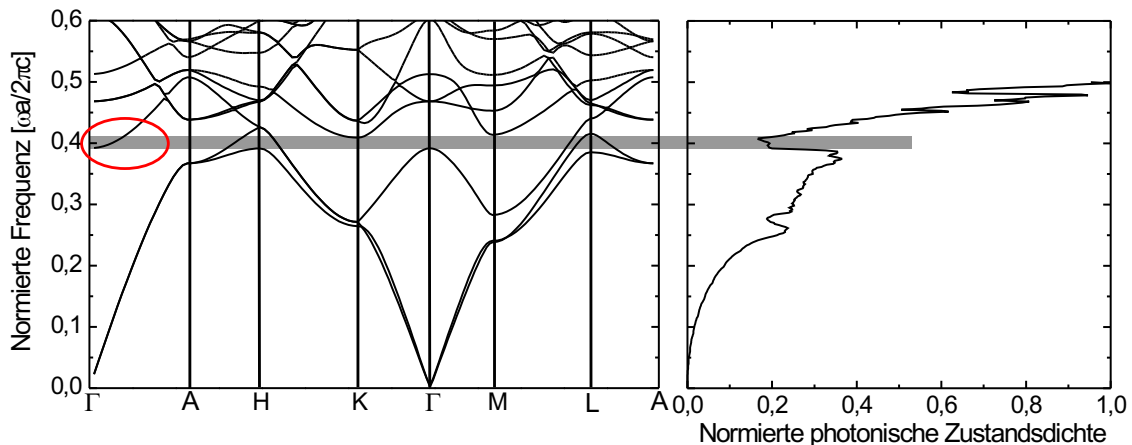


Abbildung 6.15: Links: 3D-Bandstruktur für eine modulierte Porenstruktur mit $l_z/a=0,55$; $r_0/a=0,42$ und $\Delta r/a=0,06$. Der graue Balken zeigt die vollständige 2D-Bandlücke in der Γ -M-K-Ebene. Rechts: Entsprechende normierte photonische Zustandsdichte. [Bandstrukturrechnung von K. Busch]

Betrachtet man allerdings die photonische Zustandsdichte in Abb. 6.15, so fällt im Bereich der 2D-Bandlücke (grauer Balken) zumindest ein Bereich verminderter photonischer Zustandsdichte auf. Die photonische Zustandsdichte verringert sich dort um ca. 50% verglichen mit den angrenzenden Spektralbereichen.

6.3.3.2 Abweichungen zwischen Theorie und Experiment

Keht man zu Abb. 6.14 zurück, so fällt eine leichte Verschiebung der fundamentalen Bandlücke zu höheren Frequenzen in der 1D-Transmissionsmessung gegenüber der 3D-Bandstrukturrechnung auf. So liegt die photonische Bandlücke in der 3D-Bandstruktur zwischen $0,2 < \frac{\omega a}{2\pi c} < 0,24$, was für die vorliegende Probe einem Bereich zwischen 1333cm^{-1} und 1600cm^{-1} auf der Wellenzahlsskala entspricht. Die experimentell bestimmte Transmission verschwindet dagegen im Bereich 1420cm^{-1} - 1670cm^{-1} , während die Bandlücke in der 1D-Transmissionsrechnung zwischen 1400cm^{-1} und 1653cm^{-1} liegt.

Für die Abweichung der experimentell bestimmten Bandlücke von der 3D-Bandstruktur kann es mehrere Gründe geben:

1. Für die Berechnung der 3D-Bandstruktur wurden kreisrunde Poren angenommen. Wie bereits diskutiert wurde, ist das eine Näherung. Die leichten Abweichungen in der Position der Bandlücke kann also durch die vernachlässigte Porenform verursacht werden. Der Einfluß der eher quadratischen Porenform wird in Kapitel 6.4 geklärt.
2. Die Probe ist inhomogen, so daß die Porosität an der Stelle, wo die Transmission gemessen wurde, nicht mit der Porosität an der Stelle übereinstimmt, an der die REM-Bilder aufgenommen wurden. Die aus den REM-Bildern ermittelten Porenquerschnittsflächen und die daraus abgeleiteten Porenradien geben daher nicht die exakte Probenwirklichkeit an der Stelle der Transmissionsmessung wieder.

Ein Grund für die inhomogene Porosität der Probe sind lokale Schwankungen in der Diffusionslänge für elektronische Löcher im Siliziumwafer, die sich während des photoelektrochemischen Ätzprozesses der Poren auswirken.

Eine lokal niedrigere Diffusionslänge, die z.B. durch Inhomogenitäten im lateralen Dotierprofil des Siliziumwafers entstehen kann, führt zu einem geringeren Strom von elektronischen Löchern

zu den Poren in diesem Bereich während der Ätzung. Der Porendurchmesser fällt dort daher geringer aus als in angrenzenden Bereichen.

Im folgenden soll eine Abschätzung dieses Effekts vorgenommen werden: Die 2D-Porosität p_{2D} ist proportional zum Ätzstrom $I_{\text{ätz}}$, der sich wiederum direkt proportional zur Löcherkonzentration an den Porenspitzen verhält. Mit zunehmendem Diffusionsweg nimmt die Löcherkonzentration im n-typ Siliziumwafer durch Rekombination mit den Leitungsbandelektronen exponentiell ab, so daß sich folgende Proportionalitäten ergeben:

$$p_{2D} \sim I_{\text{ätz}} \sim e^{-\frac{d}{l_{\text{diff}}}}. \quad (6.7)$$

Dabei stellt d die Waferdicke dar, durch die die elektronischen Löcher hindurchdiffundieren müssen, um vom Ort ihrer Entstehung an der Waferrückseite bis zu den Porenspitzen an der Wafervorderseite zu gelangen. l_{diff} bezeichnet die mittlere Diffusionslänge für die Löcher. Eine lokale Veränderung der Diffusionslänge ergibt daher folgende relative Änderung der Porosität:

$$\frac{\Delta p_{2D}}{p_{2D}} = \frac{e^{-\frac{d}{l_{\text{diff}}}} \cdot d \cdot \Delta l_{\text{diff}}}{e^{-\frac{d}{l_{\text{diff}}}} \cdot l_{\text{diff}}^2} \quad (6.8)$$

Nimmt man eine mittlere Diffusionslänge von $l_{\text{diff}} = \frac{3}{4}d$ an, was für das verwendete Substratmaterial etwa zutrifft, und läßt eine 10%ige lokale Abweichung der Diffusionslänge zu ($\frac{\Delta l_{\text{diff}}}{l_{\text{diff}}} = 0,1$), so ergibt sich eine lokale relative Änderung der 2D-Porosität von:

$$\frac{\Delta p_{2D}}{p_{2D}} = \frac{d}{l_{\text{diff}}} \cdot \frac{\Delta l_{\text{diff}}}{l_{\text{diff}}} = 0,133 \quad (6.9)$$

Bleibt man beim Modell kreisrunder Poren, so ergibt das eine lokale Abweichung des mittleren Radius r_0 von $\Delta r_0/r_0 \approx 0,133/2 = 0,067$. Wird nun zur Abschätzung dieses Effekts eine 1D-Transmissionsrechnung für modulierte Poren mit einem verminderten mittleren Radius $\tilde{r}_0 = r_0 - \Delta r_0$ ausgeführt, so ist eine Verschiebung des Zentrums der Bandlücke um 7,8% zu niedrigeren Frequenzen hin zu beobachten. Damit ist die beobachtete Abweichung zwischen Experiment und 3D-Bandstruktur auf Inhomogenitäten in der Diffusionslänge der Proben zurückführbar.

Die Abweichung der spektralen Position der Bandlücke in der 1D-Transmissionsrechnung und 3D-Bandstruktur muß dagegen mit der lateralen Periodizität des Brechungsindex in der xy-Ebene zusammenhängen, da für beide Rechnungen dieselben Probenparameter benutzt wurden. Diese Variation in der xy-Ebene wird in der 3D-Bandstruktur berücksichtigt, während sie im Zuge der Berechnung des effektiven Brechungsindex im 1D-Modell verlorengeht. Daraus ergibt sich die Frage, in welchem Bereich das 1D-Modell noch gültig ist und ab wo die volle 3D-Bandstruktur zu betrachten ist.

6.3.3.3 1D-Modell oder 3D-Bandstruktur?

Solange die Wellenlänge des Lichtes viel größer als die laterale Gitterkonstante a ist, kann die Periodizität in der xy-Ebene vernachlässigt werden. In diesem langwelligen Spektralbereich liefern 1D-Modell und 3D-Bandstruktur dieselben Ergebnisse [Abb. 6.12]. Für höhere Frequenzen trifft diese Übereinstimmung nicht mehr zu. Zum einen versagt für höhere Frequenzen die Maxwell-Garnett-Näherung für die Berechnung des effektiven Brechungsindex in den Ebenen. Höhere Fourierkoeffizienten, die aus der Periodizität von $\epsilon(\vec{r})$ in der xy-Ebene herrühren, beeinflussen auch die Position der Bänder entlang Γ -A. Die Form der Bandstruktur in Γ -A Richtung stimmt dann zwar noch mit einer 1D-Bandstruktur überein, doch der Fehler bei der exakten Bestimmung der Bandlücke über das 1D-Modell wächst. Das war bei der Betrachtung der fundamentalen Bandlücke der Probe mit $l_z=2\mu\text{m}$ und der Probe mit

$l_z=1,69\mu\text{m}$ zu beobachten. Während für die erste Struktur die fundamentale Bandlücke aus der 1D-Transmissionsrechnung noch sehr gut mit der 3D-Bandstrukturrechnung übereinstimmte, kam es bei der Bandlücke der 2. Probe bereits zu Abweichungen zwischen den beiden Rechnungen.

Deutlicher wird das noch bei Betrachtung der 3D-Bandstruktur in Abb. 6.14 im Bereich um 2600 cm^{-1} . An sich müßte in diesem Bereich die Bandlücke 2. Ordnung liegen. Im gemessenen Transmissionspektrum ist auch verschwindende Transmission zu beobachten, und am Γ -Punkt kommt es auch zur Öffnung der Bänder. Eine Bandlücke in der Γ -A Richtung bildet sich laut 3D-Bandstruktur aber dennoch nicht heraus, da ein zusätzliches Band diesen Spektralbereich schneidet. Dieses Band ist aus einer 1D Bandstrukturrechnung heraus nicht erklärbar. Es muß daher mit der Periodizität des Brechungsindex in der xy -Ebene zusammenhängen. Daß die Transmission im Experiment dennoch in diesem Spektralbereich verschwindet, wird bei Betrachtung der Feldverteilungen für eine Mode dieses Bandes deutlich [Abb. 6.16]. Das E-Feld in der Ebene senkrecht zur z -Achse variiert örtlich zwischen positiven Werten und negativen Werten.

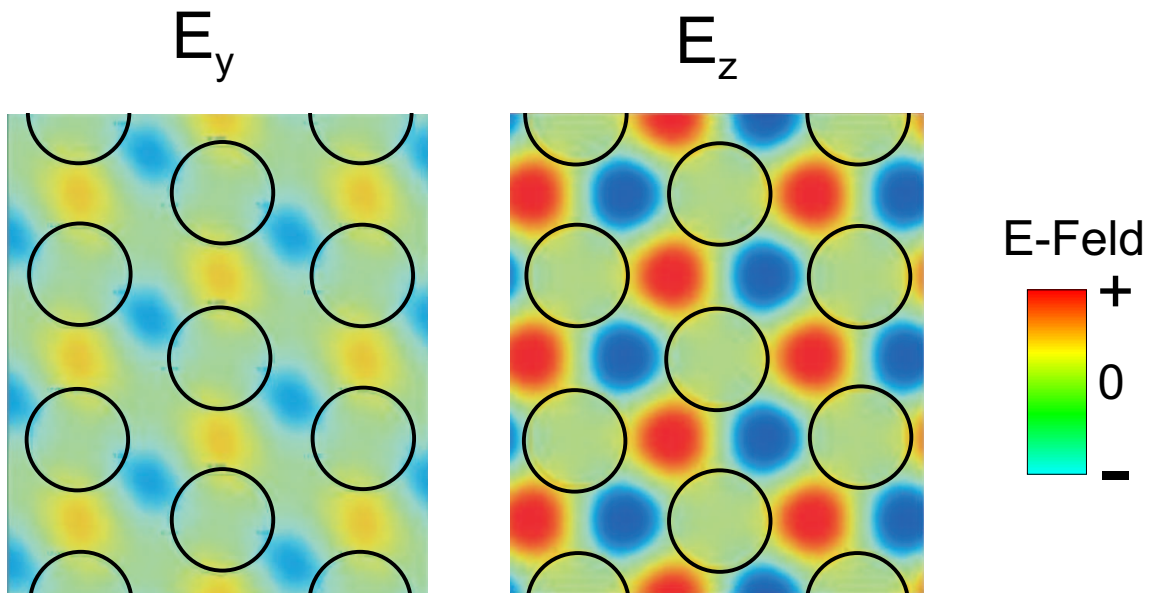


Abbildung 6.16: Feldverteilungen des E-Feldes einer Mode des rot umrandeten Bandes in Abb. 6.15. Die betrachtete Ebene ist ein Schnitt auf dem Niveau der minimalen Porendurchmesser. Links: E_y -Komponente. Rechts: E_z -Komponente des elektrischen Feldes (z -Achse steht senkrecht auf der Zeichenebene) [Feldverteilungen von C. Jamois].

Damit kann eine ebene Welle, die entlang Γ -A auf den photonischen Kristall auftrifft, nicht an das Band ankoppeln. Es handelt sich wie in Kapitel 5.1.2 um ein antisymmetrisches Band. Die Feldverteilung gibt außerdem einen Hinweis auf die Herkunft dieses Bandes. Die größten Feldstärken der Mode treten in z -Richtung auf, so daß davon auszugehen ist, daß vor allem z -polarisierte ebene Wellen zur Blochmode beitragen. Ihre Wellenvektoren liegen infolge der Transversalität daher vornehmlich in der xy -Ebene. Die periodische Feldverteilung in der xy -Ebene läßt ebenfalls auf eine Interferenz von ebenen Wellen schließen, die sich in der xy -Ebene ausbreiten. Diese Interpretation wird auch durch den Sachverhalt unterstützt, daß sich die spektrale Lage des Bandes am Γ -Punkt in Abb. 6.11, 6.14 und 6.15 kaum verändert, während die Modulationsperiode l_z stark variiert:

Für die Probe mit $l_z=2\mu\text{m}$ ($l_z/a=1,33$) [Abb. 6.11] ist das Band bei einer normierten Frequenz von $\frac{\omega a}{2\pi c}=0,375$ am Γ -Punkt zu finden. Betrachtet man danach Abb.6.14 so hat sich die spektrale Lage des Bandes am Γ -Punkt kaum verändert, obwohl die Modulationsperiode auf $l_z=1,69\mu\text{m}$ ($l_z/a=1,13$) ver-

ringert wurde. Es liegt immer noch bei $\frac{\omega a}{2\pi c}=0,379$. Für eine Struktur mit $l_z/a=0,55$ [Abb. 6.15] befindet sich das betrachtete Band am Γ -Punkt schließlich bei $\frac{\omega a}{2\pi c}=0,39$.

Die relative Konstanz des Bandes im Frequenzraum führt allerdings für kurze Modulationsperioden zur Überschneidung mit den Bandlücken in Γ -A-Richtung. Für die Probe mit $l_z=2\mu\text{m}$ ($l_z/a=1,33$) [Abb. 6.11] liegen die Bandlücken 1. und 2. Ordnung in Γ -A-Richtung bei so niedrigen Frequenzen, daß diese Bandlücken noch nicht durch dieses Band beeinträchtigt werden. Durch die kürzere Modulationsperiode der Probe von $l_z=1,69\mu\text{m}$ ($l_z/a=1,13$) [Abb.6.14] ist aber die ursprüngliche Bandlücke 2. Ordnung zu höheren Frequenzen verschoben worden und überlappt nun mit dem Band. Damit existiert in diesem Spektralbereich keine Bandlücke mehr. Für eine Struktur mit $l_z/a=0,55$ [Abb. 6.15] überlappt dann selbst die fundamentale Bandlücke teilweise mit dem betrachteten Band. Durch dieses Band wird damit die in Γ -A-Richtung wirksame photonische Bandlücke bei kleinen Modulationsperioden verringert. Die einfache 1D photonische Bandstruktur ist daher nicht mehr gültig.

Als Faustregel für die hier betrachteten Proben kann gelten, daß ab einer normierten Frequenz von $\frac{\omega a}{2\pi c}=0,35$ eine 3D-Bandstrukturrechnung gemacht werden muß, um die Dispersionsrelation in Γ -A Richtung beschreiben zu können. Für niedrigere Frequenzen ist die Bandstruktur entlang $\Gamma - A$ noch gut mit einer Bandstruktur für 1D-photonische Kristalle vergleichbar. Für Frequenzen unterhalb von $\frac{\omega a}{2\pi c}=0,2$ läßt sich dann auch die Lage der fundamentalen Bandlücke in Γ -A-Richtung mit Hilfe des 1D-Lamellenmodells und unter Verwendung der Maxwell-Garnett-Formel (6.5) genau berechnen. Das wurde durch die gute Übereinstimmung zwischen 3D-Bandstruktur und 1D-Transmissionsrechnung in Abb. 6.12 bestätigt.

6.4 Defektschicht im 3D-photonischen Kristall

6.4.1 Einführung

In diesem Abschnitt sollen die optischen Eigenschaften einer Defektschicht in 3D-photonischen Kristallen aus modulierten Makroporen untersucht werden. Eine Defektschicht kann erzeugt werden, indem man während des Ätzprozesses die Beleuchtungsstärke für einen gewissen Zeitraum konstant läßt. Dies führt zu Poren mit konstantem Durchmesser. Variiert man die Beleuchtungsstärke davor und danach periodisch, so entsteht eine Schicht die aus einem geraden Porenabschnitt besteht und die sich zwischen einem darüber und darunterliegenden modulierten Porenbereich befindet [Abb. 6.17].

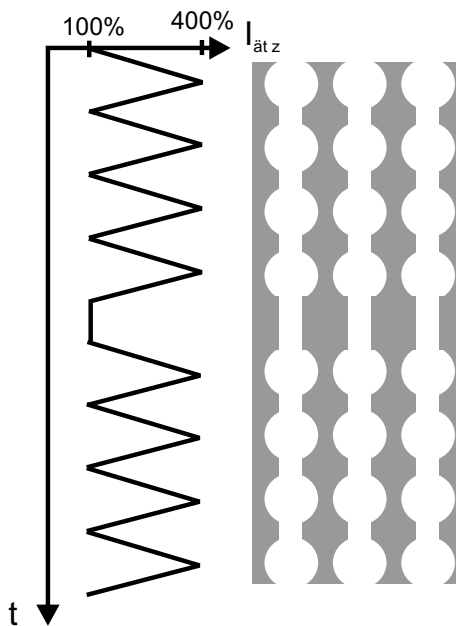


Abbildung 6.17: Herstellung einer Defektschicht in einem 3D-photonischen Kristall aus modulierten Poren. Links: Variation des Ätzstromes, rechts: Resultierendes Modulationsprofil (schematisch).

Betrachtet man die Periodizität des Brechungsindex entlang der Porenachse, so stellt diese Schicht der geraden Porenabschnitte einen Defekt dar. Da alle Poren in derselben Tiefe diesen geraden Porenabschnitt besitzen, ergibt sich damit eine Defektschicht im 3D-photonischen Kristall.

Es ist bekannt [16, 65], daß Defekte in photonischen Kristallen zu photonischen Zuständen innerhalb der Photonischen Bandlücken führen. Die elektrischen Felder dieser Defektmoden weisen dabei ihre Maxima am Ort des Defekts auf. Die Defektmoden sind damit lokalisiert. Läßt man die Periodizität des Brechungsindex in der xy -Ebene außer acht und entwirft ein 1D-Modell für die vorliegende Struktur, so ergibt sich ein 1D-photonischer Kristall mit einer Defektschicht. Diese Defektschicht kann bei entsprechender optischer Dicke einen photonischen Defektzustand in der fundamentalen photonischen Bandlücke in Γ -A-Richtung erzeugen.

6.4.2 Defektmode als Fabry-Perot-Resonanz

Im folgenden wird angenommen, daß die Modulationsperiode l_z noch so lang ist, daß die fundamentale Bandlücke unterhalb der normierten Frequenz $\frac{\omega a}{2\pi c} = 0,35$ liegt. Dann läßt sich die Dispersionsrelation in der Γ -A-Richtung durch das 1D-Modell annähern [Abb. 6.18(Mitte)].

Für Frequenzen innerhalb der photonischen Bandlücke stellen die modulierten Porenabschnitte Braggspiegel dar, zwischen denen sich die Defektschicht befindet. Diese Struktur entspricht damit einem Fabry-Perot-Interferometer. Das Zustandekommen und die spektrale Position des Defektzustandes in der fundamentalen photonischen Bandlücke läßt sich als Resonanz in diesem Fabry-Perot-Resonator verstehen. Das wird in Anhang C ausführlich beschrieben. Als wichtige Parameter eines Resonators

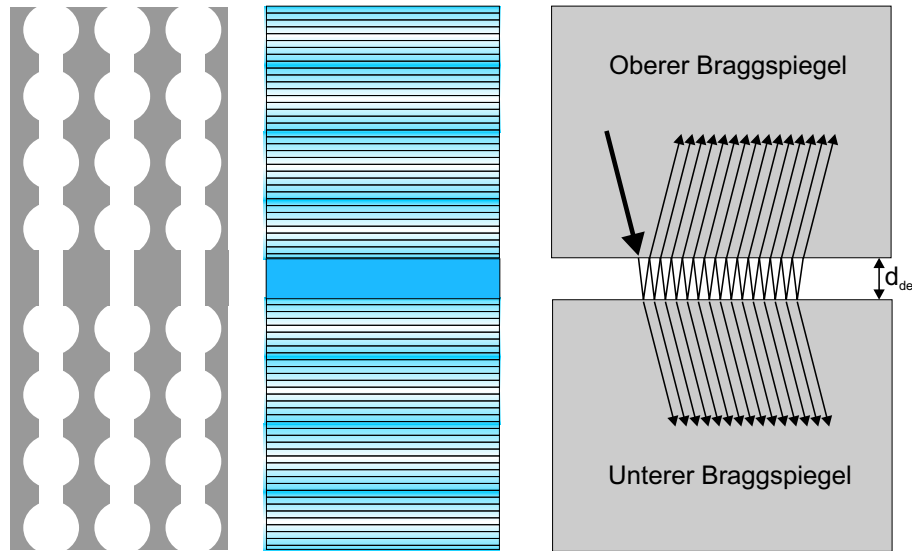


Abbildung 6.18: Näherung der modulierten Poren mit Defektschicht durch 1D-Modell. Links: Modulierte Porenstruktur (schematisch); Mitte: 1D-Näherung über Ebenen mit effektivem Brechungsindex n_{eff} (blau=hohes n_{eff} , weiß=niedriges n_{eff}); rechts: Mehrfachreflexion innerhalb des Defekts. Die Einfallsrichtung stimmt hier nicht genau mit der z-Richtung überein, um die Hin- und Herreflexionen innerhalb der Defektschicht besser sichtbar machen zu können.

ergeben sich die Finesse F und der Q-Faktor der Resonanz. Beide hängen eng mit dem Reflektivitätskoeffizienten der Braggspiegel zusammen [siehe (C.4) und (C.18)]. Ein hoher Reflektivitätskoeffizient der Braggspiegel führt damit zu einer hohen Finesse und einem hohen Q-Faktor. Das Licht verbleibt länger im Resonator und wird häufiger hin- und herreflektiert, bevor es ihn verläßt. Damit kommt es zu einer starken Felstärkeüberhöhung in der Defektschicht.

Im Prinzip lassen sich durch einen Defekt in einem photonischen Kristall Defektmodes mit beliebig hohem Q-Faktor erzeugen. Dazu muß nur die Anzahl der den Defekt einschließenden Elementarzellen des photonischen Kristalls groß genug sein. Mit steigender Anzahl der Elementarzellen nähert sich ein endlicher photonischer Kristall immer mehr dem Idealfall eines unendlich ausgedehnten photonischen Kristalls an. Die Reflektivität innerhalb der Bandlücke geht daher gegen 100%. In der Praxis begrenzen allerdings Streuverluste und Absorption die Finesse und den Q-Faktor. Ein hoher Q-Faktor sowie eine hohe Finesse sind damit Kennzeichen für eine hohe Qualität der photonischen Kristallstruktur.

6.4.3 Optische Messungen

Um die Q-Faktoren von Defektoresonanzen im 3D-photonischen Kristall aus modulierten Poren zu untersuchen, wurden 3 Proben hergestellt. Das Ätzstromprofil für alle Proben war gleich. Der einzige Unterschied zwischen den Proben bestand in der Anzahl der Modulationsperioden, die sich oberhalb und unterhalb der Defektschicht befanden. Die Proben wiesen jeweils 5 [Abb. 6.19], 6 und 7 Modulationsperioden oberhalb und unterhalb der Defektschicht auf.

Um das Profil der Modulation und den Porenquerschnitt im Bereich der Defektschicht zu bestimmen, wurde die Probe schräg angeschliffen und die Porenquerschnittsflächen aus den REM-Aufnahmen der Schliifffläche bestimmt. Die Querschnitte der Poren ähneln wie in Kapitel 6.2 abgerundeten Quadraten. Nähert man die Modulationen durch eine Sinuskurve an, so ergeben sich folgende Parameter: $p_{\text{max}}^{2D} = 0,847$; $p_{\text{min}}^{2D} = 0,454$; $l_z = 1,73\mu\text{m}$. Die Dicke der Defektschicht $d_{\text{def}} = 2,12\mu\text{m}$ konnte aus der Längsschnittaufnahme bestimmt werden [Abb. 6.19]. Auch im Bereich der geraden Poren in der Defektschicht weisen die Porenquerschnitte die Form abgerundeter Quadrate auf [Abb. 6.20]. Die Porosität

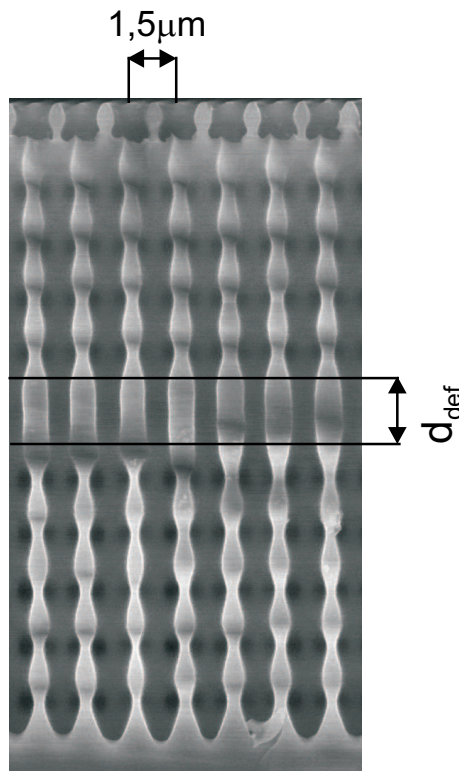


Abbildung 6.19: REM-Aufnahme des Längsschnittes einer Probe mit 5 Modulationsperioden oberhalb und unterhalb der Defektschicht. Die Dicke der Defektschicht d_{def} beträgt 2,12 µm.

für den Porenabschnitt der Defektschicht beträgt $p_{\text{def}}^{2D}=0,283$. Zusätzlich zu den drei hier beschriebenen Proben mit Defektschicht wurde noch eine Referenzprobe ohne Defektschicht angefertigt. Sie bestand aus zehn fortlaufenden Modulationsperioden mit derselben Modulation wie die Braggspiegel. Das Ätzstromprofil für die Erzeugung dieser Modulationen stimmte mit dem Ätzstromprofil der modulierten Bereiche der Proben mit Defektschicht überein.

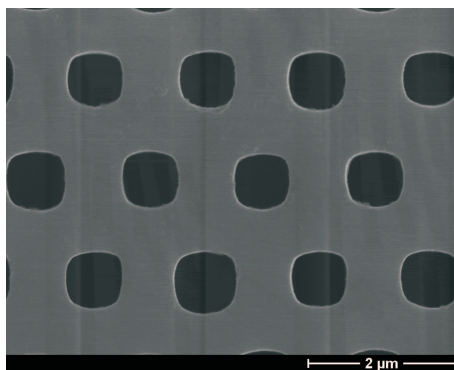


Abbildung 6.20: Porenquerschnitte im Bereich der Defektschicht. REM-Bild der Schliiffäche.

Mit Hilfe des FTIR-Spektrometers wurden Transmissionsspektren mit unpolarisiertem Licht von allen vier Proben aufgenommen [Abb. 6.21]. Der Bereich der photonischen Bandlücke ist gut im Spektrum der Referenzprobe zu erkennen. Bei den Proben, die eine Defektschicht enthalten, tauchen tatsächlich Defektmoden im Bereich der photonischen Bandlücke in Γ -A-Richtung auf. Für die Probe mit 5 Modulationsperioden liegt ein relativ breiter Defektpeak in der Nähe der niederfrequenten Kante der Bandlücke bei 1430cm^{-1} . Die Proben mit 6 und 7 Modulationsperioden weisen dagegen jeweils zwei dicht nebeneinander liegende Defektresonanzen auf.

Die spektrale Breite der Defektpicks nimmt erwartungsgemäß mit steigender Anzahl an Modulationsperioden ab. Das entspricht auch den Erwartungen. Durch die höhere Anzahl der Modulationsperioden, die den Defekt einschließen, steigt der Reflektivitätskoeffizient dieser 3D-photonischen Kristall-

bereiche für Frequenzen innerhalb der Bandlücke an. Die Finesse erhöht sich, was in einer verminderten spektralen Breite $\delta\omega_{\text{def}}$ zum Ausdruck kommt [siehe (C.12)].

Die leichte Verschiebung der Defektresonanzen und der photonischen Bandlücke zu höheren Frequenzen bei der Probe mit 7 Modulationsperioden ist auf Inhomogenitäten der Probe zurückzuführen. Durch laterale Schwankungen der Porosität (Kapitel 6.3) kommt es zu Schwankungen in der spektralen Lage der photonischen Bandlücke.

Das Auftreten der Doppelpeaks für die Proben mit 6 und 7 Modulationsperioden überrascht allerdings. Sie können nicht verschiedenen Ordnungen desselben Defekts zugeordnet werden, da dann im selben spektralen Abstand noch weitere Defektresonanzen in der photonischen Bandlücke zu finden sein müssten. Auch die Kopplung von Defektmodes zweier eng benachbarter Defekte ist ausgeschlossen, da nachweislich nur eine Defektschicht in der Struktur existiert.

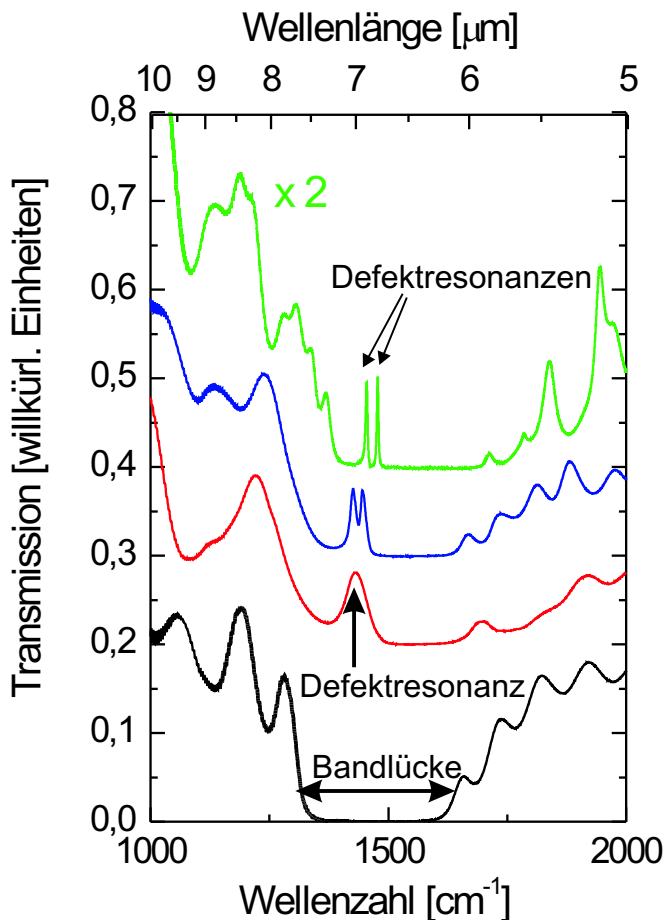


Abbildung 6.21: Transmissionsspektren, gemessen entlang Γ -A mit unpolarisierter Strahlung. Schwarz: Referenzprobe ohne Defekt; rot: Defektschicht von je 5 Modulationsperioden eingeschlossen; blau: Defektschicht von je 6 Modulationsperioden eingeschlossen; grün: Defektschicht von je 7 Modulationsperioden eingeschlossen

6.4.4 Ursache für die Defektdoppelpeaks

6.4.4.1 Polarisationsabhängige Transmission

Ein Grund für den Doppelpeak können polarisationsabhängige Reflektivitätskoeffizienten sein. Diese Möglichkeit wird im folgenden analysiert. Dazu wurden Transmissionsmessungen entlang Γ -A mit polarisierter Strahlung an der Probe mit 6 Modulationsperioden durchgeführt. Da die Ausbreitungsrichtung mit der z -Richtung zusammenfällt, liegen der E - und der H -Vektor der Lichtwelle innerhalb der xy -Ebene der Probe. Durch die Stellung des Polarisators wird daher die Schwingungsrichtung des E -Vektors innerhalb der xy -Ebene definiert. Die Probe war so zum Polarisator ausgerichtet, daß bei

der 0° Polarisation der E-Vektor der Lichtwelle in eine Γ -K Richtung zeigte, während er für die 90° Polarisation orthogonal dazu entlang einer Γ -M Richtung ausgerichtet war.

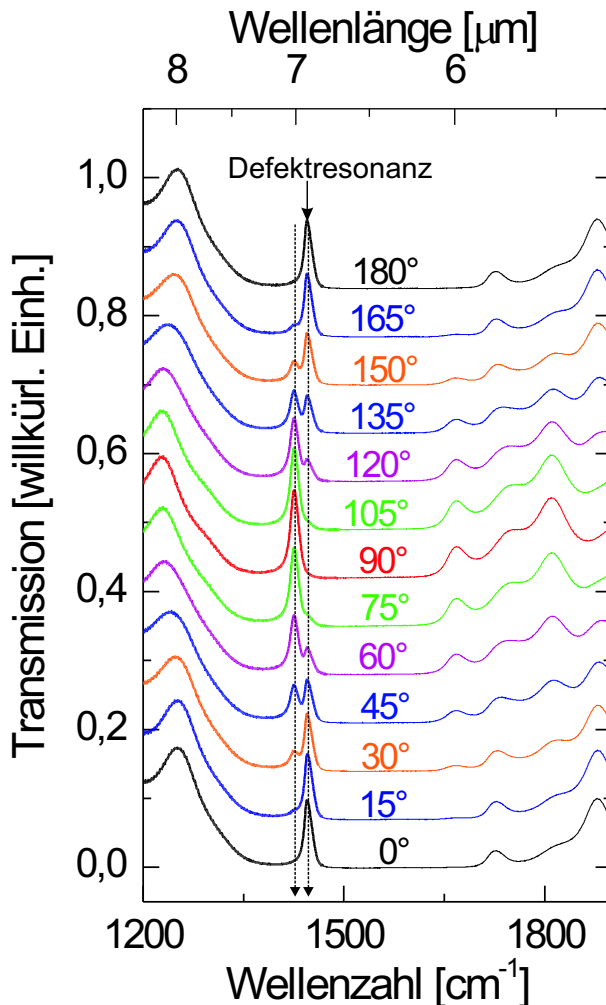


Abbildung 6.22: Transmission entlang Γ -A für verschiedene Polarisationen an der Probe mit 6 Modulationen gemessen. Die Gradangaben über den Spektren bezeichnen die Stellung des Polarisators, bei dem das Spektrum aufgenommen wurde. Für die Polarisationen 0° , 180° und 90° erscheint jeweils nur eine Defektresonanz. Für alle anderen Polarisatorstellungen sind beide Defektresonanzen erkennbar.

Für die Polarisatorstellungen 0° und 180° , die dieselbe Schwingungsrichtung des E-Vektors in der xy-Ebene erzeugen und damit äquivalent sind, tritt nur ein hochfrequenter Defektpeak auf [Abb. 6.22]. Bei der Polarisatorstellung von 90° erscheint allein ein niederfrequenter.

Aus diesen Ergebnissen folgt, daß die beiden Defektmoden durch unterschiedlich polarisierte Strahlung angeregt werden. Die beiden Polarisationen 0° und 90° stehen senkrecht aufeinander. Die Spektren für alle anderen Polarisatorstellungen können durch Addition des 0° und des 90° Spektrums erhalten werden, wenn das 0° und 90° Spektrum jeweils noch mit einem Polarisationsfaktor gewichtet wird. Für die 0° -Polarisation entspricht dieser Faktor $\cos^2 \psi$ und für die 90° -Polarisation $\sin^2 \psi$, wobei ψ die Winkelstellung des Polarisators bezeichnet. Speziell bei den Polarisatorstellungen von 45° bzw. 135° sowie im unpolarisierten Licht sind beide Polarisationen gleich stark vertreten, so daß in diesen Spektren auch beide Defektpeaks nahezu gleich stark auftreten. Das für diese Polarisationen gemessene Spektrum sollte sich durch Addition der Spektren für die 0° und die 90° Polarisation und nachfolgende Halbierung ergeben. Das ist in Abb. 6.23 am Beispiel des unpolarisierten Spektrums zu sehen (schwarz). Alle charakteristischen Merkmale des unpolarisierten Spektrums wie die Position der Defektresonanzen und der Fabry-Perot-Oszillationen im Bereich der Bänder ergeben sich auch im gemittelten Spektrum (rot) richtig. Für alle anderen Polarisatorstellungen überwiegt die Intensität einer Polarisation im Strahl, so daß der Defektpeak, der zu dieser intensiveren Polarisation gehört, auch im Spektrum eine höhere Intensität aufweist.

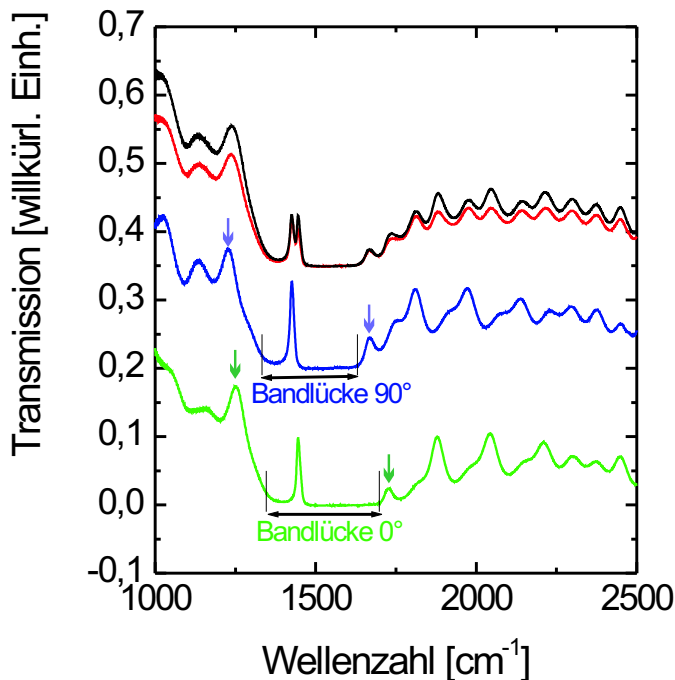


Abbildung 6.23: Darstellung des unpolarisierten Spektrums der Probe mit 6 Modulationsperioden durch Addition der Spektren für die 0° und die 90° Polarisation. Grün: Transmission für die 0° Polarisation; blau: Transmission für die 90° Polarisation; rot: Gemittelte Transmission aus 0° und 90° Polarisation; schwarz: unpolarisiert gemessenes Transmissionsspektrum. Farbige Pfeile bezeichnen die ersten Fabry-Perot-Resonanzen der Bänder.

Die Zuordnung der Defektpeaks zu der 0° und der 90° Polarisation ist auch für die Probe mit 7 Modulationsperioden zu beobachten. Führt man Transmissionsmessungen mit polarisierter Strahlung an der Probe mit 5 Modulationsperioden durch, so ergeben sich ebenfalls 2 separate Defektpeaks für die 0° und 90° Polarisation [Abb. 6.30]. Da ihre spektrale Breite groß ist und sie dicht nebeneinanderliegen, addieren sie sich im unpolarisierten Spektrum zu einem einzelnen breiten Defektpeak.

Betrachtet man Abb. 6.23 genauer, so fällt außerdem auf, daß mit der unterschiedlichen Polarisation auch eine unterschiedlich Lage der photonischen Bandlücke verbunden ist. Als Hilfe zur Bestimmung der Bandkante kann hier die spektrale Position der ersten Fabry-Perot-Resonanz des entsprechenden Bandes herangezogen werden. Die Position der Bandkante wurde hier als die Wellenzahl angenommen, bei der die Transmission auf $\frac{1}{3}$ des Wertes der ersten Fabry-Perot-Resonanz des entsprechenden Bandes abgeklungen ist (siehe Abschnitt 6.4.5.1)[Abb. 6.23]. Die Bandlücke für die 0° Polarisation erstreckt sich damit zwischen 1310cm^{-1} und 1708cm^{-1} , während die Bandlücke für die 90° Polarisation im Bereich 1296cm^{-1} bis 1647cm^{-1} liegt. Die photonische Bandlücke für die 90° Polarisation erscheint im Vergleich zur Bandlücke der 0° Polarisation zu niedrigeren Frequenzen verschoben. Dabei ist die Verschiebung der hochfrequenten Kante der Bandlücke mit $\Delta\omega_{\text{obereKante}} = 61\text{cm}^{-1}$ viel stärker ausgeprägt als die Verschiebung der niederfrequenten Kante, die nur $\Delta\omega_{\text{untereKante}} = 14\text{cm}^{-1}$ beträgt. Die Verschiebung der Bandlücken für die unterschiedlichen Polarisationen paßt auch zum Bild der polarisationsabhängigen Positionen der Defektpeaks. Zusammen mit der 90° Bandlücke verschiebt sich auch die Defektmode für die 90° Polarisation zu niedrigeren Frequenzen im Vergleich zu Bandlücke und Defektmode für die 0° Polarisation.

6.4.4.2 Diskussion

Betrachtet man die Bandstrukturrechnung in Abb. 6.11 im Bereich der fundamentalen Bandlücke in Γ -A Richtung genau, so ist dort keine Aufspaltung der Bänder an den Bandkanten zu sehen. Für kreisrunde sinusförmig modulierte Poren gibt es nur eine Bandlücke in diesem Spektralbereich.

An dieser Stelle muß aber nun die wirkliche Form der Porenquerschnitte der Poren berücksichtigt werden. Wie in Kapitel 6.2 und in Abb. 6.20 zu sehen war, entspricht der Porenquerschnitt Quadraten mit abgerundeten Ecken. Im folgenden sollen die Poren daher nicht durch Kreise, sondern durch

Quadrate angenähert werden. Diese quadratische Form der Poren führt zu einer Reduzierung der Symmetrie der gesamten Kristallstruktur. In Abb. 6.24 sind die einzelnen Symmetrieelemente für ein 2D-hexagonales Gitter, ein Quadrat und für die Verbindung aus beiden - einem hexagonalen Gitter mit einem Quadrat an jedem Gitterpunkt - eingezeichnet. Dabei sind die Quadrate so ausgerichtet wie die Porenquerschnitte in den REM-Abbildungen. Die kombinierte Struktur weist eine viel geringere Sym-

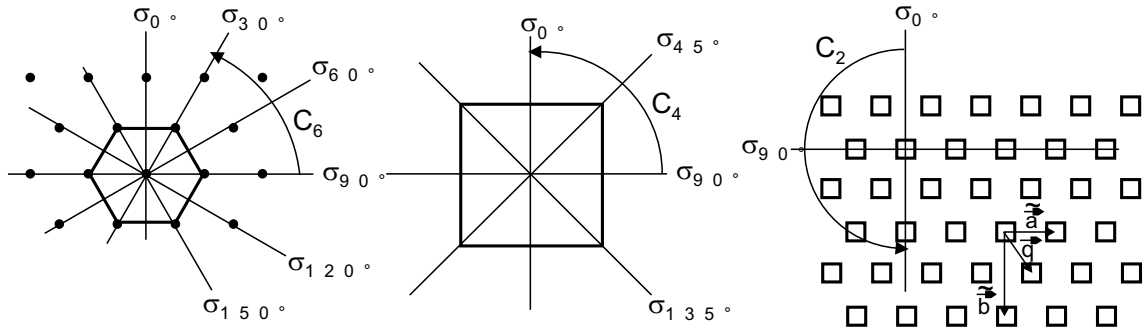


Abbildung 6.24: Reduzierung der Symmetrie durch quadratische Porenform. Es wird nur die Symmetrie in der xy -Ebene betrachtet. Links: Symmetrieelemente des hexagonalen Gitters (mit runden Poren), mitte: Symmetrieelemente eines Quadrates, rechts: Symmetrieelemente der kombinierten Struktur, wobei an jedem Gitterpunkt des hexagonalen Gitters ein Quadrat plaziert wurde. σ bezeichnet Spiegelebenen und C_v entspricht einer v -zähligen Drehachse

metrie auf als jede der beiden Einzelstrukturen. Während das hexagonale Gitter [Abb. 6.24(links)] eine 6-zählige Drehachse aufweist, ergibt sich für die kombinierte Struktur nur noch eine 2-zählige Symmetrieachse. Ähnliches gilt für die Anzahl an Spiegelebenen: Das hexagonale Gitter besitzt 6 und das Quadrat noch 4. In der kombinierten Struktur bleiben nur 2 Spiegelebenen übrig. Diese Symmetriebetrachtungen betreffen nur die Symmetrie in der xy -Ebene. An der Symmetrie in der 3. Dimension, der z -Richtung, ändert sich bei Annahme von quadratischen Poren im Vergleich zu kreisrunden Poren nichts. Das gilt zumindest solange, wie zur xy -Ebene symmetrische Modulationsprofile angenommen werden können. Wird eine asymmetrische Modulation, wie z.B. ein asymmetrisches Sägezahnprofil, mit steilen schnellen Aufweitungen des Porendurchmessers und langsamen langen Einengungen hergestellt (siehe [61] bzw. die Struktur mit $l_z^{\text{exp}}=3,59\mu\text{m}$ in Kapitel 6.2), so reduziert sich auch die Symmetrie in z -Richtung. Da das für die vorliegenden Proben aber nicht der Fall ist, wird darauf im folgenden nicht weiter eingegangen.

Durch die Reduzierung der Symmetrie in der xy -Ebene kann die resultierende Struktur nicht mehr dem hexagonalen Kristallsystem zugeordnet werden. Die 3D-Symmetrie der kombinierten Struktur läßt sich nach Hermann und Maguin mit den Symbolen $\frac{2}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m}$ bezeichnen [66]. Dabei bedeuten die Ziffern zweizählige Drehachsen und die Buchstaben m Spiegelebenen, die senkrecht auf den Drehachsen stehen. Diese Symmetrie entspricht einem orthorhombischen Gitter. Eine äquivalente Elementarzelle hat die Gittervektoren \vec{a} , \vec{b} und \vec{l}_z . Die Vektoren \vec{a} in x -Richtung und \vec{l}_z in z -Richtung stimmen dabei mit den ursprünglichen Gittervektoren \vec{a} und \vec{l}_z überein. Der neue Vektor \vec{b} verläuft anders [Abb. 6.24]. Die neuen Vektoren \vec{a} , \vec{b} und \vec{l}_z bilden eine orthogonale Basis und haben im allgemeinen verschiedene Beträge. Des weiteren hat dieses orthorhombische Gitter eine Basis, die zwei Poren umfaßt. Damit sind jedem der Gitterpunkte des orthorhombischen Gitters zwei Poren zugeordnet. Der Basisvektor ist \vec{q} [Abb. 6.24].

Eine Reduzierung der Symmetrie führt im allgemeinen zur Aufhebung der Entartung von Bändern, d.h. die Bänder spalten auf. Dies ist der Fall wenn von sinusförmig modulierten kreisrunden Poren zu rechteckförmig modulierten quadratischen Poren [Abb. 6.25] übergegangen wird. Die Modulationsperiode beider angenommener Strukturen beträgt $l_z=1,333 a$. Die minimale Porosität $p_{2D\text{min}} = 0,45$ und die maximale Porosität $p_{2D\text{max}} = 0,81$ stimmen ebenfalls bei beiden Strukturen überein, so daß auch die

gemittelte Gesamtporosität nahezu gleich ist ($p_{3DKreis}=0,625$ und $p_{3DQuadrat}=0,631$). Für beide Strukturen liegt die Bandlücke in Γ -A Richtung daher in derselben spektralen Region. Während im Fall der kreisrunden Poren nur zwei sichtbare Bänder die Bandlücke begrenzen, umgeben für die quadratischen Poren insgesamt vier Bänder die Bandlücke. Die zwei sichtbaren Bänder im Falle der kreisrunden Poren sind jeweils 2-fach entartet, so daß hier die untere Grenze der Bandlücke von zwei aufeinanderfallenden Bändern gebildet wird und die obere Grenze ebenso. Für die quadratischen Poren kommt es infolge der Symmetriebrechung zum Aufspalten dieser entarteten Bänder, so daß alle vier Bänder in der Bandstruktur sichtbar werden [Abb. 6.25].

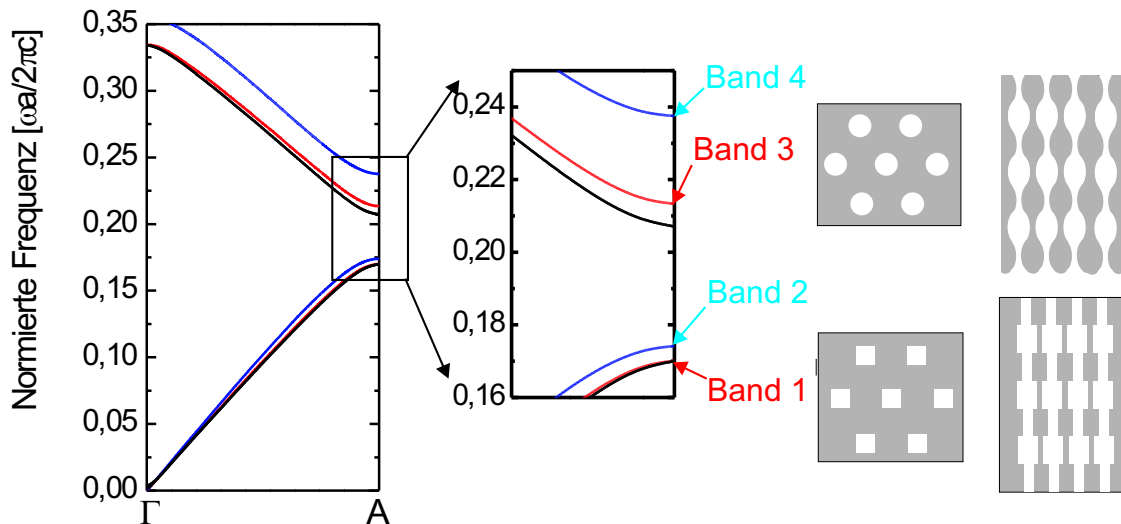


Abbildung 6.25: Bandstrukturen entlang Γ -A für kreisrunde sinusförmig modulierte Poren und quadratische rechteckförmig modulierte Poren. Die entsprechenden Strukturen sind rechts dargestellt. Farbige Bänder gehören zur Struktur mit quadratischen Poren, schwarze Bänder zur Struktur mit kreisrunden Poren. Rot: Bänder, die von der 90° -Polarisation angeregt werden, blau: Bänder, die von der 0° -Polarisation angeregt werden. Gemeinsame Parameter für beide Strukturen: $l_z=1,333 a$; $p_{2Dmin} = 0,45$; $p_{2Dmax} = 0,81$ [Bandstrukturrechnung von C. Jamois].

Vergleicht man nun die gegenseitige Position der Bandlücken in den Transmissionsspektren für die 0° - und die 90° Polarisation mit der Bandstruktur für die quadratischen Porenquerschnitte am A-Punkt, so kann folgende Zuordnung getroffen werden: Das 1. und 3. Band werden durch die 90° Polarisation angeregt (rot in Abb. 6.25), während das 2. und 4. Band durch die 0° -Polarisation (blau in Abb. 6.25) angeregt werden. Diese Zuordnung erklärt, warum die Bandlücke für die 90° -Polarisation bei niedrigeren Frequenzen liegt als die Bandlücke für die 0° -Polarisation. Außerdem ist der Abstand von Band 3 zu Band 4 deutlich größer als von Band 1 zu Band 2. Das stimmt mit der experimentellen Beobachtung überein, daß die Verschiebung der Bandkanten von 0° und 90° Polarisation an der Hochfrequenzseite der Bandlücke stärker ist als an der niederfrequenten Seite.

Ein Vergleich mit einer Bandstrukturrechnung für kreisrunde Poren, die rechteckförmig moduliert sind, ergab keine Aufspaltung der Bänder. Die Rechteckmodulation führt damit nicht zur Aufhebung der Entartung in Abb. 6.25. Der quadratische Porenquerschnitt ist ausschlaggebend für die Aufspaltung der Bänder.

6.4.4.3 Doppelbrechung im langwelligen Bereich

Um auch eine anschauliche Erklärung für die Aufspaltung der Bänder in Abb. 6.25 bei der Struktur mit quadratischen Porenquerschnitten zu finden, ist es hilfreich, den langwelligen Bereich der Bandstruktur

näher zu betrachten. Auch im Bereich für $\omega \rightarrow 0$ ist die Entartung für die Bänder 1 und 2 aufgehoben. Für $\omega \rightarrow 0$ lassen sich Band 1 und Band 2 aus Abb. 6.25 gut durch Geraden annähern:

$$\omega_i = \frac{c}{n_{\text{eff},i}} k_{\Gamma-A} \quad (6.10)$$

$k_{\Gamma-A}$ beschreibt dabei den k -Vektor zwischen Γ und A und ω_n die Frequenz des Bandes mit dem Index $i=1$ bzw. 2. Der Anstieg dieser Geraden ergibt einen effektiven Brechungsindex $n_{\text{eff},i}$ für die beiden Bänder 1 und 2 im langwelligen Bereich, der durch Umformung von (6.10) aus der Bandstruktur berechnet wurde [Abb.6.26]. Für Band 1 beträgt er bei $\omega \rightarrow 0$ $n_{\text{eff},1}=1,898$ und für Band 2 $n_{\text{eff},2}=1,804$. Für Frequenzen $\frac{\omega a}{2\pi c} > 0,1$ versagt die lineare Näherung des Bandes. Der Einfluß der Bandlücke wird merklich, das Band krümmt sich und die über (6.10) berechneten effektiven Brechungsindizes steigen an.

Die unterschiedlichen Brechungsindizes $n_{\text{eff},1}$ und $n_{\text{eff},2}$ bedeuten gleichzeitig unterschiedliche Brechungsindizes für die beiden Polarisationen 0° und 90° , da Band 1 zur 90° Polarisation und Band 2 zur 0° Polarisation gehört. Das entspricht der Doppelbrechung für Licht, das sich entlang Γ -A ausbreitet.

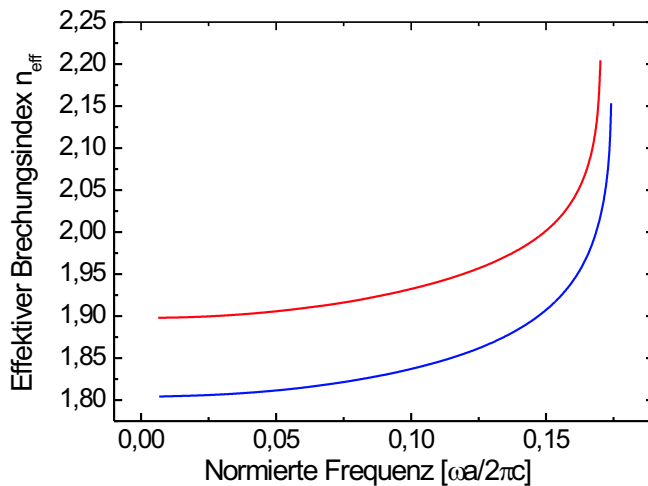


Abbildung 6.26: Über (6.10) berechnete effektive Brechungsindizes der Bänder 1 (rot, 90° Polarisation) und 2 (blau, 0° Polarisation) aus Abb. 6.25.

Das Phänomen der Doppelbrechung wird in der Kristalloptik für Kristalle, die aus Atomen aufgebaut sind, eingehend untersucht. Ein Vergleich der Doppelbrechung für $\omega \rightarrow 0$ in photonischen Kristallen und "Atomkristallen" bietet sich daher an.

In Bezug auf die Wechselwirkung mit elektromagnetischen Wellen sind photonische Kristalle und Atomkristalle sehr ähnlich. Beide bestehen aus einer räumlich periodischen Anordnung von Streuzentren. Im Falle der Atomkristalle bilden die Atome die Streuzentren, und die Gitterkonstante liegt dabei im Angströmbereich, so daß die Braggbedingung nur für Röntgenstrahlen erfüllt ist. Sichtbares Licht gehört daher bereits zum langwelligen Spektralbereich für Atomkristalle. Die Dispersionsrelation der Atomkristalle in diesem Spektralbereich wird durch die Kristalloptik beschrieben, bei der von einem dielektrischen Tensor ausgegangen wird. Wird das Kristallkoordinatensystem so gewählt, daß die Achsen gerade mit den Hauptachsen des Tensors übereinstimmen, so transformiert sich der Tensor in seine Hauptachsenform. Die drei Hauptdielektrizitätskonstanten stehen in der Diagonalen, und alle anderen Elemente sind Null. Licht, das auf den Kristall auftrifft, wird in zwei senkrecht zueinander polarisierte Wellen zerlegt, für die sich unterschiedliche Brechungsindizes ergeben. Da sich daraus bei schrägem Lichteinfall auch unterschiedliche Brechungswinkel für die beiden verschiedenen polarisierten Wellen ergeben, ist dieses Verhalten als Doppelbrechung bekannt. Man unterscheidet optisch isotrope, optisch einachsige und optisch zweiachsige Kristalle.

Hexagonale Kristalle gehören zu den optisch einachsigen Kristallen. Zwei der drei Hauptdielektrizitätskonstanten sind gleich. Die sechszählige Drehachse bildet eine Hauptachse des Indexellipsoids und gleichzeitig die optische Achse [67]. Für Lichtausbreitung entlang der optischen Achse sind

die Brechungsindizes für alle Polarisierungen gleich. Eine getrennte Ausbreitung unterschiedlich polarisierter Strahlung kann daher nicht beobachtet werden. Überträgt man diese Aussagen auf photonische Kristalle, so stellt ein 3D-hexagonaler photonischer Kristall mit kreisrunden modulierten Poren im langwelligen Bereich ebenfalls einen optisch einachsigen Kristall dar. Die Γ -A-Richtung (z-Richtung) als sechszählige Drehachse bildet dabei die Richtung der optischen Achse, und der Brechungsindex für Wellenausbreitung entlang Γ -A ist für alle Polarisierungen gleich. Diese Aussagen stimmen mit der 3D-Bandstruktur im langwelligen Spektralbereich überein. Das erste und zweite Band sind entartet, so daß es nur einen effektiven Brechungsindex für $\omega \rightarrow 0$ in Γ -A-Richtung gibt, der dann für alle Polarisierungen gilt.

Orthorhombische Kristalle gehören dagegen zu den optisch zweiachsigen Kristallen. Alle drei Hauptdielektrizitätskonstanten sind verschieden. Die drei Hauptachsen des Indexellipsoids stimmen mit den drei zweizähligen Drehachsen im orthorhombischen Kristallsystem überein [67]. Die beiden optischen Achsen fallen in optisch zweiachsigen Kristallen aber nie mit den Hauptachsen des Indexellipsoids zusammen. Breitet sich Licht entlang einer Hauptachse des Indexellipsoids aus, wird es daher in zwei senkrecht zueinander polarisierte Wellen zerlegt, für die unterschiedliche Brechungsindizes gelten. Ein 3D-orthorhombischer photonischer Kristall, so wie er durch modulierte Poren mit quadratischem Porenquerschnitt in einem 3D-hexagonalen Gitter entsteht, stellt daher nach den Regeln der Kristallographie für $\omega \rightarrow 0$ einen optisch zweiachsigen Kristall dar. Da die z-Richtung des photonischen Kristalls eine zweizählige Drehachse ist und damit eine Hauptachse des Indexellipsoids bildet, kann sie nicht mit einer optischen Achse des zweiachsigen Kristalls übereinstimmen. Licht, das sich entlang der z-Richtung ausbreitet, wird daher in zwei senkrecht zueinander polarisierte Wellen aufgespalten, für die ein unterschiedlicher Brechungsindex gilt. Dies entspricht auch genau den Verhältnissen in der 3D-Bandstruktur für $\omega \rightarrow 0$ und Γ -A-Richtung. Die beiden senkrecht zueinander stehenden Polarisierungen (90° und 0° Polarisation) koppeln an unterschiedliche Bänder (Band 1 und Band 2) mit unterschiedlichen effektiven Brechungsindizes $n_{\text{eff}1}$ und $n_{\text{eff}2}$ an. Doppelbrechung tritt auf.

6.4.4.4 Formdoppelbrechung

Der Ursprung der Doppelbrechung in Γ -A-Richtung liegt nicht in der Anordnung der Streuzentren, sondern in deren Form. Aus diesem Grund wird diese Art der Doppelbrechung auch als "Formdoppelbrechung" bezeichnet [68]. Unter Berücksichtigung der speziellen Orientierung der Quadrate wird in Anhang B auf der Basis der Wiener-Formeln ein polarisationsabhängiger effektiver Brechungsindex für den langwelligen Spektralbereich berechnet. Es kann gezeigt werden, daß sich die beiden Brechungsindizes für die 90° und die 0° Polarisation unterscheiden und daß der effektive Brechungsindex für die 90° Polarisation größer ist. Diese Aussagen stimmen mit den bisherigen Ergebnissen aus der Bandstruktur für $\omega \rightarrow 0$ überein.

Mit der Formdoppelbrechung ergibt sich auch eine physikalisch anschauliche Erklärung für die unterschiedliche spektrale Lage der fundamentalen Bandlücken in Γ -A-Richtung für die beiden Polarisierungen 0° und 90° . Gäbe es keine Modulation des Porendurchmessers in z-Richtung, sondern handelte es sich nur um gerade Poren mit quadratischem Porenquerschnitt, so würden die Bänder 1 und 2 nur linear ansteigen. Die Anstiege entsprächen $\frac{1}{n_{\text{eff}1}}$ bzw. $\frac{1}{n_{\text{eff}2}}$. Tritt eine Modulation in z-Richtung hinzu, so kommt es bei dem k -Vektor k_A , der am Rande der Brillouinzone am Punkt A liegt, zur Öffnung der Bandlücke in beiden Bändern. Durch den steileren Anstieg des Bandes 2 liegt die Bandlücke für Band 2 aber bei etwas höheren Frequenzen als die Bandlücke für Band 1.

Auf die Position der Defektresonanz haben nun 2 polarisationsabhängige Parameter Einfluß:

Nach (C.5) hängt die Frequenz der Defektmode zum einen vom Brechungsindex n_{def} der Defektschicht ab. Wie in Abb. 6.20 zu sehen ist, entspricht die Form des Porenquerschnitts auch innerhalb der Defektschicht abgerundeten Quadraten. Damit kommt es auch innerhalb der Defektschicht zur Form-

doppelbrechung, und es ergeben sich 2 unterschiedliche effektive Brechungsindizes $n_{\text{def},0}^{\text{eff}}$ und $n_{\text{def},90}^{\text{eff}}$ für die beiden orthogonalen Polarisationen.

Zum anderen hängt die Position der Defektresonanz auch von der Größe der Phasensprünge δ ab, die bei der Reflexion an den über- und unterhalb der Defektschicht befindlichen modulierten Kristallbereichen auftreten. Bei diesen Reflexionen handelt es sich um Interferenztotalreflexionen. Die Größe des Phasensprunges hängt daher von der relativen Lage der Lichtfrequenz innerhalb der Bandlücke ab. Für Frequenzen nahe der niederfrequenten Kante der Bandlücke beträgt der Phasensprung 0° , für Frequenzen in der Mitte der Bandlücke 90° und an der hochfrequenten Kante 180° [63]. Das ist aus der dynamischen Röntgenbeugung bereits bekannt und wird dort unter anderem zur Herstellung von Phasenschiebern für Röntgenstrahlung genutzt [69]. Tritt die Defektresonanz nun für einen speziellen Phasensprung δ_{res} auf, so führt die unterschiedliche spektrale Position der Bandlücken für die beiden Polarisierungen dazu, daß auch der Phasensprung δ_{res} für die beiden Polarisierungen bei unterschiedlichen Frequenzen auftaucht. Der Phasensprung ist quasi mitsamt der Bandlücke im Frequenzraum verschoben worden. Damit kommt es auch bei unterschiedlichen Frequenzen zur Ausbildung der Defektresonanz.

6.4.5 Q-Faktoren und Reflektivitätskoeffizienten

6.4.5.1 Theoretische Vorüberlegungen

Nach Klärung des Ursprunges der Defektdoppelpeaks werden im folgenden die Reflektivitätskoeffizienten und der Q-Faktor der Defektresonanzen berechnet. Dabei ist zu beachten, daß die am Ende von Abschnitt 6.4.4.4 erwähnte Frequenzabhängigkeit des Phasensprunges δ nicht nur Auswirkungen auf die absolute Frequenzposition der Defektresonanzen ω_{def} hat. Auch die Breite eines Resonanzpeaks im Frequenzraum $\delta\omega_{\text{def}}$ sowie der Abstand der Fabry-Perot Resonanzen $\Delta\omega_{\text{def}}$ verändern sich dadurch. Da im vorliegenden Fall aber nur eine Defektresonanz für jede Polarisation innerhalb der Bandlücke erscheint, interessiert im folgenden nur $\delta\omega_{\text{def}}$. Damit verlieren die einfachen Formeln (C.19) und (C.12) für die Finesse F und den Q-Faktor ihre Gültigkeit. Es ist daher notwendig, für Finesse und Q-Faktor neue Formeln unter Berücksichtigung eines frequenzabhängigen Phasensprunges herzuleiten. Dazu wird von (C.2) ausgegangen. Die Phasendifferenz zwischen zwei aus dem Resonator austretenden Strahlen ist

$$\varphi = 2 \frac{d_{\text{def}} n_{\text{def}} \omega}{c} + 2\delta(\omega). \quad (6.11)$$

Hierbei wurde davon ausgegangen, daß die modulierten Porenbereiche oberhalb und unterhalb der Defektschicht gleich sind. Damit liegen ihre Bandlücken im gleichen Frequenzbereich, und es gilt $\delta_1 = \delta_2 = \delta(\omega)$. Die Breite einer Defektresonanz im Raum der Phasendifferenz φ ergibt sich damit zu

$$\varphi_{+\frac{1}{2}} - \varphi_{-\frac{1}{2}} = 2 \frac{d_{\text{def}} n_{\text{def}} \delta\omega_{\text{def}}}{c} + 2\delta(\omega_{+\frac{1}{2}}) - 2\delta(\omega_{-\frac{1}{2}}). \quad (6.12)$$

Dabei stellen $\omega_{+\frac{1}{2}}$ und $\omega_{-\frac{1}{2}}$ die beiden Frequenzen zu beiden Seiten des Peakmaximums dar, für die die Transmission auf die Hälfte ihres Maximalwertes abgefallen ist. Es gilt $\delta(\omega_{+\frac{1}{2}}) > \delta(\omega_{-\frac{1}{2}})$ und $\delta\omega_{\text{def}} = \omega_{+\frac{1}{2}} - \omega_{-\frac{1}{2}}$. Mit (C.9) und $\Delta\delta = \delta(\omega_{+\frac{1}{2}}) - \delta(\omega_{-\frac{1}{2}})$ gilt daher

$$\frac{2\pi}{F} = \frac{2d_{\text{def}} n_{\text{def}} \delta\omega_{\text{def}}}{c} + 2\Delta\delta \quad (6.13)$$

und schließlich

$$F = \frac{\pi}{\frac{d_{\text{def}} n_{\text{def}}}{c} \delta\omega_{\text{def}} + \Delta\delta}. \quad (6.14)$$

Für schmale Defektresonanzen gilt $\Delta\delta = \left(\frac{\partial\delta}{\partial\omega}\right)_{\omega_{\text{def}}} \delta\omega_{\text{def}}$ und somit

$$F = \frac{\pi}{\left(\frac{d_{\text{def}} n_{\text{def}}}{c} + \left(\frac{\partial\delta}{\partial\omega}\right)_{\omega_{\text{def}}}\right) \delta\omega_{\text{def}}}. \quad (6.15)$$

Bei der Berechnung des Q-Faktors wird auf (C.18) zurückgegriffen:

$$Q = \omega_{\text{def}} F \frac{n_{\text{def}} d_{\text{def}}}{c\pi} = \frac{\omega_{\text{def}}}{\left(1 + \frac{c}{n_{\text{def}} d_{\text{def}}} \left(\frac{\partial \delta}{\partial \omega}\right)_{\omega_{\text{def}}}\right) \delta \omega_{\text{def}}}. \quad (6.16)$$

Zur Bestimmung des Q-Faktors der Resonanz und der Finesse muß daher die Änderung des Phasensprunges an der Stelle der Defektfrequenz $\left(\frac{\partial \delta}{\partial \omega}\right)_{\omega_{\text{def}}}$ bekannt sein. Außerdem geht das Produkt $n_{\text{def}} d_{\text{def}}$ in die Berechnung von Q und F ein. $n_{\text{def}} d_{\text{def}}$ ist ebenfalls in Gleichung (C.5) für die Defektfrequenzen enthalten. Daher gilt

$$n_{\text{def}} d_{\text{def}} = \frac{(\pi m - \delta)c}{\omega_{\text{def}}^m}. \quad (6.17)$$

Können nun die Ordnung m der Defektresonanz und der Phasensprung δ für die Defektresonanz bestimmt werden, ergibt sich $n_{\text{def}} d_{\text{def}}$ und es gilt mit (6.15) und (6.16):

$$F = \frac{1}{\left(\frac{m}{\omega_{\text{def}}} - \frac{\delta}{\omega_{\text{def}}\pi} + \left(\frac{\partial \delta}{\partial \omega}\right)_{\omega_{\text{def}}} \frac{1}{\pi}\right) \delta \omega_{\text{def}}} \quad (6.18)$$

$$Q = \frac{\omega_{\text{def}}}{\left(1 + \frac{\omega_{\text{def}}}{\pi m - \delta} \left(\frac{\partial \delta}{\partial \omega}\right)_{\omega_{\text{def}}}\right) \delta \omega_{\text{def}}} \quad (6.19)$$

Zur Bestimmung der Ordnung m und des Phasensprunges wurden 1D- Transmissionsrechnungen herangezogen. Für die aus den REM-Bildern gewonnenen Parameter für die Modulation wird unter Verwendung der Maxwell-Garnet-Näherung das in Abb. 6.18 gezeigte Profil eines mit der Tiefe variierenden effektiven Brechungsindex aufgestellt. Für den Bereich der Defektschicht wird ebenfalls der aus den REM-Bildern abgeleitete Parameter p_{def}^{2D} verwendet. Allerdings muß beachtet werden, daß die Polarisationsabhängigkeit der Transmission in diesem Modell nicht wiedergegeben werden kann, da die Maxwell-Garnet-Formel keine Formdoppelbrechung berücksichtigt.

Nun wird die Dicke der Defektschicht in der Rechnung variiert [Abb. 6.27].

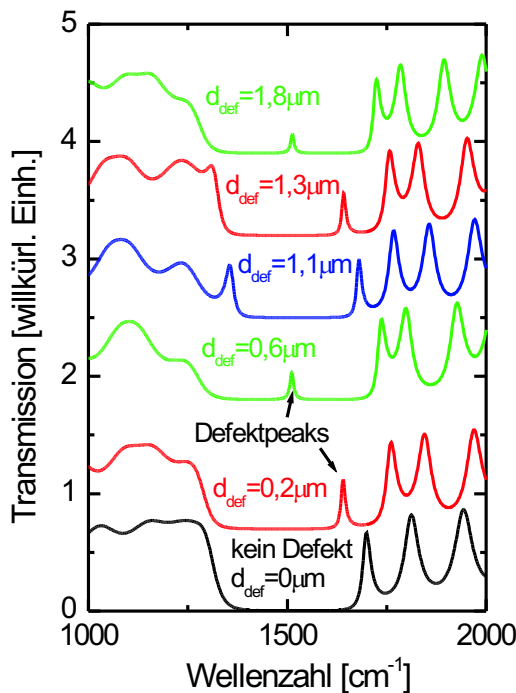


Abbildung 6.27: Berechnete Transmission für verschiedene Defektdicken d_{def} . Für die Kurven gleicher Farbe stimmen die Frequenzen der Defektresonanzen überein. Die Defektresonanzen erster und zweiter Ordnung fallen dabei zusammen.

Beträgt die Dicke der Defektschicht $0\mu\text{m}$, dann ist kein Defekt vorhanden, und im Transmissionspektrum erscheint auch keine Defektmode. Erhöht man d_{def} auf $0,2\mu\text{m}$, so ist an der Hochfrequenzseite der Bandlücke bereits eine Defektresonanz zu beobachten. Mit ansteigender Dicke der Defektschicht wandert diese zu niedrigeren Frequenzen, bis sie für $d_{\text{def}} \approx 1,1\mu\text{m}$ an der niederfrequenten Seite der Bandlücke verschwindet. Diese Defektresonanzen für $d_{\text{def}} \leq 1,1\mu\text{m}$ haben die Ordnung $m=1$. Für $d_{\text{def}} \geq 1,3\mu\text{m}$ erscheint am hochfrequenten Rand der Bandlücke die nächste Defektresonanz. Sie ist von der Ordnung $m=2$ und verschiebt sich ebenfalls mit steigendem d_{def} zu niedrigeren Frequenzen. Wählt man nun $d_{\text{def}} = 2,12\mu\text{m}$, so entspricht die simulierte Struktur im Rahmen des 1D Modells der im Experiment untersuchten modulierten Porenstruktur. Die Position des errechneten Defektpeaks stimmt sehr gut mit der Position des gemessenen Defektpeaks für die 90° Polarisation überein [Abb. 6.28].

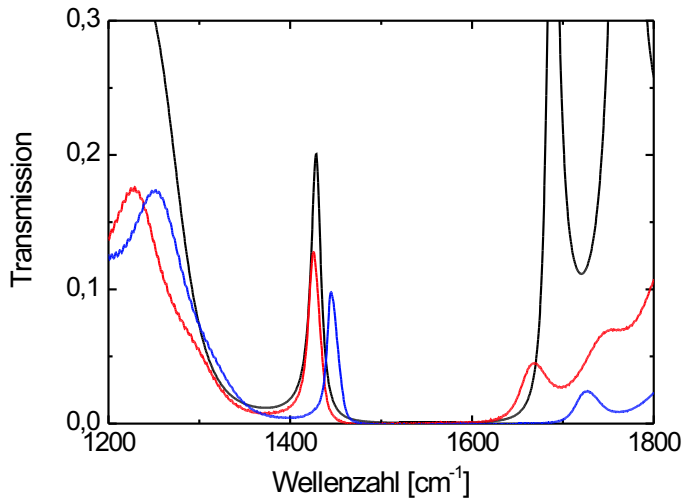


Abbildung 6.28: Vergleich von berechneter Transmission (schwarz) für $d_{\text{def}} = 2,12\mu\text{m}$ mit gemessenen Transmissionskurven für die 0° Polarisation (blau) und die 90° Polarisation (rot).

Daraus kann geschlußfolgert werden, daß die Ordnung der Defektresonanz im Experiment für beide Polarisationen $m=2$ war.

Diese Transmissionsrechnungen können auch dazu benutzt werden, um die Frequenzabhängigkeit des Phasensprunges innerhalb der photonischen Bandlücke zu berechnen. Sind die Defektdicken $d_{\text{def}}^{(1)}$ und $d_{\text{def}}^{(2)}$ bekannt, bei denen die Defektresonanzen 1. Ordnung und 2. Ordnung dieselbe Defektfrequenz ω_{def} haben, dann gilt nach (C.5):

$$\frac{[\pi \cdot 1 - \delta(\omega_{\text{def}}^{(1)})]c}{d_{\text{def}}^{(1)}n_{\text{def}}} = \omega_{\text{def}}^{(1)} = \omega_{\text{def}}^{(2)} = \frac{[\pi \cdot 2 - \delta(\omega_{\text{def}}^{(2)})]c}{d_{\text{def}}^{(2)}n_{\text{def}}} \quad (6.20)$$

Da die Phasensprünge $\delta(\omega_{\text{def}}^{(1)})$ und $\delta(\omega_{\text{def}}^{(2)})$ bei derselben Frequenz liegen, gilt $\delta(\omega_{\text{def}}^{(1)}) = \delta(\omega_{\text{def}}^{(2)}) = \delta(\omega_{\text{def}})$ und schließlich

$$\delta(\omega_{\text{def}}) = \pi \frac{d_{\text{def}}^{(2)} - 2d_{\text{def}}^{(1)}}{d_{\text{def}}^{(2)} - d_{\text{def}}^{(1)}}. \quad (6.21)$$

Wird die Dicke der Defektschicht in der Transmissionsrechnung systematisch in kleinen Schritten von $0,05\mu\text{m}$ erhöht und werden die Transmissionspektren für die verschiedenen Defektdicken miteinander verglichen, so können die Defektdicken $d_{\text{def}}^{(1)}$ und $d_{\text{def}}^{(2)}$ bestimmt werden, bei denen $\omega_{\text{def}}^{(1)}$ und $\omega_{\text{def}}^{(2)}$ zusammenfallen. Über (6.21) lassen sich damit die Phasensprünge berechnen [Abb. 6.29].

Der Phasensprung innerhalb der Bandlücke variiert von 0° bis 180° . Der Verlauf des Phasensprunges in Abhängigkeit von der Frequenz läßt sich durch ein Polynom 3. Grades sehr gut anfitzen. Daraus wird dann die Ableitung $\frac{\partial \delta}{\partial \omega}$ bestimmt. Extrapoliert man die Kurve für δ zu höheren und niedrigeren Frequenzen, so ergeben die Frequenzen, bei denen der Phasensprung 0° bzw. 180° wird, den unteren

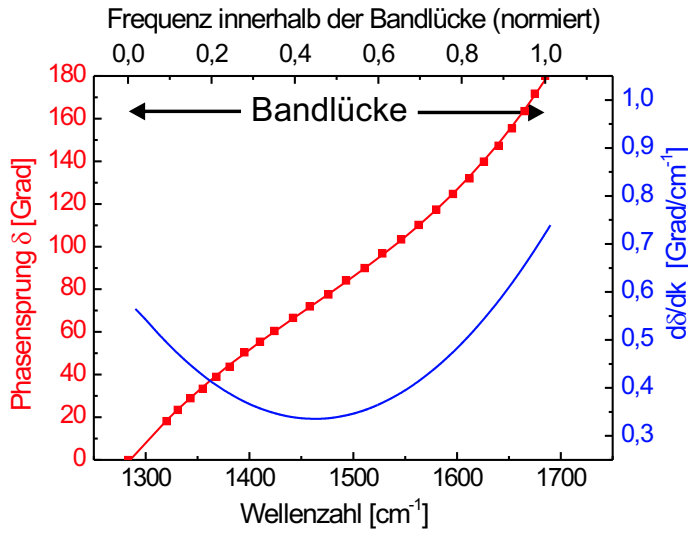


Abbildung 6.29: Frequenzabhängigkeit des Phasensprunges innerhalb der photonischen Bandlücke. Die roten Punkte sind die aus dem Vergleich der Transmissionskurven für verschiedene Defektdicken erhaltenen Absolutwerte des Phasensprunges. Die rote Kurve stellt einen Fit mit einem Polynom 3. Ordnung dar. Durch Ableitung dieser Fitfunktion ergibt sich $\frac{\partial \delta}{\partial \omega}$ (blau).

bzw. oberen Rand der Bandlücke. Danach liegt der untere Rand der Bandlücke bei 1283cm^{-1} und der obere Rand der Bandlücke bei 1685cm^{-1} .

Der Verlauf von $\delta(\omega)$ und $\frac{\partial \delta}{\partial \omega}$ innerhalb der Bandlücke gilt auch, wenn die Bandlücke verschoben ist, oder eine andere spektrale Breite hat. Um die Beziehungen zur Frequenzabhängigkeit des Phasensprunges allgemein anwenden zu können, wird eine normierte Frequenz ω_{norm} innerhalb der Bandlücke eingeführt:

$$\omega_{\text{norm}} = \frac{\omega_{\text{def}} - \omega_{\text{unt}}}{\omega_{\text{ob}} - \omega_{\text{unt}}}. \quad (6.22)$$

Dabei beschreiben ω_{ob} bzw. ω_{unt} den oberen bzw. unteren Rand der photonischen Bandlücke. Damit nimmt ω_{norm} den Wert 0 am unteren Rand der Bandlücke an und den Wert 1 am oberen Rand. Die erhaltene Fitfunktion kann nun ebenfalls in Abhängigkeit von dieser normierten Frequenz dargestellt werden:

$$\delta(\omega_{\text{norm}}) = 80,35 + 136,96(\omega_{\text{norm}} - 0,5) + 32,21(\omega_{\text{norm}} - 0,5)^2 + 169,31(\omega_{\text{norm}} - 0,5)^3 \quad (6.23)$$

$$\frac{\partial \delta(\omega_{\text{norm}})}{\partial \omega_{\text{norm}}} = 136,97 + 64,42(\omega_{\text{norm}} - 0,5) + 507,93(\omega_{\text{norm}} - 0,5)^2. \quad (6.24)$$

Um die Finesse F und den Q-Faktor zu bestimmen, wird nun zuerst die experimentell ermittelte Defektfrequenz ω_{def} auf ω_{norm} umgerechnet. Aus (6.23) erhält man dann den Phasensprung $\delta(\omega_{\text{def}})$ und aus (6.24) die Ableitung $(\frac{\partial \delta}{\partial \omega})_{\omega_{\text{def}}}$. Wird aus dem Spektrum noch $\delta \omega_{\text{def}}$ abgelesen und $m=2$ gesetzt, so können Finesse und Q-Faktor über (6.18) und (6.19) ermittelt werden.

Für die genaue Bestimmung der Defektfrequenzen und der spektralen Breiten der Defektresonanzen wurden die Transmissionsspektren für alle drei Proben in 0° und 90° Polarisation aufgenommen [Abb. 6.30]. Die Defektresonanzen wurden durch Lorentzfunktionen angefitet. Die spektrale Position der Maxima der gefitteten Lorentzkurven und deren spektrale Breite ergeben ω_{def} bzw. $\delta \omega_{\text{def}}$.

Für die Berechnung von ω_{norm} muß noch der obere und untere Rand der Bandlücke bestimmt werden. Dazu können die Ergebnisse der Transmissionsrechnung zu Hilfe genommen werden. Aus dem Phasensprung von 0° bzw. 180° wurde dort der untere bzw. obere Rand der Bandlücke zu 1283cm^{-1} bzw. 1685cm^{-1} bestimmt. Betrachtet man die errechnete Transmission am oberen Rand der Bandlücke bei 1685cm^{-1} , so beträgt sie gerade $\frac{1}{3}$ des Transmissionswertes der anschließenden ersten Fabry-Perot-Resonanz des Bandes. Dieser Zusammenhang zwischen Bandkante und erster Fabry-Perot-Resonanz kann auch benutzt werden, um aus den experimentell ermittelten Transmissionsspektren die oberen und

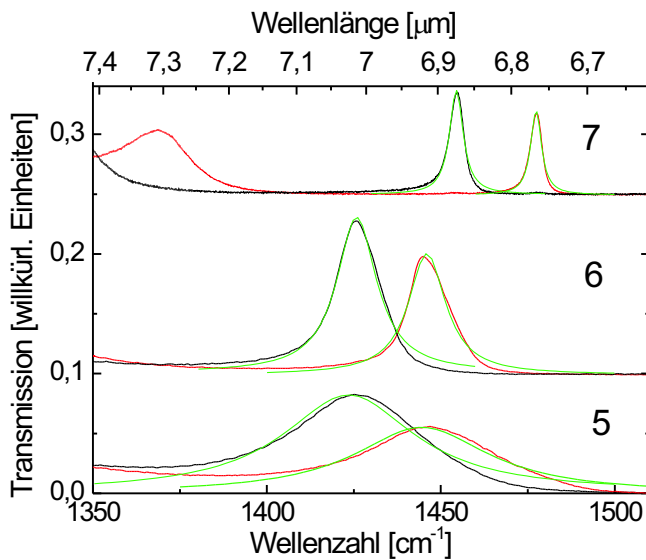


Abbildung 6.30: Bestimmung der spektralen Positionen und der spektralen Breiten der Defektoresonanzen durch das Anfitzen von Lorentzkurven. Die Zahlen am rechten Rand repräsentieren die Anzahl der Modulationsperioden in der gemessenen Probe. Schwarz: Transmission für 90° Polarisation; rot: Transmission für 0° Polarisation; grün: Angefittete Lorentzkurven.

unteren Ränder der Bandlücke zu bestimmen, da die erste Fabry-Perot-Resonanz des Bandes ein markanter Punkt ist, der auch im Experiment eindeutig bestimmbar ist. Dabei ist allerdings zu beachten, daß die Position der Fabry-Perot-Resonanzen von der Porentiefe abhängt. Somit ergeben sich nacheinander ω_{norm} , $\delta(\omega_{def})$, $(\frac{\partial \delta}{\partial \omega})_{\omega_{def}}$, die Finesse F und der Q-Faktor [Tab. 6.3].

Polarisation	5 Modulationen		6 Modulationen		7 Modulationen	
	0°	90°	0°	90°	0°	90°
Breite der Defektoresonanz [cm ⁻¹]	47,02	45,93	12,99	13,96	3,78	4,75
Position der Defektoresonanz [cm ⁻¹]	1444,5	1423,5	1446	1425,8	1477,4	1454,5
Unterer Rand der Bandlücke [cm ⁻¹]	1310	1300	1310	1296	1382	1353
Oberer Rand der Bandlücke [cm ⁻¹]	1720	1662	1708	1647	1778	1701
ω_{norm}	0,328	0,341	0,342	0,37	0,241	0,292
δ [°]	56,89	58,73	58,80	62,69	44,08	51,68
$d\delta/d\omega$ [°/cm ⁻¹]	0,34	0,39	0,35	0,39	0,39	0,42
Finesse F	6,92	6,56	24,8	21,52	78,92	60,12
Reflektivität r_{eff}	0,637	0,622	0,881	0,864	0,961	0,949
Q-Faktor	11,65	10,98	41,49	35,54	138,52	102,98

Tabelle 6.3: Zusammenstellung der aus den Transmissionsspektren erhaltenen Werte für die Position und Breite der Defektoresonanzen und der daraus abgeleiteten Größen Finesses F , effektiver Reflektivitätskoeffizient r_{eff} und Q-Faktor für alle drei untersuchten Proben.

6.4.5.2 Auswertung

Bei Vergleich der Werte für die Reflektivitätskoeffizienten der verschiedenen Proben bestätigt sich die Erwartung, daß mit steigender Anzahl an Modulationsperioden der Reflektivitätskoeffizient für Frequenzen innerhalb der photonischen Bandlücke steigt. Für den speziellen Fall der Probe mit den 7 Modulationen kann ein maximaler effektiver Reflektivitätskoeffizient von $r_{eff} = 0,961$ erzielt werden. Das ist zwar immer noch geringer als ein Gold- oder Silberspiegel, die für diesen Spektralbereich einen

Reflektivitätskoeffizient von $r=0,997$ aufweisen, allerdings läßt sich die Reflektivität der modulierten Porenbereiche im Prinzip noch durch eine weitere Erhöhung der Anzahl der Modulationsperioden vergrößern.

Berechnet man über $T=1-R=1-r_{\text{eff}}^2$ die Transmission aus den effektiven Reflektivitätskoeffizienten, so ergibt sich mit steigender Anzahl an Modulationsperioden ein exponentieller Abfall von T für Lichtfrequenzen innerhalb der Bandlücke. Für die Defektfrequenzen der 0° Polarisierung wird eine Abschwächung der Lichtwelle um einen Faktor 0,36 (4,4 dB) pro Modulationsperiode beobachtet. Für die 90° Polarisierung erhält man einen Abschwächungsfaktor von 0,4 (3,9 dB) pro Modulationsperiode.

Vergleicht man die Reflektivitätskoeffizienten bei den beiden unterschiedlichen Polarisierungen derselben Probe, so fällt auf, daß der Reflektivitätskoeffizient für die 0° Polarisierung immer leicht höher liegt. Der Grund dafür könnte in der etwas breiteren Bandlücke für diese Polarisierung liegen. Nach [63] hängt der Faktor κ , der die exponentielle Abschwächung der Lichtwelle innerhalb des photonischen Kristalls für Frequenzen innerhalb der photonischen Bandlücke beschreibt, von der relativen Breite der Bandlücke $\Delta\omega_{\text{gap}}$ ab. Es gilt: $\kappa \sim \frac{\Delta\omega_{\text{gap}}}{\omega_{\text{zentr}}}$. Für breitere Bandlücken ist daher die Abschwächung stärker und die Transmission T durch eine endliche Anzahl von Modulationsperioden geringer. Aus der breiteren Bandlücke für die 0° Polarisierung folgt damit eine geringere Transmission für die 0° Polarisierung verglichen mit der 90° Polarisierung. Da bei Vernachlässigung von Absorption und Streuverlusten $R=1-T$ gilt, ist die Reflexion für die 0° Polarisierung höher als für die 90° Polarisierung.

Mit dem Anstieg des Reflektivitätskoeffizienten bei größerer Anzahl an Modulationsperioden geht zwangsläufig auch ein Anstieg im Q-Faktor der Defektresonanzen einher. Der maximale Wert von $Q=138,5$ wird ebenfalls wieder für die Probe mit 7 Modulationen bei der 0° Polarisierung erreicht. Damit ist die Amplitude des elektrischen Feldes der Defektmode im Bereich der Defektschicht um einen Faktor $\sqrt{Q} = 11,8$ höher als die E-Feldamplitude der eingestrahlten Welle. Eine weitere Erhöhung dieses Wertes ist durch eine höhere Anzahl an Modulationsperioden prinzipiell möglich. In der Praxis begrenzen allerdings die Streuverluste, die auf die Inhomogenität der Porenquerschnitte zurückzuführen sind, den erreichbaren effektiven Reflektivitätskoeffizienten r_{eff} und den Q-Faktor.

Um korrekte Werte für Finesse, effektiven Reflektivitätskoeffizienten und Q-Faktor zu erhalten, war die Frequenzabhängigkeit des Phasensprunges $\frac{\partial\delta}{\partial\omega}$ berücksichtigt worden. Wird diese Frequenzabhängigkeit vernachlässigt, so ergeben sich nach den klassischen Formeln (C.11) und (C.19) deutlich höhere Werte für Finesse, Reflektivitätskoeffizient und Q-Faktor [Tab.6.4].

Polarisation	5 Modulationen		6 Modulationen		7 Modulationen	
	0°	90°	0°	90°	0°	90°
Finesse F (klassisch)	18,24	18,52	66,52	61,84	222,81	178,78
Reflektivität r_{eff}	0,842	0,844	0,954	0,950	0,986	0,983
Q-Faktor (klassisch)	30,72	30,99	111,31	102,15	391,05	306,24

Tabelle 6.4: Berechnung der Werte für Finesse F , effektiven Reflektivitätskoeffizient r_{eff} und Q-Faktor nach den klassischen Formeln (C.11) und (C.19) unter Vernachlässigung von $\frac{\partial\delta}{\partial\omega}$

Die nach den klassischen Formeln berechneten Werte für Finesse und Q-Faktor liegen ca. einen Faktor 3 höher als die wirklichen Werte aus Tab. 6.3. Korrekte Aussagen über die effektiven Reflektivitätskoeffizienten und den wahren Q-Faktor können daher aus den Transmissionsspektren nur dann abgeleitet werden, wenn die Frequenzabhängigkeit des Phasensprunges berücksichtigt wird.

Die Diskussion der Defektdoppelpeaks in diesem Kapitel hat weiterhin gezeigt, daß für genaue Aussagen über die spektralen Positionen von Bandkanten oder scharfen Defektresonanzen die genaue Porengeometrie und insbesondere die Form der Porenquerschnittsfläche berücksichtigt werden muß. Für eine näherungsweise Bestimmung der Bandlücke reicht jedoch die Annahme kreisrunder Poren völlig aus.

6.5 Experimentelle Bestimmung der Gruppengeschwindigkeit

6.5.1 Gruppengeschwindigkeit in photonischen Kristallen

Die Gruppengeschwindigkeit in einem photonischen Kristall ist durch

$$\vec{v}_g = \nabla \omega(\vec{k}) \quad (6.25)$$

definiert. Damit stellt die Gruppengeschwindigkeit den Gradienten der Frequenz im \vec{k} -Raum dar. Sie ist daher im allgemeinen nicht parallel zum \vec{k} -Vektor, sondern steht immer senkrecht auf der Dispersionsfläche. Die Dispersionsfläche ist dabei die Fläche im \vec{k} -Raum, auf der sich alle diejenigen \vec{k} -Vektoren befinden, die nach der photonischen Bandstruktur dieselbe Frequenz haben. Sie entspricht damit der Fermifläche für Elektronenwellen in Festkörpern oder einer allgemeinen Äquipotentialfläche. Die Dispersionsfläche ist durch

$$\omega(\vec{k}) = \text{konst.} \quad (6.26)$$

definiert.

Betrachtet man die Gruppengeschwindigkeit nur in Γ -A-Richtung der modulierten Poren, so vereinfacht sich (6.25) zu :

$$\vec{v}_g = \frac{\partial \omega(\vec{k})}{\partial |k_{\Gamma-A}|} \vec{e}_{\Gamma-A}. \quad (6.27)$$

Dabei beschreibt $|k_{\Gamma-A}|$ den Betrag des \vec{k} -Vektors in Γ -A-Richtung und $\vec{e}_{\Gamma-A}$ einen Einheitsvektor in Γ -A-Richtung. Der Gradient $\nabla \omega(\vec{k})$ ist im Falle der Γ -A-Richtung parallel zum \vec{k} -Vektor.

Der Grund dafür liegt in den Symmetrieeigenschaften des photonischen Kristalls und der Bandstruktur. Die Γ -A-Richtung stellt auch bei Annahme quadratischer Poren eine mindestens 2-zählige Drehachse dar. \vec{k} -Vektoren, die durch eine 180° Drehung um Γ -A ineinander übergehen, sind daher äquivalent und haben dieselbe Bandstruktur. Legt man eine Schnittebene durch das Zentrum der 1. Brillouinzone, die die Γ -A-Achse enthält, so können die äquivalenten \vec{k} -Vektoren durch "Spiegelung" an der Γ -A-Achse ineinander überführt werden [Abb. 6.31]. Diese 2D-Spiegelung entspricht in der 3D-Brillouinzone der Drehung um 180° um die Γ -A-Achse.

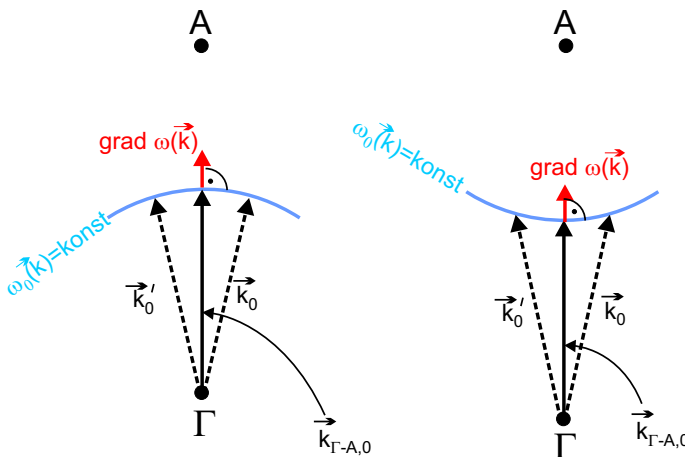


Abbildung 6.31: Zentraler Schnitt durch die 1. Brillouinzone parallel zu Γ -A. Blau: Dispersionsfläche in der Schnittebene. Rot: Gradient der Frequenz. Links: Dispersionsfläche besitzt in Γ -A-Richtung eine Ausstülpung, rechts: Dispersionsfläche besitzt in Γ -A-Richtung eine Einbuchtung. $|\vec{k}_0|$ und $|\vec{k}'_0|$ stellen äquivalente \vec{k} -Vektoren in der Umgebung von $\vec{k}_{\Gamma-A,0}$ dar.

Betrachtet man eine Dispersionsfläche für eine bestimmte konstante Frequenz ω_0 , so wird diese in Γ -A-Richtung gerade bei einem \vec{k} -Vektor $\vec{k}_{\Gamma-A,0}$ erreicht. In unmittelbarer Umgebung zu $\vec{k}_{\Gamma-A,0}$ liegen die beiden äquivalenten Vektoren \vec{k}_0 und \vec{k}'_0 . Aufgrund der Äquivalenz gilt auch $|\vec{k}_0| = |\vec{k}'_0|$. Damit trifft einer der beiden folgenden allgemeinen Fälle zu:

$$|\vec{k}_0| = |\vec{k}'_0| > |\vec{k}_{\Gamma-A,0}|, \quad (6.28)$$

$$|\vec{k}_0| = |\vec{k}'_0| < |\vec{k}_{\Gamma-A,0}| \quad (6.29)$$

Da \vec{k}_0 und \vec{k}'_0 aufgrund ihrer Äquivalenz symmetrisch zu $\vec{k}_{\Gamma-A,0}$ liegen, bildet $\vec{k}_{\Gamma-A,0}$ entweder das Zentrum einer Einbuchtung der Dispersionsfläche (6.28) oder das Zentrum einer Ausstülpung (6.29). Da der Gradient $\nabla\omega(\vec{k})$ immer senkrecht auf der Dispersionsfläche steht, ist er in beiden Fällen parallel zu $\vec{k}_{\Gamma-A,0}$. Die in (6.27) vorgenommene Vereinfachung ist damit gerechtfertigt.

6.5.2 Optische Messungen

Die Frage ist nun, wie die Gruppengeschwindigkeit speziell in Γ -A-Richtung experimentell bestimmt werden kann. Betrachtet man das Transmissionspektrum der Probe aus Abb. 6.12 so fallen in den beiden Transmissionsbereichen 500-1100 cm^{-1} sowie 1400-2400 cm^{-1} die regelmäßigen Fabry-Perot-Oszillationen auf, die durch Mehrfachreflexion des Lichts an der Oberseite (Grenzfläche Luft/modulierte Poren) und Unterseite (Grenzfläche Porenspitzen/massives Silizium Substrat) des 3D-photonischen Kristalls entstehen. Der Abstand zweier benachbarter Transmissionsmaxima im k -Raum des photonischen Kristalls entlang $\Gamma - A$ beträgt laut (C.7):

$$\Delta k_{\text{int},\Gamma-A}^{\text{max}} = \frac{\pi}{d_{\text{Tiefe}}} \quad (6.30)$$

Dabei beschreibt d_{Tiefe} die Dicke der durchstrahlten Schicht, was in unserem Fall der Porentiefe entspricht. Der Abstand von zwei benachbarten Maxima dieser Oszillationen im Frequenzraum wird mit $\Delta\omega^{\text{max}}$ bezeichnet. Bei Kenntnis der Porentiefe d_{Tiefe} kann somit der Differenzenquotient

$$\frac{\Delta\omega^{\text{max}}}{\Delta k_{\text{int},\Gamma-A}^{\text{max}}} = \frac{\Delta\omega^{\text{max}}}{\pi} d_{\text{Tiefe}} \quad (6.31)$$

gebildet werden. Er kann als Näherung für den Differentialquotienten $\frac{\partial\omega}{\partial|k_{\Gamma-A}|}$ angesehen werden, der gleichzeitig die Gruppengeschwindigkeit v_g innerhalb des photonischen Kristalls beschreibt:

$$\frac{\Delta\omega^{\text{max}}}{\pi} d_{\text{Tiefe}} = \frac{\Delta\omega^{\text{max}}}{\Delta k_{\text{int},\Gamma-A}^{\text{max}}} \approx \frac{\partial\omega}{\partial|k_{\Gamma-A}|} = v_g. \quad (6.32)$$

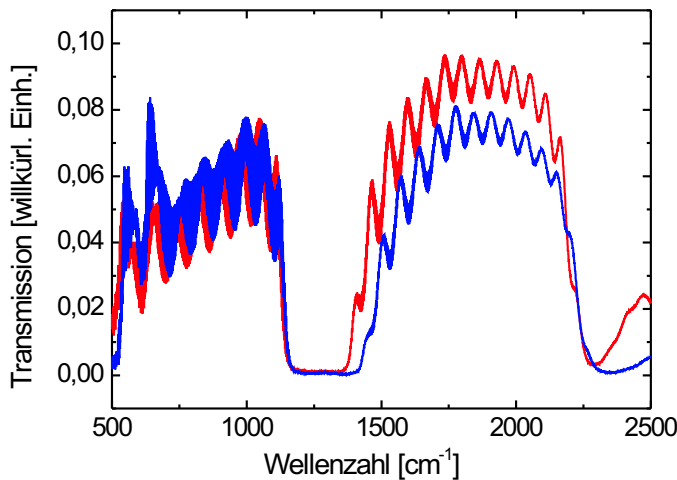


Abbildung 6.32: Transmissionspektrum der Probe mit $l_z = 2\mu\text{m}$ entlang Γ -A unter Verwendung von polarisierter Strahlung. Rot: 90° Polarisation. Blau: 0° Polarisation.

Durch Auswertung der Fabry-Perot-Oszillationen ist somit die experimentelle Bestimmung der Gruppengeschwindigkeit möglich. Das soll am Beispiel der Probe mit $l_z = 2\mu\text{m}$ aus Abb. 6.12 gezeigt

werden. Nach den Ergebnissen aus Kapitel 6.4 ist zu beachten, daß das in Abb.6.12 gezeigte unpolarisierte Spektrum sich als Mittelung der Spektren für die 0° und die 90° Polarisation ergibt. Da 0° und 90° Polarisation an verschiedene Bänder ankoppeln, die im Frequenzraum verschoben sind, ergeben sich die in Abb. 6.12 zu sehenden Oszillationen aus Beiträgen beider Polarisationen. Um Fabry-Perot-Interferenzen eindeutig einem Band zuordnen zu können, dürfen daher nur die reinen Spektren für die 0° bzw. 90° Polarisation verwendet werden. Daher wurde die Transmission der Probe mit $l_z = 2\mu\text{m}$ nochmals mit polarisierter Strahlung gemessen [Abb. 6.32]. Für die folgende Auswertung der Fabry-Perot-Oszillationen wurde nur das Spektrum der 90° -Polarisation (blau in Abb. 6.32) verwendet.

Das in Abschnitt 6.5.1 geschilderte Prinzip der Bestimmung der Gruppengeschwindigkeit ist in Abb. 6.33 graphisch dargestellt. Werden die äquidistanten Positionen der Fabry-Perot-Resonanzen im

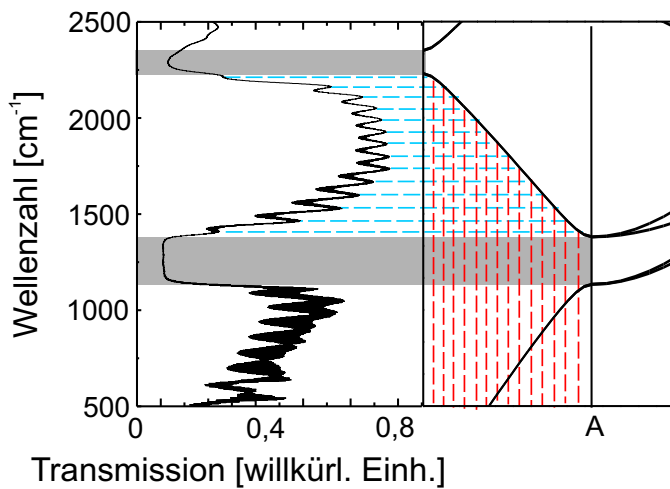


Abbildung 6.33: Prinzip der experimentellen Bestimmung der Gruppengeschwindigkeiten aus den Fabry-Perot-Resonanzen am Beispiel des hochfrequenten Bandes. Die blauen Linien zeigen die Positionen der Transmissionspeaks ω_m^{\max} im Frequenzraum. Die roten Linien zeigen die äquidistanten Positionen der Peaks im Wellenvektorraum des photonischen Kristalls.

Wellenvektorraum des photonischen Kristalls auf die Bänder projiziert (rote Linien), dann ergeben sich die Frequenzen der Fabry-Perot-Peaks aus den Schnittpunkten roten Projektionslinien mit dem Band. Die so erhaltenen Frequenzen werden durch die blauen Linien angezeigt. Durch die Krümmung der Bänder sind die Fabry-Perot-Peaks im Frequenzraum nicht äquidistant. Besonders nahe der Bandkanten wird der spektrale Abstand der Fabry-Perot-Oszillationen sehr gering.

Zur experimentellen Bestimmung der Gruppengeschwindigkeit müssen nach (6.32) die Werte für $\Delta\omega^{\max}$ und d_{Tiefe} ermittelt werden. Um die korrekten Abstände $\Delta\omega^{\max}$ der einzelnen Peak-Positionen ω^{\max} aus dem Transmissionsspektrum zu extrahieren, wird das ursprüngliche Spektrum durch einen Untergrund dividiert [Abb. 6.34]. Das ist besonders nahe der Bandkanten von Bedeutung, wo die

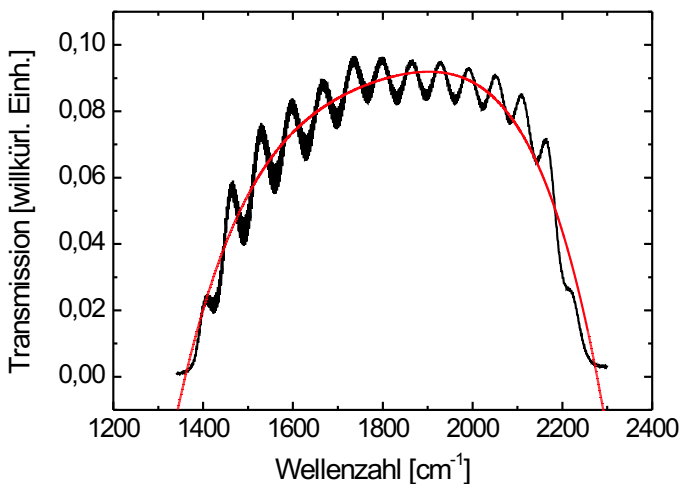


Abbildung 6.34: Definition eines Untergrundes (rot) im Transmissionsspektrum für das obere Band (schwarz) der 90° Polarisation. Der Untergrund wurde als Fit eines Polynoms 4. Grades an die Transmissionskurve erhalten.

Transmissionskurve stark fallende Flanken aufweist, da diese steilen Flanken zu Verfälschungen der ursprünglichen Peak-Position führen können. Nach Division durch den Untergrund ergeben sich normierte Transmissionskurven, aus denen die Peakpositionen abgelesen werden. Damit wird der Abstand der benachbarten Transmissionsmaxima $\Delta\omega_m^{\max} = \omega_{m+1}^{\max} - \omega_m^{\max}$ errechnet. Mit einer Porentiefe von $d_{\text{Tiefe}} = 29\mu\text{m}$, die sich aus der Auswertung eines REM-Porenlängsschnittes ergibt, kann somit der Differenzenquotient (6.31) bestimmt werden. Dieser Differenzenquotient entspricht der mittleren experimentell bestimmten Gruppengeschwindigkeit im spektralen Intervall $[\omega_m^{\max}, \omega_{m+1}^{\max}]$. Die experimentellen Werte sind als rote Punkte in Abb. 6.35 und 6.36 dargestellt. Als Wellenzahlkoordinate der einzelnen Gruppengeschwindigkeitswerte wurde die Mitte $\omega_m^{\max} + \frac{\Delta\omega_m^{\max}}{2}$ der Intervalle $[\omega_m^{\max}, \omega_{m+1}^{\max}]$ gewählt.

Die so experimentell ermittelte Gruppengeschwindigkeit kann nun mit der theoretisch bestimmten Gruppengeschwindigkeit verglichen werden. Die theoretische Gruppengeschwindigkeit wird durch die Berechnung des Anstieges $\frac{\partial\omega}{\partial k}$ der Bänder aus der Bandstruktur für sinusförmig modulierte kreisrunde Poren ermittelt. Diese theoretische Gruppengeschwindigkeit wird durch die schwarze Kurve in Abb. 6.35 und 6.36 repräsentiert.

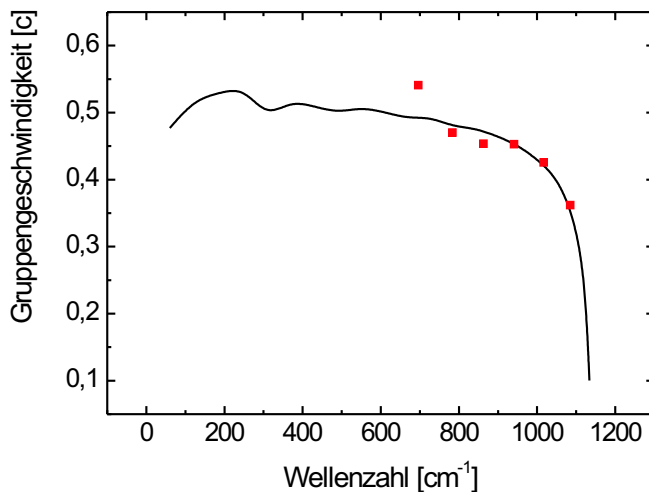


Abbildung 6.35: Gruppengeschwindigkeit in Einheiten der Vakuumlichtgeschwindigkeit c für den Spektralbereich des unteren Bandes. Rot: experimentell bestimmte Werte, schwarz: aus der Bandstruktur berechnet.

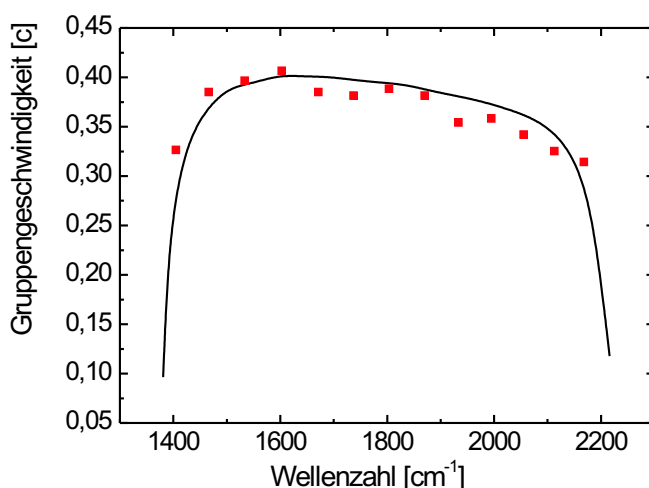


Abbildung 6.36: Gruppengeschwindigkeit in Einheiten der Vakuumlichtgeschwindigkeit c für den Spektralbereich des oberen Bandes. Rot: experimentell bestimmte Werte, schwarz: aus der Bandstruktur berechnet.

Bei der Berechnung der Gruppengeschwindigkeit im Bereich des oberen Bandes ist zu beachten, daß die Gruppengeschwindigkeit positiv aufzutragen ist, obwohl das Band in der 1. Brillouinzone mit steigendem \vec{k} -Vektor abfällt [Abb. 6.33]. Die reine Differentiation in (6.27) unter Verwendung des \vec{k} -Vektors der ersten Brillouinzone würde daher eine negative Gruppengeschwindigkeit ergeben. Der Grund für diesen scheinbaren Widerspruch liegt in der Betrachtung des oberen Bandes innerhalb des

reduzierten Zonenschemas: Da es möglich ist, auf den \vec{k} -Vektor einer Blochmode weitere reziproke Gittervektoren aufzuaddieren, ohne daß sich an der Frequenz der Blochmode etwas ändert, können alle Bänder in die erste Brillouinzone "hineingeschoben" werden. Die Definition der Gruppengeschwindigkeit (6.25) baut aber auf dem Haupt- \vec{k} -Vektor \vec{K} der Blochmode auf, nach dem ω differenziert wird. Für den Haupt- \vec{k} -Vektor \vec{K} einer Blochmode gilt: $\vec{K} = \vec{k} + \vec{G}'$. Dabei beschreibt \vec{k} den \vec{k} -Vektor der Blochmode in der ersten Brillouinzone und \vec{G}' den reziproken Gittervektor, der in der Fourierreihe des gitterperiodischen Anteils u der Blochmode den stärksten Beitrag leistet (siehe Gleichung 2.16) [70]. Für das hier diskutierte obere Band liegt der Haupt- \vec{k} -Vektor in der zweiten Brillouinzone. Wird daher das ausgedehnte Zonenschema betrachtet, erscheint das obere Band vollständig in der zweiten Brillouinzone. Dort ist sein Anstieg $\frac{\partial\omega}{\partial\vec{K}}$ positiv, so daß die Gruppengeschwindigkeit damit ebenfalls positiv ist. Die Differentiation unter Verwendung des \vec{k} -Vektors der ersten Brillouinzone würde daher ein falsches Vorzeichen liefern.

Vergleicht man die experimentell erhaltenen Werte für die Gruppengeschwindigkeit mit den aus der Bandstruktur ermittelten, so ist im allgemeinen eine sehr gute Übereinstimmung festzustellen. Die Tendenz der Verringerung der Gruppengeschwindigkeit an den Bandkanten wird durch die experimentellen Werte in den Bereichen 1000cm^{-1} - 1100cm^{-1} sowie 1450cm^{-1} - 1550cm^{-1} ebenfalls richtig wiedergegeben.

Bei der experimentellen Bestimmung der Gruppengeschwindigkeit v_g muß allerdings beachtet werden, daß sich v_g nahe der Bandkante aufgrund der großen Bandkrümmung stark ändert. Damit gilt die Näherung $\frac{\Delta\omega^{\max}}{\Delta k_{\text{int},\Gamma-A}^{\max}} \approx \frac{\partial\omega}{\partial|k_{\Gamma-A}|}$ aus (6.32) nur noch eingeschränkt. Für die vorliegende Probe ist der spektrale Abstand der Fabry-Perot-Oszillationen noch zu groß, um die starke Verringerung der Gruppengeschwindigkeit an der Bandkante wiederzugeben.

Um eine genaue experimentelle Bestimmung der Gruppengeschwindigkeit auch nahe der photonischen Bandkante zu ermöglichen, ist die Untersuchung von tieferen Poren nötig. Durch ein größeres d_{Tiefe} sinkt $\Delta k_{\text{int},\Gamma-A}^{\max}$ nach (6.30), und die Transmissionspeaks liegen dichter im Frequenzraum. Dann treten auch noch sehr nahe an den Bandkanten Transmissionspeaks auf, und der Differentialquotient $\frac{\partial\omega}{\partial k_{\text{int}}}$ läßt sich auch nahe der Bandkante besser durch den Differenzenquotienten $\frac{\Delta\omega^{\max}}{\Delta k_{\text{int},\Gamma-A}^{\max}}$ annähern.

Obwohl die Methode der experimentellen Bestimmung der Gruppengeschwindigkeiten über die Fabry-Perot-Interferenzen sehr einfach erscheint, ist ihre Anwendbarkeit an folgende prinzipielle Bedingungen geknüpft.

a) Die einfallende Strahlung darf nur an die Blochmoden eines einzigen Bandes ankoppeln. Werden mehrere Blochmoden bei derselben Frequenz angeregt, so kann es im photonischen Kristall zu deren Interferenz kommen. Dann sind keine eindeutigen Fabry-Perot-Oszillationen mehr zu beobachten [65]. Damit eignet sich die Methode vorrangig für sogenannte monomodige Spektralbereiche, wo nur ein einziges photonisches Band in Ausbreitungsrichtung existiert. Sie funktioniert außerdem noch, wenn durch die spezifische Polarisation der einfallenden Strahlung nur an die Moden eines photonischen Bandes in Ausbreitungsrichtung angekoppelt werden kann. Das letztere war bei den hier gezeigten Untersuchungen der Fall: Durch die leicht quadratische Form der Poren war es zu einer Aufspaltung der Bänder in Γ -A Richtung gekommen, so daß in den beiden betrachteten Spektralbereichen 500 - 1100cm^{-1} sowie 1400 - 2400cm^{-1} jeweils zwei photonische Bänder auftraten. Durch die lineare Polarisation der einfallenden Welle (90° -Polarisation) konnten aber nur die Moden eines der beiden Bänder angeregt werden. Dadurch ergaben sich klar definierte Fabry-Perot Oszillationen.

b) Die Grenzflächen des photonischen Kristalls müssen eben und parallel zueinander sein. Außerdem muß die Dispersionsrelation im untersuchten Bereich des photonischen Kristall überall gleich sein. Diese Bedingungen sind wichtig, damit die mehrfach an Ober- und Unterseite reflektierten Wellen eine feste Phasenbeziehung haben und somit konstruktiv interferieren können. Rauigkeiten und Welligkeiten an den Grenzflächen des photonischen Kristalls sowie Abweichungen von der strengen Periodizität des Brechungsindex führen zum Verschmieren der Fabry-Perot-Oszillationen. Für den speziellen Fall

der hier betrachteten Proben heißt das, daß alle Poren dieselbe Tiefe haben müssen. Abweichungen von der Periodizität des Brechungsindex (z.B. Schwankungen im Porenradius von benachbarten Poren) müssen sich auf Längenskalen weit unterhalb der spektroskopisch untersuchten Wellenlängen beschränken.

Da die Bedingungen in b) für das Auftreten von Fabry-Perot-Oszillationen notwendig sind, kann die Beobachtung von Fabry-Perot-Oszillationen umgekehrt auch als Zeichen der hohen Probenqualität (d.h. strengen Periodizität und konstanter Porentiefe) gewertet werden.

6.6 Omnidirektionale Totalreflexion

6.6.1 Theorie

In Kapitel 2.3 wurde gezeigt, daß für hohe Brechungsindexkontraste und hohe Absolutwerte des Brechungsindex ein 1D-photonischer Kristall einen omnidirektionalen Reflektor darstellt. Im folgenden wird untersucht, ob die modulierte Porenstruktur die Eigenschaft der omnidirektionalen Totalreflexion (OT) besitzt.

Laut Kapitel 2.3 besteht der OT-Bereich aus der Überlappung der Bandlücken, die sich für senkrechten Einfall ($\alpha=0^\circ$) und streifenden Einfall ($\alpha=90^\circ$) ergeben. Das gilt auch für die modulierte Porenstruktur, solange die fundamentale Bandlücke in Γ -A-Richtung bei $\frac{\omega a}{2\pi c} < 0,35$ liegt und damit Einflüsse der Periodizität in der xy -Ebene zu vernachlässigen sind.

Die Bandlücke für senkrechten Einfall wurde in den Kapiteln 6.3 und 6.4 untersucht. Ihre spektrale Position folgte direkt aus dem Segment Γ -A der 3D-Bandstruktur. Um die Bandlücke für den Einfallswinkel $\alpha=90^\circ$ zu erhalten, muß die Brechung an der Oberfläche des 3D-photonischen Kristalls beachtet werden. Dazu muß die Brechung des Lichtes, das streifend auf die Oberfläche der Probe auftrifft, untersucht werden. Dabei sind zwei Bedingungen zu erfüllen:

1. Die Tangentialkomponente k_{\parallel} der Wellenvektoren von einfallender äußerer Welle \vec{k}_{ex} und interner Blochwelle \vec{k}_{int} müssen gleich sein.
2. Die Frequenz von einfallender ebener Welle und Blochwelle müssen übereinstimmen.

Aus Abb. 6.37 ist zu entnehmen, daß prinzipiell alle \vec{k}_{int} - Vektoren, deren Fußpunkt auf der Linie S-T liegt, die Bedingung (1) der k_{\parallel} -Erhaltung erfüllen. In Abb. 6.37 sind vier Vektoren (blau) beispielhaft eingetragen.

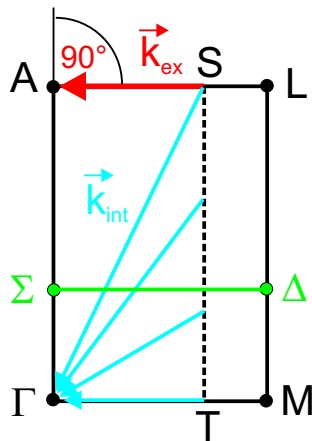


Abbildung 6.37: Brechung an der Oberfläche des 3D-photonischen Kristalls am Beispiel der Schnittebene Γ -M-L-A. Rot: \vec{k}_{ex} -Vektor der unter einem Winkel von $\alpha=90^\circ$ einfallenden Welle. Blau: Beispiele für k_{int} -Vektoren, die der Bedingung der k_{\parallel} -Erhaltung entsprechen.

Welche dieser vielen \vec{k}_{int} -Blochmoden wirklich durch die einfallende Welle angeregt wird, hängt von der Frequenz $\omega(\vec{k}_{\text{int}})$ ab. Jedem \vec{k}_{int} sind über die photonische Bandstruktur Frequenzen zugeordnet. Fällt die Frequenz einer dieser \vec{k}_{int} -Blochmoden mit der Frequenz der einfallenden Welle zusammen, so ist Bedingung (2) ebenfalls erfüllt. Diese Blochmode wird durch die einfallende Welle angeregt.

Die beiden Bedingungen (1) und (2) können wie in Kapitel 2 durch das Einzeichnen von Einfallsgerechten mit

$$k_{\parallel} = |k_{\text{ex}}| \sin \alpha = \frac{\omega}{c} \sin \alpha \quad (6.33)$$

in die Bandstruktur verdeutlicht werden. Dies wird am Beispiel der bereits aus Abb. 6.11 bekannten Bandstruktur für sinusförmig modulierte, kreisrunde Poren gezeigt. Dabei ist zu beachten, daß k_{\parallel} in mehreren Segmenten der 3D-Bandstruktur erscheint [Abb. 6.38]. Zum einen kann k_{\parallel} nach Abb. 6.37

in den Segmenten A-L und Γ -M aufgetragen werden. Das entspricht aber nur dem Fall, wenn die Kippung der Einfallrichtung in Richtung Γ -M erfolgt. Für eine Kippung in Richtung Γ -K liegt k_{\parallel} in den Segmenten A-H und Γ -K. Die sich so ergebenden Einfallsgerechten für $\alpha=90^\circ$ bilden den in Abb. 6.38 durch rote Linien gekennzeichneten Lichtkegel.

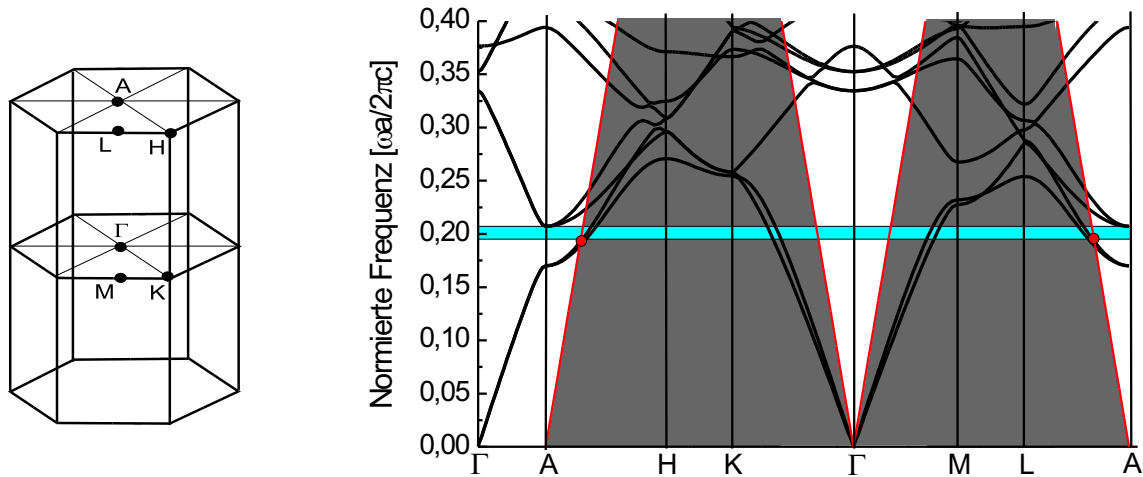


Abbildung 6.38: Bandstruktur für sinusförmig modulierte Poren mit kreisförmigem Porenquerschnitt. Parameter: $l_z=1,333 a$; $p_{2Dmin} = 0,45$; $p_{2Dmax} = 0,81$. Der Lichtkegel wird durch die roten Geraden bezeichnet. Die Bereiche, an die von außen einfallende Wellen nicht ankoppeln können, sind grau gekennzeichnet. Der Bereich omnidirektionaler Totalreflexion erscheint blau [Bandstrukturrechnung von K. Busch].

Alle Moden, die unterhalb des Lichtkegels im grau schattierten Bereich der Bandstruktur liegen, können nicht durch eine von außen einfallende Welle angeregt werden. So liegt z.B. das 1. Band im Bereich K- Γ -M vollständig unterhalb des Lichtkegels, so daß durch von außen einfallende Strahlung bei diesen Frequenzen keine Blochmoden in der xy-Ebene angeregt werden können. Alle oberhalb des Lichtkegels im weißen Bereich der Bandstruktur liegenden Blochmoden können bei passendem Einfallswinkel α durch von außen einfallende Wellen angeregt werden. Betrachtet man diesen weißen Bereich genauer, so fällt bei $\frac{\omega a}{2\pi c} \approx 0,2$ eine spektrale Region auf, in der keine Bänder auftreten (blauer Balken in Abb. 6.38). Da in diesem Spektralbereich keine Moden im photonischen Kristall existieren, an die von außen einfallende Wellen ankoppeln können, kommt es zur Totalreflexion. Der blau dargestellte Bereich entspricht damit dem Spektralbereich der omnidirektionalen Totalreflexion (OT) für die modulierte Porenstruktur. Die obere Grenze dieses Bereiches wird durch den oberen Rand der fundamentalen Bandlücke am A-Punkt bei $\frac{\omega a}{2\pi c} = 0,207$ gebildet. Die untere Grenze wird durch den Schnittpunkt des Lichtkegels mit dem 2. Band in den Segmenten A-L und A-H bestimmt (rote Punkte in Abb.6.38). Dabei liegen die Schnittpunkte in beiden Abschnitten A-L und A-H nahezu bei derselben Frequenz von $\frac{\omega a}{2\pi c} = 0,193$. Die Breite des OT-Bereiches beträgt damit $\frac{\Delta\omega}{\omega_{centr}} = 7\%$.

Kehrt man nochmals zu Abb. 6.37 zurück, so fällt auf, daß k_{\parallel} auch in einem Segment $\Sigma - \Delta$ der Bandstruktur aufgetragen werden könnte. Dabei ist die Lage von Σ und Δ nur insoweit festgelegt, daß Σ zwischen Γ und A und Δ auf derselben Höhe zwischen M und L liegt. Die Bandstruktur für das Segment $\Sigma - \Delta$ liegt daher zwischen den Bandstrukturen der beiden charakteristischen Segmente Γ -M und A-L. Damit liegen die Frequenzen der beiden Bänder 1 und 2 im Segment $\Sigma - \Delta$ unterhalb der Frequenzen von Band 1 und Band 2 im Segment A-L. Die Frequenzen der beiden oberen Bänder 3 und 4 liegen im Segment $\Sigma - \Delta$ dagegen höher als im Segment A-L. Die Bandstruktur im Segment $\Sigma - \Delta$ hat damit keinen Einfluß auf die Lage und Begrenzung des OT-Bereiches. Eine ähnliche Betrachtung für die Schnittebene Γ -K-H-A führt zum selben Ergebnis. Zur Bestimmung des OT-Bereiches reicht es daher aus, nur die Abschnitte A-L und A-H der Bandstruktur zu betrachten.

In Kapitel 6.4 wurde darauf hingewiesen, daß die Form der Porenquerschnitte bei genauen Betrachtungen auch im niederfrequenten Spektralbereich der Bandstruktur eine Rolle spielt. Es soll daher überprüft werden, ob auch eine modulierte Porenstruktur mit quadratischen Poren einen omnidirektionalen Totalreflexionsbereich (OT-Bereich) besitzt. Dazu wurde wieder die in Abb. 6.25 bereits diskutierte rechteckförmig modulierte Porenstruktur mit quadratischem Porenquerschnitt angenommen. Die Modulationsperiode $l_z = 1,333a$, sowie die minimale und maximale Porosität $p_{2Dmin} = 0,45$ und $p_{2Dmax} = 0,81$ entsprechen der eben diskutierten Struktur mit kreisrunden sinusförmig modulierten Poren. Die Strukturen sind daher wie in Abb. 6.25 direkt vergleichbar.

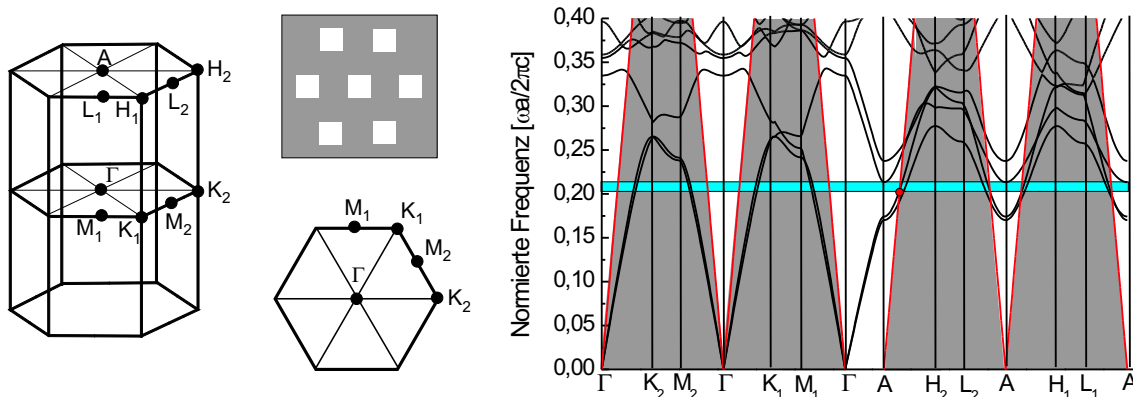


Abbildung 6.39: Bandstruktur für rechteckförmig modulierte, quadratische Poren (rechts). Links: Neuedefinition der Punkte in der hexagonalen Brillouinzone. Mitte: Orientierung der quadratischen Porenquerschnitte relativ zu den Punkten in der 1. Brillouinzone. Rechts: Bandstruktur. Lichtkegel und OT-Bereich wie in Abb. 6.38 gekennzeichnet [Bandstrukturrechnung von C. Jamois].

Um den OT-Bereich bestimmen zu können, muß die Bandstruktur wie in Abb. 6.38 in mehreren Richtungen der Brillouinzone betrachtet werden. Bei der Behandlung der quadratischen Porenstruktur muß dabei die reduzierte Symmetrie beachtet werden (siehe Abschnitt 6.4.4.2). Will man die hexagonale Brillouinzone beibehalten, so ist zu berücksichtigen, daß nicht mehr alle M-Punkte gleichwertig sind. Gleiches gilt für K, L und H-Punkte. Es gibt nun jeweils 2 unterschiedliche M, K, L und H-Punkte, die mit $M_1, M_2, K_1, K_2, L_1, L_2$ und H_1, H_2 bezeichnet werden [Abb. 6.39 (links)]. Die Lage dieser Punkte hängt von der Orientierung der Quadrate im hexagonalen Gitter ab [Abb. 6.39 (Mitte)]. Zur Bestimmung des omnidirektionalen Reflexionsbereichs muß die Bandstruktur in den Segmenten A- L_1 , A- L_2 , A- H_1 und A- H_2 betrachtet werden.

Nach Einzeichnung des Lichtkegels ergibt sich auch für diese Struktur ein Spektralbereich der OT. Er befindet sich zwischen $0,204 < \frac{\omega a}{2\pi c} < 0,213$ und hat damit eine relative Breite von $\frac{\Delta\omega}{\omega_{\text{centr}}} = 4,3\%$. Die obere Grenze wird durch das 3. Band am A-Punkt gebildet, während die untere Grenze durch den Schnittpunkt des Lichtkegels mit dem 2. Band im Abschnitt A- H_2 bestimmt wird.

Da für kreisrunde wie für quadratische Porenquerschnitte laut Theorie ein OT-Bereich vorliegt, ist zu erwarten, daß auch die Proben, deren Porenquerschnitte abgerundeten Quadraten entsprechen, omnidirektionale Totalreflexion zeigen.

6.6.2 Optische Messungen

Zum experimentellen Nachweis der OT wurden Transmissionsmessungen verwendet. Da die OT durch den Überlapp der Bandlücken für die Einfallswinkel $\alpha=0^\circ$ und $\alpha=90^\circ$ entsteht, ist dieser Bereich durch Überlapp der Spektralbereiche mit verschwindender Transmission für diese Einfallswinkel nachweisbar. Als Probe wurde die bereits in den Kapiteln 6.3 und 6.4 beschriebene Struktur mit einer Modu-

lationsperiode $l_z=2\mu\text{m}$ verwendet. Sie kann durch die beiden Modelle aus Abschnitt 6.6.1 angenähert werden.

Wie in Abschnitt 6.6.1 ausgeführt wurde, wird die obere Grenze des OT-Bereichs für quadratische Poren durch das 3. Band in Γ -A-Richtung gebildet. Das entspricht dem oberen Rand der Bandlücke für die 90° Polarisation (siehe Abb. 6.25). Zur Bestimmung der hochfrequenten Grenze des OT-Bereichs wird daher das Transmissionsspektrum der 90° Polarisation bei senkrechtem Einfall aus Abb. 6.32 herangezogen.

Um die untere Grenze des OT-Bereichs zu bestimmen, müßten idealerweise Transmissionmessungen unter einem Winkel von $\alpha=90^\circ$ gemacht werden. Wendet man das Modell quadratischer Poren an, so ist eine Transmissionmessung für eine Kippung in $\Gamma-K_2$ -Richtung nötig. In diesem Falle wird die gemessene Transmission durch die Bandstruktur entlang $\Gamma-A-H_2$ bestimmt. Da die untere Grenze des OT-Bereichs für quadratische Poren durch den Schnittpunkt des Lichtkegels mit dem 2. Band im Segment $A-H_2$ festgelegt wird, ist sie aus dem Transmissionsspektrum für die $\Gamma-K_2$ -Kippung ablesbar. Wendet man dagegen das Modell kreisrunder Poren an, so wird die untere OT-Grenze durch die beiden Segmente A-L und A-H der Bandstruktur auf nahezu dieselbe Frequenz festgelegt. Für diesen Fall erhält man die untere OT-Grenze aus den Transmissionsspektren für die Kippung in $\Gamma-M_1$ -Richtung und $\Gamma-K_2$ -Richtung gleichermaßen. Aus diesen Betrachtungen kann geschlußfolgert werden, daß sich aus Transmissionmessungen für die beiden Kippungen in $\Gamma-M_1$ -Richtung und $\Gamma-K_2$ -Richtung die untere OT-Grenze für die Probe auf jeden Fall bestimmen läßt.

Der experimentell mögliche maximale Einfallswinkel war auf 70° beschränkt. Die Transmissionmessungen wurden daher für diesen Einfallswinkel durchgeführt. Die Transmission wurde für die s-Polarisation und die p-Polarisation bestimmt. Die Probe wurde in 2 verschiedene Richtungen verkippt – zum einen in die $\Gamma-M_1$ -Richtung, zum anderen in die $\Gamma-K_2$ -Richtung.

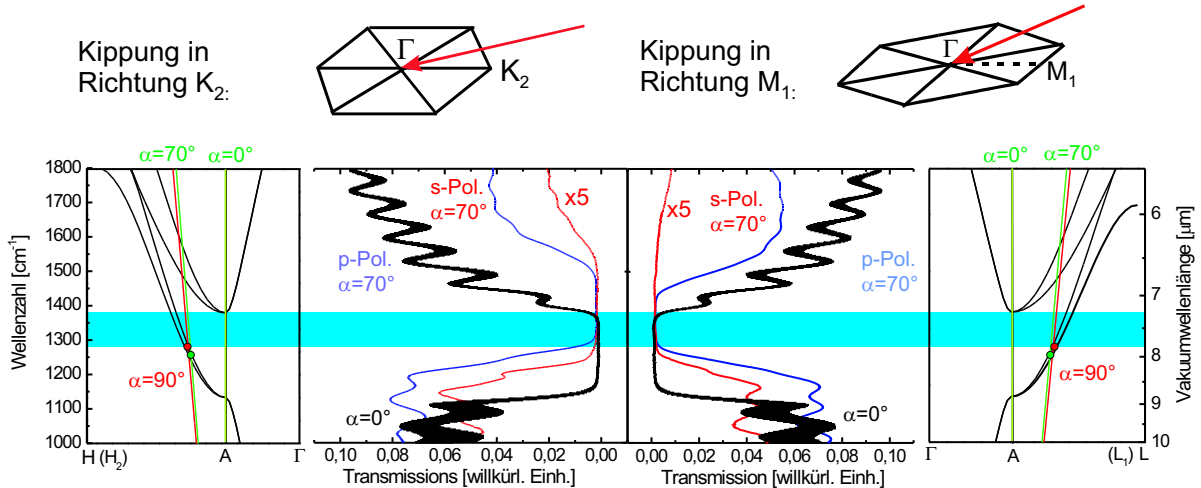


Abbildung 6.40: Transmissionmessungen für $\alpha=0^\circ$ und $\alpha=70^\circ$ und Vergleich mit der Bandstruktur für das Modell kreisrunder Poren. Links außen: Bandstruktur für Γ -A-H, Einfallsgerade für $\alpha=70^\circ$ und $\alpha=0^\circ$ in grün, Einfallsgerade für $\alpha=90^\circ$ (Lichtkegel) in rot. Mitte links: Transmissionmessungen für Kippung in Richtung $\Gamma-K_2$. Mitte rechts: Transmissionmessungen für Kippung in Richtung $\Gamma-M_1$. Rechts außen: Bandstruktur für Γ -A-L

In Abb. 6.40 sind die gemessenen Transmissionsspektren dargestellt. In der Tat zeigt sich im Bereich 1300cm^{-1} - 1380cm^{-1} ein schmaler Bereich, in dem die Bereiche mit verschwindender Transmission der verschiedenen Spektren überlappen. Er wird an der hochfrequenten Seite durch den Anstieg der Transmission im schwarzen Spektrum, das für senkrechten Einfall aufgenommen wurde, begrenzt. Die untere Grenze wird durch das für $\alpha=70^\circ$ aufgenommene Spektrum der p-Polarisation bei $\Gamma-K_2$ -Kippung bestimmt. Das entspricht den Vorhersagen aus dem Modell mit quadratischen Poren, nach dem

die untere OT-Grenze durch den Schnittpunkt des Lichtkegels mit dem 2. Band im Segment $A - H_2$ gebildet wird. Die gemessene spektrale Lage des Bereiches verschwindender Transmission stimmt aber auch sehr gut mit den Vorhersagen des Modells mit kreisrunden Poren überein, wie durch Vergleich mit den Bandstrukturen ganz links und ganz rechts in Abb. 6.40 zu sehen ist. Der blaue Balken, der sich als OT-Bereich aus der Bandstruktur für kreisrunde Poren ableitet, deckt sich sehr gut mit dem gemessenen Bereich verschwindender Transmission für alle Spektren.

Streng genommen beweisen die dargestellten Spektren nur, daß für Einfallswinkel $0^\circ < \alpha < 70^\circ$ Totalreflexion vorliegt. Allerdings kann aus den Bandstrukturen eine Abschätzung für den OT-Bereich der Probe getroffen werden, indem man die Schnittpunkte für die $\alpha=70^\circ$ Einfallsggeraden mit Band 2 (grüne Punkte in Abb. 6.40) mit den Schnittpunkten für die $\alpha=90^\circ$ Einfallsggeraden mit Band 2 (rote Punkte in Abb. 6.40) vergleicht. Dabei ergibt sich, daß die untere OT-Grenze, die sich als Schnittpunkt des Lichtkegels mit dem 2. Band ergibt, noch um 1,63% zu höheren Frequenzen verschoben ist im Vergleich zum Schnittpunkt der 70° Einfallsggeraden mit dem 2. Band. Auf die experimentellen Ergebnisse übertragen bedeutet das, daß im Bereich 1321cm^{-1} bis 1380cm^{-1} omnidirektionale Totalreflexion für die Probe vorliegt. In normierten Frequenzen entspricht das einem Spektralbereich $0,198 < \frac{\omega a}{2\pi c} < 0,207$. Die obere Grenze stimmt damit sehr gut mit den Erwartungen für kreisrunde Poren überein, während die untere Grenze leicht zu höheren Frequenzen verschoben ist. Daher ist die relative Breite des OT-Bereichs der Probe etwas geringer und beträgt nur 4,4% statt der 7% für kreisrunde Poren. Vergleicht man das experimentelle Ergebnis mit den theoretischen Werten für die quadratischen Poren, so liegt der OT-Bereich der Probe insgesamt bei niedrigeren Frequenzen. Die relative Breite von 4,4% stimmt dagegen sehr gut mit den Vorhersagen für quadratische Poren (4.3%) überein. Die Eigenschaft der omnidirektionalen Totalreflexion der Probe mit abgerundeten Quadraten kann also durch beide Porenmodelle sehr gut beschrieben werden.

7 Anwendungen

Im Zusammenhang mit dieser Arbeit sind zwei Patentanmeldungen entstanden. Zum einen wurde das Prinzip eines opto-optischen Schalters für einen 2D-photonischen Kristall demonstriert, der erstmals das "packet-switching" im 100 GHz Bereich erlauben dürfte [71]. Dabei ist die Idee der Verschiebung der Dispersionsrelation durch optisch induzierte Brechungsindexänderung nicht alleine auf die Verschiebung einer Bandlücke beschränkt. Auch die spektrale Verschiebung von Defektmoden könnte über diesen Mechanismus erfolgen.

Die zweite Erfindungsmeldung betrifft einen Gas- und Flüssigkeitssensor: In die Poren der 2D- und 3D-photonischen Kristalle können flüssige oder gasförmige Stoffe eingefüllt werden, auf die dann ebenfalls die Dispersionsrelation der photonischen Kristalle wirkt. Im speziellen Fall ist daran gedacht, die niedrige Gruppengeschwindigkeit nahe der Bandkanten auszunutzen. Durch die niedrige Gruppengeschwindigkeit verbleibt transmittiertes Licht länger im photonischen Kristall. Wird ein Gas oder eine Flüssigkeit in die Poren eingefüllt, die gerade im spektralen Bereich der geringen Gruppengeschwindigkeit eine Absorptionslinie aufweisen, so wird die Absorption verstärkt, da dem Licht durch die längere Verweildauer eine größere Wechselwirkungszeit mit den Gasmolekülen bleibt. Diese erhöhte Absorption könnte für verbesserte miniaturisierte Gassensoren, die auf der Absorption von Gas- oder Flüssigkeitsmolekülen im IR basieren, benutzt werden [72]. Da die fundamentale Bandlücke der modulierten Poren in Γ -A-Richtung leicht durch die entsprechende Wahl der Modulationsperiode auf die richtige Frequenz eingestellt und eine Transmissionsmessung entlang der Porenachsen experimentell einfach zu realisieren ist, erscheint diese Struktur besonders geeignet. Der beschriebene Effekt der verstärkten Absorption sollte für diese Struktur nahe der oberen Bandkante der fundamentalen Bandlücke in Γ -A-Richtung auftreten, da die Blochmoden dort stehende Wellen bilden, deren Schwingungsbüchse sich in den Ebenen mit maximalem Porendurchmesser befinden. Das elektrische Feld, der Lichtwelle konzentriert sich somit in dem Bereich mit hohem (absorbierenden) Gasanteil, was den verstärkten Absorptionseffekt unterstützt. Dieser Effekt ist im Bereich der Röntgenbeugung als „anomale Absorption“ bekannt.

8 Zusammenfassung

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurden 2D- und 3D-photonische Kristalle aus makroporösem Silizium hergestellt und optisch charakterisiert. Die Ziele waren:

1. Die Herstellung eines 2D-photonischen Kristalls aus makroporösem Silizium mit einer 2D-photonischen Bandlücke im nahen Infrarot.
2. Die Demonstration einer schnellen spektralen Verschiebung einer photonischen Bandlücke am Beispiel eines photonischen Kristalls aus makroporösem Silizium (Schaltbarkeit).
3. Die Herstellung eines 3D-photonischen Kristalls aus makroporösem Silizium durch Variation des Porendurchmessers mit der Porentiefe sowie dessen optische Charakterisierung. Weiterhin sollte geklärt werden, ob der entsprechende 3D-photonische Kristall eine vollständige 3D-photonische Bandlücke hat.

Dazu wurden n-typ Siliziumproben in Flußsäure unter Beleuchtung der Rückseite elektrochemisch geätzt.

Wird die Beleuchtungsintensität während des Ätzprozesses konstant gehalten, so wachsen Makroporen senkrecht und gerade in die Tiefe. Durch eine photolithographische Vorstrukturierung der Oberfläche konnte ein 2D-hexagonales Porengitter mit einer Gitterkonstante $a=500\text{nm}$ im Silizium erzeugt werden, das einen 2D-photonischen Kristall bildete. Die spektralen Bereiche der Totalreflexion konnten durch eine Reflexionsmessung mit einem IR-Mikroskop in Γ -M-Richtung bestimmt werden. Ein Vergleich mit einer Bandstrukturechnung und einer Reflexionsrechnung, die für die Struktur durchgeführt wurden, zeigten sehr gute Übereinstimmung. Daraus konnte geschlossen werden, daß die Probe eine vollständige 2D-photonische Bandlücke im nahen Infrarot bei $\lambda \approx 1,3\mu\text{m}$ besitzt.

Eine ähnliche Probe wurde für ein weitergehendes optisches Experiment zur opto-optischen Schaltbarkeit einer photonischen Bandlücke von einem Kooperationspartner in Toronto benutzt: Durch Bestrahlung einer Bruchkante des 2D-photonischen Kristalls mit einem Pumplaser wurden freie Ladungsträger im Silizium in einer Oberflächenschicht erzeugt. Dadurch kam es zu einer Verringerung des Brechungsindex des Silizium, und eine Verschiebung der Bandlücken zu höheren Frequenzen in dieser Oberflächenschicht gegenüber dem ungepumpten Bereich des photonischen Kristalls trat auf. Dies wurde durch Verschiebung des Bereichs der Totalreflexion in Reflexionsspektren nachgewiesen. Bei einer maximalen Energiedichte des Pumplaserpulses von $2,1 \frac{\text{mJ}}{\text{cm}^2}$ wurde die Verschiebung einer Bandkante um $\Delta\lambda=29\text{nm}$ beobachtet. Die relative Änderung der Reflexion für Frequenzen in der Umgebung der Bandkante betrug dabei bis zu 250% und hatte damit eine Dynamik von 23dB, die mit einer typischen Zeitkonstante von 400fs erreicht werden konnte. Dieser kurzen "Anschaltzeit" steht allerdings eine lange "Ausschaltzeit" gegenüber, da die angeregten Elektronen aufgrund der indirekten Bandlücke des Siliziums nur langsam über den Augermechanismus rekombinieren. Eigene Abschätzungsrechnungen ergaben, daß durch Einbringung von Goldatomen und besonders durch Erhöhung der Oberflächenrekombination durch z.B. Aufbringen von Nickelatomen eine Reduzierung der Lebensdauer der angeregten Ladungsträger bis in den Pikosekundenbereich möglich ist. Damit konnte das Prinzip eines schnellen opto-optischen Schalters, der das "packet switching" in optischen Netzwerken erlauben sollte, demonstriert werden. Die ersten beiden Ziele konnten somit erreicht werden.

Im zweiten Teil der Arbeit wurde die Erweiterung der 2D-photonischen Kristalle mit einer 2D-Gitterkonstante $a = 1,5\mu\text{m}$ zu 3D-photonischen Kristallen bearbeitet. Dazu wurde die Beleuchtungsstärke während des photoelektrochemischen Ätzens der Makroporen periodisch variiert. Damit ändert

sich auch die Ätzstromdichte zeitlich periodisch und der geätzte Porendurchmesser variiert periodisch mit der Porentiefe. Allerdings verschmiert die Porenmodulation mit kürzer werdender Modulationsperiode.

Die Modulation des Porendurchmessers zusammen mit der lateralen 2D-hexagonalen Periodizität der Poren sollte theoretisch einen einfachen 3D-hexagonalen photonischen Kristall ergeben. Da jedoch die Porenquerschnitte Quadraten mit abgerundeten Ecken ähneln und damit eine vierzählige Symmetrie haben, konnte durch Symmetriebetrachtungen gezeigt werden, daß es sich bei der Probenstruktur um einen orthorhombischen Kristall mit zweifacher Basis handelt. Dies führt zu einer Aufhebung der Entartung von Bändern entlang der Porenachse (Γ -A-Richtung) und zu einer polarisationsabhängigen Bandstruktur. Eine Abschätzung der Polarisationsaufspaltung im langwelligen Bereich mit Hilfe der Wienerschen Formeln wurde erarbeitet.

Die Bandstruktur und ihre Eigenschaften wurden mittels polarisationsabhängigen optischen Messungen mit drei verschiedenen Methoden analysiert. Dabei interessierte besonders der Teil der Bandstruktur, der durch die Modulation der Poren beeinflusst wird. Daher wurden folgende Methoden angewandt und mit 1D-Transmissions- und 3D-Bandstrukturrechnungen verglichen:

- Transmissionsmessungen in Γ -A-Richtung,
- Einbau einer Defektschicht in den 3D-photonischen Kristall und Bestimmung der Güte und Finesse einer Defektresonanz,
- Transmissionsmessungen in relativ zu Γ -A geneigten Einfallrichtungen.

Transmissionmessungen in Γ -A-Richtung zeigten eine sehr gute Übereinstimmung mit Bandstrukturrechnungen. Durch Auswertung der Fabry-Perot-Resonanzen, die in den Transmissionskurven des endlichen photonischen Kristalls auftraten, konnten die Gruppengeschwindigkeiten bestimmt werden, die ebenfalls hervorragend mit der Bandstruktur übereinstimmen.

Durch Einbau einer Defektschicht konnten quantitative Werte für die Reflexion über die Finesse gewonnen werden. Eine Serie von 3D-photonischen Kristallen ergab eine Abschwächung von 4 bis 4,5 dB/Modulationsperiode. Dies entspricht bei einem Defekt, der mit sieben Modulationen umgeben ist, einer experimentell bestimmten Güte (Q-Faktor) von 140. Bei der Auswertung wurde im speziellen die Frequenzabhängigkeit des Phasensprunges bei Interferenztotalreflexion an einem photonischen Kristall berücksichtigt und angepaßte Formeln für die Finesse und den Q-Faktor erarbeitet.

Polarisationsabhängige Transmissionsmessungen für unterschiedliche Einfallswinkel erlaubten, die Bandstruktur in geneigten Richtungen abweichend von Γ -A zu bestimmen. Dabei konnten in guter Übereinstimmung mit der Theorie eine polarisationsunabhängige, omnidirektionale Totalreflexion gemessen werden. Die spektrale Breite des omnidirektionalen Totalreflexionsbereichs beträgt $\frac{\Delta\omega}{\omega} = 4,4\%$.

Eine vollständige 3D-photonische Bandlücke ist mit dem hier diskutierten orthorhombischen Gitter mit zweifacher Basis theoretisch nicht erreichbar. Zwar läßt sich die Bandlücke entlang der Porenachse durch geeignete Wahl der Modulationsperiode mit einer Bandlücke in der xy-Ebene zur Überlappung bringen, doch wird dieser Spektralbereich für andere "schräge" Richtungen von Bändern durchkreuzt. Daher bildet sich in diesem Spektralbereich keine vollständige Bandlücke aus, sondern es ergibt sich nur eine 50%-ige Reduzierung der photonischen Zustandsdichte.

Allerdings lassen sich durch Veränderung der 2D-Periodizität der Porenanordnung auch andere 3D-Kristallstrukturen herstellen. Tetragonale oder orthorhombische Gitter mit einfacher Basis sind möglich. Für diese Gitter würde es nicht zu einer weiteren Symmetriereduktion aufgrund der quadratischen Porenquerschnitte kommen. Die Untersuchung der photonischen Bandstruktur dieser 3D-photonischen Kristalle ist daher eine Aufgabe für die Zukunft. Als großes Ziel bleibt die effiziente Herstellung eines perfekten, ausgedehnten 3D-photonischen Kristalls mit vollständiger 3D-photonischer Bandlücke im nahen Infrarot bestehen.

A : Rekombination freier Ladungsträger in Silizium

Im folgenden soll durch eine Rechnung abgeschätzt werden, inwieweit sich die Lebensdauer von generierten freien Ladungsträgern in Silizium verkürzen läßt. Dabei wird eine makroporöse Siliziumstruktur betrachtet und als mögliche Rekombinationsprozesse die Rekombination an Fremdatomen (z.B. eingebrachte Goldatome) oder an der Oberfläche angenommen. Um abzuschätzen, welcher der beiden Effekte überwiegt, wird die zweidimensionale Diffusion der elektronischen Löcher im Silizium betrachtet. Zu Beginn ($t=0$) ist die Konzentration der Löcher c_h im Inneren des Siliziums überall konstant c_h^0 . Es wird davon ausgegangen, daß die Oberflächenrekombinationsgeschwindigkeit an der Grenzfläche Si/Luft der Poren so hoch ist, daß die Konzentration der Löcher c_h an der Grenzfläche verschwindet. Die Rekombinationsrate innerhalb des Siliziums wird mit $1/\tau_{in}$ angesetzt. Weiterhin wird eine stark vereinfachte Geometrie angenommen. Die Randbedingung $c_h=0$ gilt danach auf einem Kreis mit dem Radius R_0 , dessen Mittelpunkt im Zentrum zwischen drei benachbarten Poren liegt [Abb. A.1].

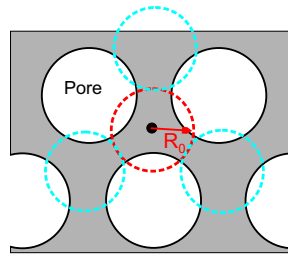


Abbildung A.1: Definition des Kreises mit dem Radius R_0 (rot), auf dem die Randbedingung $c_h=0$ gilt. Nachbarkreise sind blau gekennzeichnet.

Da dieser Kreismittelpunkt am weitesten von allen umliegenden Porenoberflächen entfernt ist, nimmt die Konzentration der elektronischen Löcher in allen anderen Bereichen der Porenwände schneller ab als in diesem Punkt. Die für diesen Mittelpunkt ausgerechnete Konzentration der Löcher zum Zeitpunkt t stellt demnach eine obere Schranke für die gesamte Plasmadichte im photonischen Kristall dar.

Unter diesen Voraussetzungen muß die Kontinuitätsgleichung im Inneren eines Kreiszyinders gelöst werden:

$$\frac{\partial c_h}{\partial t} = -\frac{c_h}{\tau_{in}} + D\Delta c_h. \quad (\text{A.1})$$

Die Konzentrationsänderung ist demnach gleich der Rekombination im Innern des Siliziums $-\frac{c_h}{\tau_{in}}$ plus der Diffusion $D\Delta c_h$. D bezeichnet dabei den Diffusionskoeffizienten der Löcher in n-typ Silizium mit einer Dotierungskonzentration von 10^{17} cm^{-3} . Da man von einem unendlich langen Zylinder ausgeht und die Randbedingung $c_h=0$ auf der gesamten Mantelfläche des Zylinders gleichermaßen gilt, handelt es sich um ein radialsymmetrisches Problem. Es kann durch Umschreiben von (A.1) in Zylinderkoordinaten gelöst werden:

$$\frac{\partial c_h}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c_h}{\partial r^2} + D \frac{1}{r} \frac{\partial c_h}{\partial r} - \frac{c_h}{\tau_{in}}. \quad (\text{A.2})$$

Durch die radiale Symmetrie des Problems hängt c_h nicht von φ und z , sondern nur vom Radius r ab. Die Gleichung (A.2) ähnelt sehr der Wärmeleitungsgleichung, mit der die Abkühlung eines homogenen

unendlich langen Zylinders beschrieben wird. Dieses Problem wurde in [73] bereits gelöst, so daß hier der dort beschriebene Weg ebenfalls verfolgt wird.

Zuerst werden über die Separation der Variablen zwei unabhängige gewöhnliche Differentialgleichungen für r und t aus der partiellen Differentialgleichung (A.2) gewonnen. Mit

$$c_h = \Theta(r) \cdot T(t) \quad (\text{A.3})$$

ergibt sich

$$D \frac{\Theta''}{\Theta} + D \frac{1}{r} \frac{\Theta'}{\Theta} - \frac{1}{\tau_{in}} = -\frac{1}{\tau_{tot}} \quad (\text{A.4})$$

und

$$\frac{T'}{T} = -\frac{1}{\tau_{tot}}. \quad (\text{A.5})$$

Die Lösung von Gleichung (A.5)

$$T = e^{-\frac{t}{\tau_{tot}}} \quad (\text{A.6})$$

ergibt das zeitabhängige Abklingen der Konzentration c_h der elektronischen Löcher. Die Abklingrate $\frac{1}{\tau_{tot}}$ ist dabei noch unbestimmt.

Mit $\frac{1}{\tau_{diff}} = \frac{1}{\tau_{tot}} - \frac{1}{\tau_{in}}$ und einer Koordinatentransformation $r = \sqrt{D\tau_{diff}} \cdot \tilde{r}$ folgt aus (A.4):

$$\tilde{\Theta}''(\tilde{r}) + \frac{1}{\tilde{r}} \tilde{\Theta}'(\tilde{r}) + \tilde{\Theta}(\tilde{r}) = 0 \quad (\text{A.7})$$

Gleichung (A.7) stimmt mit der Differentialgleichung für die Zylinderfunktionen $J(x)$,

$$J''(x) + \frac{1}{x} J'(x) + \left(1 - \frac{k^2}{x^2}\right) J(x) = 0, \quad (\text{A.8})$$

für $k=0$ überein. Als allgemeine Lösung für (A.7) ergibt sich daher:

$$\tilde{\Theta}(\tilde{r}) = AJ_0(\tilde{r}) + BN_0(\tilde{r}) \quad (\text{A.9})$$

Dabei bezeichnen $J_0(\tilde{r})$ und $N_0(\tilde{r})$ die Besselfunktion bzw. die Neumannfunktion für $k=0$. Die Koeffizienten A und B müssen nun aus den Anfangs- und Randbedingungen bestimmt werden.

1. Für $\tilde{r} \rightarrow 0$ weisen Bessel- und Neumannfunktion unterschiedliches Verhalten auf. Es gilt:

$$\lim_{\tilde{r} \rightarrow 0} J_0(\tilde{r}) = 1 \quad \lim_{\tilde{r} \rightarrow 0} N_0(\tilde{r}) = \infty. \quad (\text{A.10})$$

Da die Konzentration der Löcher überall endlich sein muß, folgt daraus $B=0$.

2. Aus der Randbedingung $c_{h(R_0)}=0$ folgt, daß die Funktion $\tilde{\Theta}(\tilde{r})$ für $\tilde{R}_0 = \frac{1}{\sqrt{D\tau_{diff}}} R_0$ eine Nullstelle haben muß:

$$\tilde{\Theta}(\tilde{R}_0) = J_0(\tilde{R}_0) = J_0(\mu_m) = 0. \quad (\text{A.11})$$

Die Besselfunktion J_0 besitzt mehrere Nullstellen μ_m , wobei m die Ordnung der Nullstelle beschreibt. Es gilt:

$$\mu_m = \tilde{R}_0^m = \frac{1}{\sqrt{D\tau_{diff}^m}} R_0. \quad (\text{A.12})$$

Aus der Randbedingung kann daher noch kein eindeutiges τ_{diff}^m abgeleitet werden. An der Lösung sind daher alle Funktionen $J_0\left(\frac{1}{\sqrt{D\tau_{diff}^m}} r\right)$ beteiligt. Sie ergibt sich damit zu:

$$c_h(r,t) = \sum_{m=1}^{\infty} c_h^0 e^{-t\left(\frac{1}{\tau_{in}} + \frac{1}{\tau_{diff}^m}\right)} \cdot J_0\left(\frac{1}{\sqrt{D\tau_{diff}^m}} r\right) \cdot A_m \quad (\text{A.13})$$

3. Um die Koeffizienten A_m zu bestimmen, die festlegen, mit welchem Gewicht die einzelnen Funktionen $J_0\left(\frac{1}{\sqrt{D\tau_{\text{diff}}^m}}r\right)$ an der Gesamtlösung (A.13) beteiligt sind, muß noch die Anfangsbedingung

$$c_h(r, t = 0) = c_h^0 \quad (\text{A.14})$$

herangezogen werden. Dazu wird die Orthogonalitätseigenschaft

$$\int_0^{R_0} r J_\nu\left(\frac{1}{\sqrt{D\tau_{\text{diff}}^m}}r\right) J_\nu\left(\frac{1}{\sqrt{D\tau_{\text{diff}}^n}}r\right) dr = 0 \quad (\text{A.15})$$

der Besselfunktionen benutzt. Multipliziert man beide Seiten von (A.14) mit $rJ_0\left(\frac{1}{\sqrt{D\tau_{\text{diff}}^s}}r\right)$, setzt (A.13) ein und integriert über das Intervall $[0;R_0]$, so ergibt sich unter Berücksichtigung der Orthogonalitätsrelation (A.15)

$$A_s = \frac{\int_0^{R_0} r J_0\left(\frac{1}{\sqrt{D\tau_{\text{diff}}^s}}r\right) dr}{\int_0^{R_0} r J_0^2\left(\frac{1}{\sqrt{D\tau_{\text{diff}}^s}}r\right) dr}. \quad (\text{A.16})$$

Benutzt man weiterhin die speziellen Eigenschaften

$$xJ_0(x) = [xJ_1(x)]' \quad (\text{A.17})$$

und [74]

$$\int_0^{R_0} r J_0^2\left(\frac{1}{\sqrt{D\tau_{\text{diff}}^s}}r\right) dr = \int_0^{R_0} r J_0^2\left(\mu_m \frac{r}{R_0}\right) dr = \frac{R_0^2}{2} [J_1(\mu_m)]^2 \quad (\text{A.18})$$

der Besselfunktion, um die Integrale aufzulösen, so können die Koeffizienten A_s folgendermaßen angegeben werden:

$$A_s = \frac{R_0 J_1\left(\frac{1}{\sqrt{D\tau_{\text{diff}}^s}}R_0\right) \sqrt{D\tau_{\text{diff}}^s}}{\frac{R_0^2}{2} J_1^2\left(\frac{1}{\sqrt{D\tau_{\text{diff}}^s}}R_0\right)} = \frac{2}{\mu_m J_1(\mu_m)} \quad (\text{A.19})$$

Mit (A.13) lautet die Lösung der partiellen Differentialgleichung daher

$$c_h(r, t) = \sum_{m=1}^{\infty} c_h^0 e^{-t\left(\frac{1}{\tau_{\text{in}}} + \frac{D\mu_m^2}{R_0^2}\right)} \frac{J_0\left(\frac{\mu_m r}{R_0}\right)}{\mu_m J_1(\mu_m)}. \quad (\text{A.20})$$

Betrachtet man die Änderung der Konzentration der Löcher für $r=0$, so folgt mit (A.10)

$$c_h(r = 0, t) = \sum_{m=1}^{\infty} c_h^0 \frac{e^{-\frac{t}{\tau_{\text{tot}}}}}{\mu_m J_1(\mu_m)} \quad (\text{A.21})$$

und

$$\frac{1}{\tau_{\text{tot}}^m} = \frac{1}{\tau_{\text{in}}} + \frac{D\mu_m^2}{R_0^2} \quad (\text{A.22})$$

Das Produkt $\mu_m J_1(\mu_m)$ wächst mit höherer Ordnung m der Nullstelle nur langsam an, wie aus Tab. A.1 zu ersehen ist. Das Verhalten von $\mu_m J_1(\mu_m)$ führt daher nicht zur Konvergenz der Reihe. Der

m	1	2	3	4
μ_m	2,405	5,520	8,654	11,792
$J_1(\mu_m)$	0,519	0,340	0,272	0,233
$\mu_m J_1(\mu_m)$	1,2483	1,879	2,349	2,742

Tabelle A.1: Nullstelle μ_m für die Besselfunktion J_0 , Wert der Besselfunktion J_1 an der Stelle μ_m und Produkt $\mu_m J_1(\mu_m)$ für die ersten 4 Nullstellen ($m=1\dots 4$) [73].

Exponentialfaktor $e^{-\frac{t}{\tau_{\text{tot}}^m}}$ fällt dagegen rasch mit höherer Ordnung der Nullstelle ab. Betrachtet man diesen Faktor für die erste und zweite Nullstelle μ_1 bzw. μ_2 , so ergibt sich:

$$\frac{e^{-\frac{t}{\tau_{\text{tot}}^2}}}{e^{-\frac{t}{\tau_{\text{tot}}^1}}} = e^{-tD \frac{(\mu_2^2 - \mu_1^2)}{R_0^2}} = e^{-24,69 \frac{tD}{R_0^2}}. \quad (\text{A.23})$$

Für Zeiten $t > 0,081 \frac{R_0^2}{D}$ ist der Anteil des zweiten Summanden unter das $\frac{1}{e^2}$ -fache des ersten Summanden in (A.21) abgesunken. Damit sind der zweite Summand und auch alle nachfolgenden Reihenglieder vernachlässigbar. Die Lösung (A.21) kann daher in guter Näherung allein durch den ersten Summanden repräsentiert werden:

$$c_h(r=0, t) = 0,801 c_h^0 e^{-\frac{t}{\tau_{\text{tot}}^1}} \quad (\text{A.24})$$

Damit wird die Abklingrate der Löcherkonzentration für $r=0$ durch

$$\frac{1}{\tau_{\text{tot}}^1} = \frac{1}{\tau_{\text{in}}} + \frac{D\mu_1^2}{R_0^2} \quad (\text{A.25})$$

bestimmt.

Bei Wafern mit der Dotierung im Bereich von 10^{-17}cm^{-3} beträgt die Beweglichkeit der Löcher nach [75] $\mu_h = 450 \frac{\text{cm}^2}{\text{V}}$. Über die Einsteinbeziehung $D = \mu_h \frac{kT}{e}$ ergibt sich damit ein Diffusionskoeffizient von $D = 11,4 \frac{\text{cm}^2}{\text{s}}$ bei Raumtemperatur. Der Radius R_0 kann so gewählt werden, daß sich die Kreise von benachbarten Zwischenbereichen wie in Abb. A.1 gerade berühren. Dann gilt $R_0 = 0,289 a$, wobei $a = 500 \text{nm}$ für die Probe im Experiment betrug, so daß $R_0 = 144,5 \text{nm}$ ist. Mit diesen Werten errechnet sich der Beitrag der Oberflächenrekombination und der damit verbundenen Abdiffusion der freien Ladungsträger zu den Oberflächen zu $\frac{1}{\tau_{\text{diff}}} = 9,1 \cdot 10^{10} \text{s}^{-1}$. Das entspricht einer Lebensdauer $\tau_{\text{diff}} = 10,1 \text{ps}$. Verglichen mit einer Lebensdauer von $\tau_{\text{in}} = 200 \text{ps}$, die durch Einbringung von Goldatomen mit einer Konzentration von 10^{17}cm^{-3} erreicht werden kann [76], läßt sich durch eine Oberflächenrekombination die Lebensdauer noch um mehr als eine Größenordnung verringern.

B : Polarisationsabhängige effektive Brechungsindizes

Neben der Herleitung des effektiven Brechungsindex aus der Bandstruktur unter der Bedingung $\omega \rightarrow 0$, gibt es auch die Möglichkeit, ihn aus Überlegungen der Elektrostatik abzuleiten [77]. Das soll im folgenden mit Hilfe der Wiener-Formeln [78] getrennt für beide Polarisierungen versucht werden.

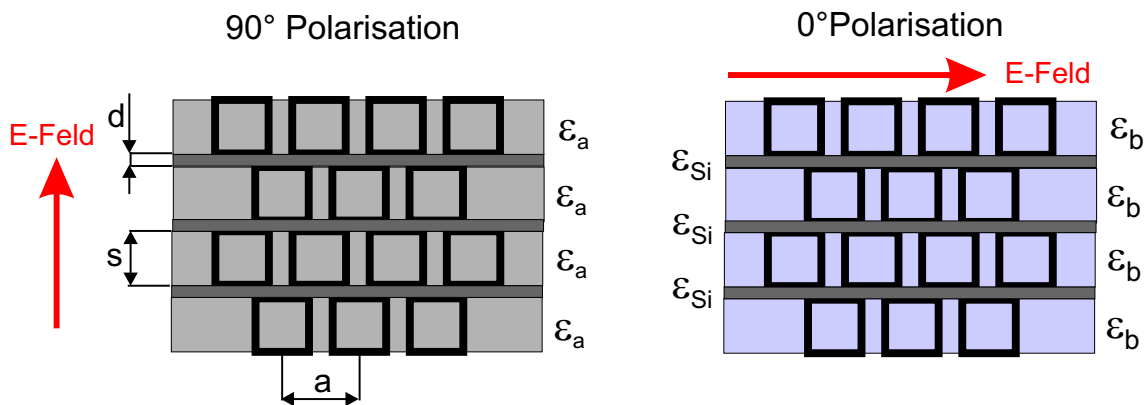


Abbildung B.1: Zur Berechnung des effektiven Brechungsindex in Abhängigkeit von der Lage des E-Vektors der Lichtwelle. Die Struktur wird in Lamellen unterteilt. Die schmalen, dunkelgrau gekennzeichneten Lamellen entsprechen Gebieten mit ϵ_{Si} , die hellgrauen bzw. blauen Lamellen gehen mit einer effektiven Dielektrizitätskonstante ϵ_a bzw. ϵ_b in das Modell ein.

Nach Abb. B.1 kann die Struktur in Lamellen zerlegt werden, wobei die schmalen Lamellen (dunkle schmale Streifen in Abb. B.1) aus massivem Silizium bestehen, während die breiten Lamellen (hellgrau bzw. blaue Streifen in Abb. B.1) die quadratischen Poren enthalten. Die Periodizität in z-Richtung infolge der Modulation wird vernachlässigt. Die Dielektrizitätskonstante der schmalen Lamellen ist daher gleich ϵ_{Si} , während die breiten Lamellen eine eigene effektive Dielektrizitätskonstante ϵ_a bzw. ϵ_b besitzen. Die effektive Dielektrizitätskonstante für die 90° Polarisation ergibt sich mit der Wiener Formel, bei der das E-Feld senkrecht zu den Schichtebenen steht

$$\frac{1}{\epsilon^{90}} = \frac{d}{s+d} \frac{1}{\epsilon_{Si}} + \frac{s}{s+d} \frac{1}{\epsilon_a}. \quad (\text{B.1})$$

Die Abstände a , d und s sind in Abb. B.1 definiert. Für die 0° Polarisation gilt unter Verwendung der Wiener Formel, bei der das E-Feld parallel zu den Schichtebenen verläuft

$$\epsilon^0 = \frac{d}{s+d} \epsilon_{Si} + \frac{s}{s+d} \epsilon_b. \quad (\text{B.2})$$

Diese Formeln gelten für $d > 0$. Überlappen die Quadrate, so gibt es keine durchgängigen massiven Silizium-Lamellen mehr, und andere Formeln müssen entwickelt werden.

Die Dielektrizitätskonstanten ϵ_a und ϵ_b werden ebenfalls unter Verwendung der Wiener Formeln berechnet:

$$\epsilon_a = \frac{s}{a} \epsilon_{\text{Luft}} + \frac{a-s}{a} \epsilon_{Si}, \quad (\text{B.3})$$

$$\frac{1}{\epsilon_b} = \frac{s}{a\epsilon_{\text{Luft}}} + \frac{a-s}{a\epsilon_{Si}} \quad (\text{B.4})$$

Werden diese Beziehungen in (B.1) und (B.2) eingesetzt, so ergibt sich :

$$\epsilon^{90} = \frac{(s+d)\left[\frac{s}{a}\epsilon_{\text{Luft}} + \frac{a-s}{a}\epsilon_{Si}\right]\epsilon_{Si}}{s\epsilon_{Si} + d\left[\frac{s}{a}\epsilon_{\text{Luft}} + \frac{a-s}{a}\epsilon_{Si}\right]} \quad (\text{B.5})$$

$$\epsilon^0 = \frac{sa\epsilon_{\text{Luft}}\epsilon_{Si}}{(s+d)[s\epsilon_{Si} + (a-s)\epsilon_{\text{Luft}}]} + \frac{d}{s+d}\epsilon_{Si}. \quad (\text{B.6})$$

Für $\epsilon_{\text{Luft}} = 1$ und $d = \frac{\sqrt{3}}{2}a - s$ resultiert daraus:

$$\epsilon^{90} = \frac{\frac{\sqrt{3}}{2}\left[\frac{s}{a} + \left(1 - \frac{s}{a}\right)\epsilon_{Si}\right]\epsilon_{Si}}{\frac{s}{a}\epsilon_{Si} + \left(\frac{\sqrt{3}}{2} - \frac{s}{a}\right)\left[\frac{s}{a} + \left(1 - \frac{s}{a}\right)\epsilon_{Si}\right]} \quad (\text{B.7})$$

$$\epsilon^0 = \frac{\frac{s}{a}\epsilon_{Si}}{\frac{\sqrt{3}}{2}\left[\frac{s}{a}\epsilon_{Si} + 1 - \frac{s}{a}\right]} + \left(1 - \frac{2s}{\sqrt{3}a}\right)\epsilon_{Si}. \quad (\text{B.8})$$

Für $\epsilon_{Si}=11,7$ sind die beiden effektiven Dielektrizitätskonstanten ϵ^0 und ϵ^{90} in Abb. B.2 in Abhängigkeit von s/a dargestellt.

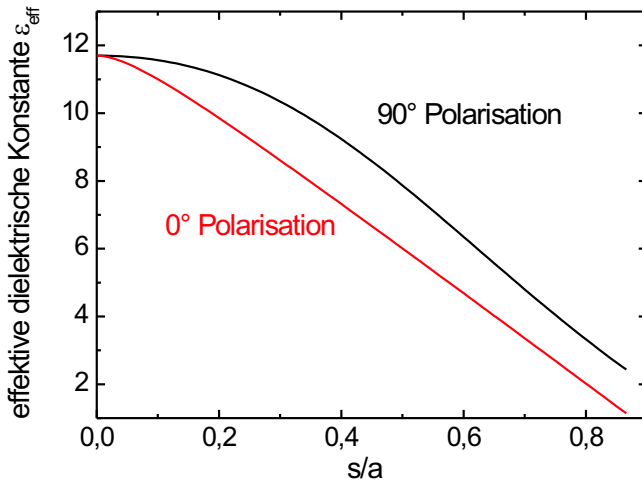


Abbildung B.2: Effektive Dielektrizitätskonstante für die Polarisationen 0° und 90° in Abhängigkeit von dem Verhältnis der Seitenlänge der Quadrate s zur 2D-Gitterkonstante a ($\frac{s}{a}$).

Die Kurven sind in einem Bereich $0 < \frac{s}{a} < 0,86$ gezeichnet, da nur in diesem Bereich die Formeln gelten. Für größere $\frac{s}{a}$ kommt es zur Überlappung der Quadrate. Wie zu sehen ist, ergeben sich für die 90° Polarisation und die 0° Polarisation unterschiedliche effektive Dielektrizitätskonstanten. Außerdem liegt die Dielektrizitätskonstante für die 90° Polarisation immer über der der 0° Polarisation. Damit ist auch der effektive Brechungsindex für die 90° Polarisation höher als für die 0° Polarisation. Diese Tendenz stimmt mit den Ergebnissen aus der Bandstrukturrechnung für $\omega \rightarrow 0$ überein [Abb. 6.26] und erklärt den Ursprung der Formdoppelbrechung näher.

Es soll nun getestet werden, ob das Modell auch quantitativ richtig ist. Im langwelligen Spektralbereich $\omega \rightarrow 0$ spürt die in Γ -A-Richtung laufende Lichtwelle die Modulationen nicht mehr, sondern nimmt nur noch eine mittlere Porosität wahr. Mit einer 3D-Porosität von $p_{3D} = 0,631$ der Struktur mit quadratischen Porenquerschnitten aus Abb. 6.25 ist daher ein mittleres Verhältnis $\frac{s}{a}=0,74$ verbunden. Dafür ergibt sich aus Abb. B.2: $\epsilon^0=2,82$ und $\epsilon^{90}=4,2$. Die effektiven Brechungsindizes betragen damit $n_{\text{eff}}^0=1,68$ und $n_{\text{eff}}^{90}=2,05$. Vergleicht man das mit den Werten $n_{\text{eff}2}=1,804$ für Band 2 (0° Polarisation) und $n_{\text{eff}1}=1,898$ für Band 1 (90° Polarisation) aus Abb. 6.26, so sind Unterschiede festzustellen. Die

Differenz der Brechungsindizes $n_{\text{eff}}^{90} - n_{\text{eff}}^0$ ist nach dem statischen Modell größer als $n_{\text{eff}1} - n_{\text{eff}2}$. Das elektrostatische Modell zur Berechnung der effektiven Dielektrizitätskonstanten ist also nicht exakt.

Der Grund dafür liegt darin, daß an den Grenzflächen zwischen den Lamellen noch die genaue mikroskopische Geometrie innerhalb der breiten Lamelle, die die Poren enthält, eine Rolle spielt. Das soll am Beispiel der 0° Polarisation verdeutlicht werden: Gleichung (B.2) liegt die Annahme zugrunde, daß das E-Feld in allen Lamellen den gleichen Betrag hat und überall parallel zur Lamellenebene gerichtet ist. Betrachtet man die Stetigkeitsforderungen für das E- und D-Feld im mikroskopisch exakten Bereich [Abb. B.3], so wird klar, daß diese Annahme nicht stimmen kann.

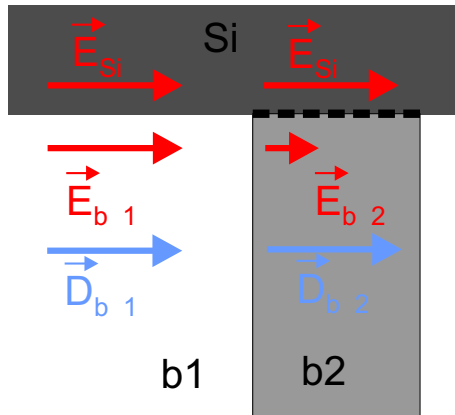


Abbildung B.3: Betrachtung von E- und D-Feldern im mikroskopischen Bereich. Der gezeigte Probenausschnitt entspricht der Ecke einer quadratischen Pore. Region b1 entspricht der Luftpore und gehört damit zur breiten Lamelle aus Abb.B.1. Region b2 stellt die Siliziumtrennwand zwischen zwei benachbarten Poren dar und gehört ebenfalls zur breiten Lamelle. Die Region Si entspricht der schmalen massiven Siliziumlamelle aus Abb.B.1

Für das E-Feld direkt oberhalb und unterhalb der Grenzfläche b1/Si müssen nach den Stetigkeitsforderungen die Tangentialkomponenten von \vec{E}_{Si} und \vec{E}_{b1} übereinstimmen. Verlaufen \vec{E}_{Si} und \vec{E}_{b1} parallel zu den Lamellenebenen, wie es das Modell vorschreibt, muß daher $\vec{E}_{Si} = \vec{E}_{b1}$ gelten. Die Tangentialkomponente entspricht dem gesamten Vektor. Damit trifft \vec{E}_{b1} senkrecht auf die Grenzfläche b1/b2, was einem Übergang des E-Feldes vom Medium Luft in das Medium Silizium entspricht. Dort läuft es als \vec{E}_{b2} in der Region b2 weiter. Für den Betrag von \vec{E}_{b2} gilt aber nun $|\vec{E}_{b2}| = \frac{|\vec{E}_{b1}|}{\epsilon_{Si}}$. Der Grund dafür liegt in der Stetigkeit der Normalkomponente von \vec{D} . Innerhalb der Luftpore galt $\vec{D}_{b1} = \epsilon_0 \vec{E}_{b1}$. Im Silizium des Bereichs b2 gilt nun $\vec{D}_{b2} = \epsilon_0 \epsilon_{Si} \vec{E}_{b2}$. Da die E-Vektoren nach dem Modell alle parallel zur Lamellenebene liegen, gilt dasselbe auch für die D-Vektoren. Die D-Vektoren stehen daher senkrecht auf der Grenzfläche b1/b2 und aufgrund der Stetigkeit der Normalkomponente von \vec{D} gilt $\vec{D}_{b1} = \vec{D}_{b2}$ und damit $|\vec{E}_{b2}| = \frac{|\vec{E}_{b1}|}{\epsilon_{Si}}$. $|\vec{E}_{b2}|$ ist damit kleiner als $|\vec{E}_{b1}|$, was dem Modell bereits widerspricht, bei dem ja implizit angenommen wurde, daß $|\vec{E}|$ überall gleich ist. Es widerspricht außerdem noch den Stetigkeitsforderungen für das E-Feld an der künstlich definierten Grenzfläche Si/b2 zwischen der schmalen Siliziumlamelle und dem Bereich b2 (Sie ist in Abb. B.3 gestrichelt gezeichnet). Wegen $\vec{E}_{Si} = \vec{E}_{b1}$ gilt $|\vec{E}_{b2}| = \frac{|\vec{E}_{Si}|}{\epsilon_{Si}}$, so daß an dieser Grenzfläche 2 unterschiedlich starke Tangentialkomponenten des E-Feldes zusammentreffen würden, was nach den Stetigkeitsforderungen für das E-Feld verboten ist. In Wirklichkeit wird es besonders im Bereich der Quadratecken zu einer Veränderung des Betrages und vor allem der Richtung des E-Feldes kommen, um die Stetigkeitsforderungen zu erfüllen. Der Grund für die quantitative Abweichung des Modells liegt damit in der Unvereinbarkeit mit den mikroskopischen Stetigkeitsforderungen des E- und D-Feldes.

C : Fabry-Perot-Resonanzen

Für einen Fabry-Perot-Resonator, der aus zwei Spiegeln und einem Zwischenraum der Dicke d_{def} und dem Brechungsindex n_{def} besteht, ergibt sich folgende Transmission [79]:

$$T = \frac{(t_1 t_2)^2}{1 + r_1^2 r_2^2 - 2 r_1 r_2 \cos \varphi} \quad (\text{C.1})$$

t_1 und t_2 bezeichnen dabei die Transmissionskoeffizienten durch die beiden Spiegel hindurch. r_1 ist der Reflexionskoeffizient für Reflexionen an der Grenzfläche Defekt/oberer Spiegel und r_2 beschreibt den Reflexionskoeffizienten an der Grenzfläche Defekt/unterer Spiegel. φ stellt die Phasendifferenz zwischen zwei transmittierten Strahlen dar. Sie setzt sich aus den beiden Phasensprüngen δ_1 und δ_2 sowie der Phasendifferenz aufgrund der Weglängendifferenz zusammen. Wird die Ausbreitung in z -Richtung betrachtet, ergibt sich φ zu

$$\varphi = 2\pi \cdot \frac{2d_{\text{def}}}{\lambda_{\text{int}}} + \delta_1 + \delta_2 = 2d_{\text{def}} k_{\text{int}} + \delta_1 + \delta_2 = 2 \frac{d_{\text{def}} n_{\text{def}} \omega}{c} + \delta_1 + \delta_2. \quad (\text{C.2})$$

λ_{int} bezeichnet dabei die interne Wellenlänge und k_{int} die interne Wellenzahl im Material der Defektschicht. Für homogene Materialien hängen sie über $\lambda_{\text{int}} = \frac{\lambda_0}{n_{\text{def}}}$ bzw. $k_{\text{int}} = n_{\text{def}} k_0$ mit der Vakuumwellenlänge λ_0 bzw. der Vakuumwellenzahl k_0 zusammen.

Besitzen die über und unter der Defektschicht liegenden modulierten Porenabschnitte gleich viele Modulationsperioden, so können diese als Braggspiegel aufgefaßten Bereiche als gleich angesehen werden ($r_1 = r_2 = r$, $t_1 = t_2 = t$ und $\delta_1 = \delta_2 = \delta$). Nach [80] kann die Transmission durch den Fabry-Perot-Resonator dann als

$$T = \frac{1}{1 + \left(\frac{2F}{\pi}\right)^2 \sin^2\left(\frac{\varphi}{2}\right)} \quad (\text{C.3})$$

geschrieben werden. Die Reflektivitätskoeffizienten sind dabei in der Finesse F enthalten

$$F = \frac{\pi \sqrt{r}}{(1-r)}. \quad (\text{C.4})$$

Abb. C.1 zeigt ein solches Transmissionsspektrum eines Fabry-Perot-Resonators in Abhängigkeit von φ für eine Finesse von 10, was einem Reflexionskoeffizienten $r=0,73$ entspricht.

Wenn die Phasenverschiebung $\varphi = 2\pi m$ beträgt, wobei m eine ganze Zahl ist, wird die Transmission T maximal und nimmt einen Wert von $T=1$ an (C.3). In diesem Falle interferieren die durch die gesamte Struktur transmittierten Wellen konstruktiv, während die zurückreflektierten Wellen destruktiv interferieren. Setzt man diese Bedingung in (C.2) ein, so ergibt sich für die Frequenzen, bei denen maximale Transmission auftritt

$$\omega_{\text{def}}^m = \frac{(\pi m - \delta)c}{d_{\text{def}} n_{\text{def}}}. \quad (\text{C.5})$$

Diese Frequenzen stellen die Frequenzen der Defektmoden in der photonischen Bandlücke dar. Der Index m gibt die Ordnung der Defektmode an. Der Abstand $\Delta\omega_{\text{def}}$ benachbarter Defektfrequenzen im Frequenzraum beträgt

$$\Delta\omega_{\text{def}} = \frac{\pi c}{d_{\text{def}} n_{\text{def}}}, \quad (\text{C.6})$$

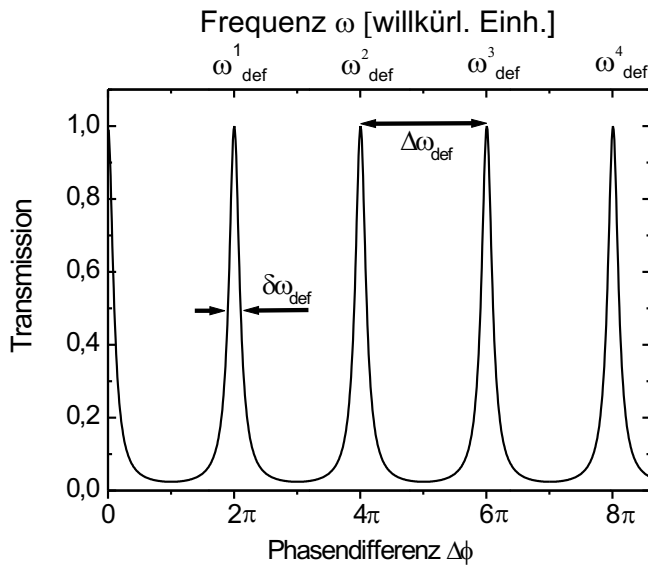


Abbildung C.1: Transmission durch einen Fabry-Perot-Resonator in Abhängigkeit von der Phasendifferenz φ zwischen zwei transmittierten Teilstrahlen und der Lichtfrequenz ω .

und die Differenz der internen Wellenzahlen benachbarter Resonanzen ist:

$$\Delta k_{\text{int}} = \frac{\pi}{d_{\text{def}}}. \quad (\text{C.7})$$

Die spektrale Breite $\delta\omega_{\text{def}}$ eines Resonanzpeaks, die bei der Hälfte der Maximalintensität bestimmt wird, kann zur Bestimmung der Finesse herangezogen werden. Für kleine Phasendifferenzen φ gilt $\sin(\frac{\varphi}{2}) \approx \frac{\varphi}{2}$ und damit:

$$T = \frac{1}{1 + (\frac{2F}{\pi})^2 (\frac{\varphi}{2})^2}. \quad (\text{C.8})$$

Für

$$\varphi_{\pm\frac{1}{2}} = \pm \frac{\pi}{F} \quad (\text{C.9})$$

sinkt die Transmission auf die Hälfte ihres Maximalwertes ab. Mit (C.2) ergibt sich für die Breite der Transmissionspeaks im Frequenzraum:

$$\delta\omega_{\text{def}} = |\varphi_{\pm\frac{1}{2}}| \frac{c}{d_{\text{def}} n_{\text{def}}} \quad (\text{C.10})$$

Dies führt zusammen mit (C.9) zu

$$F = \frac{\pi c}{d_{\text{def}} n_{\text{def}} \delta\omega_{\text{def}}} \quad (\text{C.11})$$

und schließlich mit (C.6) zu

$$F = \frac{\Delta\omega_{\text{def}}}{\delta\omega_{\text{def}}}. \quad (\text{C.12})$$

Da F allein vom Reflexionskoeffizienten abhängt, eröffnet (C.12) die Möglichkeit, den Reflexionskoeffizienten der Braggspiegel aus der Breite $\delta\omega_{\text{def}}$ und dem Abstand der Defektpeaks $\Delta\omega_{\text{def}}$ zu berechnen. Gegenüber der konventionellen Methode der Reflexionsmessung durch Vergleich der Reflektivität der Probe mit der Reflektivität eines hochreflektierenden Referenzspiegels hat die Methode der Fabry-Perot-Interferenzen zwei entscheidende experimentelle Vorteile:

1. Es ist keine Referenzmessung nötig. Fehler bei der Bestimmung der Reflektivität der Probe, die durch eine niedrige Qualität des Referenzspiegels verursacht werden können, werden ausgeschlossen.

2. Die Methode ist besonders für hohe Reflexionskoeffizienten r sehr empfindlich. Es gilt:

$$\frac{\Delta(\delta\omega_{\text{def}})}{\delta\omega_{\text{def}}} = -\frac{1}{2} \frac{1+r}{1-r} \frac{\Delta r}{r}. \quad (\text{C.13})$$

Eine relative Änderung des Reflektivitätskoeffizienten um $\frac{\Delta r}{r}=0,1\%$ bei einem absoluten Reflektivitätskoeffizienten von $r=0,99$ führt zu einer relativen Änderung der Peakbreite von $\frac{\Delta(\delta\omega_{\text{def}})}{\delta\omega_{\text{def}}}=10\%$. Da $\delta\omega_{\text{def}}$ aus einem Transmissionsspektrum exakt abgelesen werden kann, ergibt sich damit eine hohe Genauigkeit bei der Bestimmung hoher Reflektivitätskoeffizienten. Aufgrund dieser Eigenschaft erscheint diese Methode zur genauen Bestimmung der Reflektivitätskoeffizienten der photonischen Kristallbereiche für Frequenzen innerhalb der Bandlücke sehr gut geeignet.

Neben den Transmissionsverlusten durch die Braggspiegel kann Absorption innerhalb des Defekts und Streuung an Rauigkeiten oder Inhomogenitäten zu Verlusten beitragen. Diese Verluste ergeben dann einen effektiven Reflexionskoeffizienten r_{eff} . Damit sinkt die Finesse auf $F = \frac{\pi\sqrt{r_{\text{eff}}}}{(1-r_{\text{eff}})}$

Die Verluste können in Form eines Verlustkoeffizienten α_r zusammengefaßt werden [80]. Für die Verluste während eines vollständigen Umlaufs der Welle im Defekt gilt:

$$r_{\text{eff}}^2 = e^{-2\alpha_r d_{\text{def}}}. \quad (\text{C.14})$$

Für die Finesse ergibt sich damit

$$F = \frac{\pi e^{-\frac{\alpha_r d_{\text{def}}}{2}}}{1 - e^{-\alpha_r d_{\text{def}}}}, \quad (\text{C.15})$$

was für kleine Verluste ($\alpha_r d_{\text{def}} \ll 1$) zu

$$F \approx \frac{\pi}{\alpha_r d_{\text{def}}} \quad (\text{C.16})$$

genähert werden kann.

Neben der meßtechnischen Möglichkeit, die Reflektivitätskoeffizienten in der Bandlücke aus der Breite der Defektresonanz zu berechnen, ist besonders die Lokalisierung des elektrischen Feldes der Defektmode im Bereich der Defektschicht interessant. Dabei kann es zur starken lokalen Erhöhung der Feldstärke innerhalb der Defektschicht kommen. Die Defektschicht wirkt als photonischer Energiespeicher. Der Parameter, der diese Eigenschaft eines Resonators beschreibt, ist der Q-Faktor. Er ist definiert als

$$Q = \omega \frac{\text{gespeicherte Feldenergie}}{\text{Energieverlust pro Sekunde}}. \quad (\text{C.17})$$

Da ($\alpha_r \times$ gespeicherteFeldenergie) den Energieverlust pro Längeneinheit darstellt, ergibt sich mit ($\frac{c}{n_{\text{def}}} \alpha_r \times$ gespeicherteEnergie) der Energieverlust pro Sekunde. Aus C.17 folgt daher unter Berücksichtigung von (C.16)

$$Q = \frac{\omega_{\text{def}} n_{\text{def}}}{c \alpha_r} = \omega_{\text{def}} F \frac{n_{\text{def}} d_{\text{def}}}{c \pi} = \frac{\omega_{\text{def}}}{\Delta\omega_{\text{def}}} F \quad (\text{C.18})$$

und weiter mit (C.12) und (C.6) zu der bekannten Form

$$Q = \frac{\omega_{\text{def}}}{\delta\omega_{\text{def}}}. \quad (\text{C.19})$$

Literaturverzeichnis

- [1] M. von Laue, *Röntgenstrahlinterferenzen*, Akadem. Verl.-Ges. Geest & Portig (1948).
- [2] H. Höche, J. Nieber, Phys. Stat. Sol. (a) **108** (1988) 489.
- [3] E. Yablonovitch, Phys. Rev. Lett. **58** (1987) 2059.
- [4] S. John, Phys. Rev. Lett. **58** (1987) 2486.
- [5] E. Yablonovitch, T. Gmitter, K. Leung, Phys. Rev. Lett. **67** (1991) 2295.
- [6] S. John, M. Florescu, J. Opt. A: Pure Appl. Opt. **3** (2001) S103.
- [7] P. Kramper, A. Birner, M. Agio, C. M. Soukoulis, F. Müller, U. Gösele, J. Mlynek, V. Sandoghdar, Phys. Rev. B **64** (2001) 233 102.
- [8] S. W. Leonard, H. van Driel, A. Birner, U. Gösele, P. Villeneuve, Opt. Lett. **25** (2000) 1550.
- [9] E. Yablonovitch, Sci. Am. **285** (2001) 46.
- [10] V. Lehmann, H. Föll, J. Electrochem. Soc. **137** (1990) 653.
- [11] V. Lehmann, J. Electrochem. Soc. **140** (1993) 2836.
- [12] J. Schilling, R. Wehrspohn, A. Birner, F. Müller, R. Hillebrand, U. Gösele, S. Leonard, J. Mondia, F. Genereux, H. van Driel, P. Kramper, V. Sandoghdar, K. Busch, J. Opt. A: Pore Appl. Opt. **3** (2001) 121.
- [13] U. Grüning, V. Lehmann, S. Ottow, K. Busch, Appl. Phys. Lett. **68** (1996) 747.
- [14] A. Birner, U. Grüning, S. Ottow, A. Schneider, F. Müller, V. Lehmann, H. Föll, U. Gösele, Phys. Stat. Sol. (a) **165** (1998) 111.
- [15] A. Birner, Ph.D. thesis, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg (2000).
- [16] J. Joannopoulos, R. Meade, J. Winn, *Photonic crystals: Molding the flow of light*, Princeton University Press (1995).
- [17] D. Chigrin, A. Lavrinenko, D. A. Yarotsky, S. Gaponenko, J. Lightwave Techn. **17** (1999) 2018.
- [18] R. Meade, K. Brommer, A. Rappe, J. Joannopoulos, Appl. Phys. Lett. **61** (1992) 495.
- [19] C. Jamois, R. Wehrspohn, J. Schilling, F. Müller, R. Hillebrand, W. Hergert, IEEE Quantum Electron. (2002,) im Druck.
- [20] S. Johnson, S. Fan, P. Villeneuve, J. Joannopoulos, Phys. Rev. B **60** (1999) 5751.

- [21] M.Loncar, D. Nedeljkovic, T. Doll, J. Vuckovic, A. Scherer, T. Pearsall, *Appl. Phys. Lett.* **77** (2000) 1937.
- [22] K. Ho, C. Chan, C. Soukoulis, *Phys. Rev. Lett.* **65** (1990) 3152.
- [23] C. Cuisin, Y. Chen, D. Decanini, A. Chelnokov, F. Carcenac, A. Madouri, J.-M. Lourtioz, H. Lau-nois, *J. Vac. Sci. Technol. B* **17** (1999) 3444.
- [24] A. Chelnokov, K. Wang, S. Rowson, P. Garoche, J.-M. Lourtioz, *Appl. Phys. Lett.* **77** (2000) 2943.
- [25] M. Christophersen, J. Carstensen, A. Feuerhake, H. Föll, *Mat. Sci. Eng.* **B 69-70** (2000) 194.
- [26] M. Campbell, D. Sharp, M. Harrison, R. Denning, A. Turberfield, *Nature* **404** (2000) 53.
- [27] K. Ho, C. Chan, C. Soukoulis, M. S. R. Biswas, *Sol. State Commun.* **89** (1994) 413.
- [28] E. Özbay, A. Abeyta, G. Tuttle, M. Tringides, R. Biswas, C. Chan, C. Soukoulis, K. Ho, *Phys. Rev. B* **50** (1994) 1945.
- [29] S. Lin, J. Fleming, D. Hetherington, B. Smith, R. Biswas, K. Ho, M. Sigalas, W. Zubrzycki, S. Kurtz, *J. Bur, Nature* **394** (1998) 251.
- [30] S. Noda, K. Tomoda, N. Yamamoto, A. Chutinan, *Science* **289** (2000) 604.
- [31] S. Lin, J. Fleming, E. Chow, *MRS Bulletin* (Aug. 2001) 627.
- [32] A. Blanco, E. Chomski, S. Grabtchak, M. Ibisate, S. John, S. Leonard, C. Lopez, F. Meseguer, H. Miguez, J. Mondia, G. A. Ozin, O. Toader, H. Driel, *Nature* **405** (2000) 437.
- [33] O. Toader, S. John, *Science* **292** (2001) 1133.
- [34] S. Campbell, H. Lewerenz, *Semiconductor Micromachining*, volume 1, John Wiley & Sons (1982).
- [35] J. Carstensen, R. Prange, G. Popkirov, H. Föll, *Appl. Phys. A* **67** (1998) 459.
- [36] V. Lehmann, *J. Electrochem. Soc.* **143** (1996) 1313.
- [37] V. Lehmann, U. Gösele, *Applied Physics Letters* **58** (1991) 856.
- [38] J.-N. Chazaviel, R. Wehrspohn, F. Ozanam, *Mat. Sci. Eng.* **B69-70**.
- [39] V. Lehmann, S. Rönnebeck, *J. Electrochem. Soc.* **146** (1999) 2968.
- [40] A. Vyatkin, V. Starkov, V. Tzeitlin, H. Presting, J. Konle, U. König, *J. Electrochem. Soc.* **149** (2002) G70.
- [41] X. Zhang, *J. Electrochem. Soc.* **138** (1991) 3750.
- [42] P. Searson, J. Macaulay, F. Ross, *J. Appl. Phys.* **72** (1992) 253.
- [43] J. van den Meerakker, R. Elfrink, F. Roozeboom, J. Verhoeven, *J. Electrochem. Soc.* **147** (2000) 2757.
- [44] V. Lehmann, persönliche Mitteilung .
- [45] K. Sakoda, *Phys. Rev. B* **52** (1995) 7982.
- [46] S. Rowson, A. Chelnokov, C. Cuisin, J.-M. Lourtioz, *J. Opt. A: Pure Appl. Opt.* **1** (1999) 483.

- [47] S. Rowson, A. Chelnokov, C. Cuisin, J.-M. Lourtioz, IEE Proc. Optoelectron. **145** (1998) 403.
- [48] H. Benisty, C. Weisbuch, D. Labilloy, M. Rattier, C. Smith, T. Krauss, R. Delerue, R. Houdre, U. Oesterle, C. Jouanin, D. Cassagne, J. Lightwave Techn. **17** (1999) 2063.
- [49] D. Labilloy, H. Benisty, C. Weisbuch, T. Krauss, R. Delerue, V. Bardinal, R. Houdre, U. Oesterle, D. Cassagne, C. Jouanin, Phys. Rev. Lett. **79** (1997) 4147.
- [50] K. Sakoda, Phys. Rev. B **52** (1995) 8992.
- [51] P. Bell, J. Pendry, L. Moreno, A. Ward, Comput. Phys. Commun. **85** (1995) 306.
- [52] M. M. Sigalas, R. Biswas, K. Ho, C. Soukoulis, Phys. Rev. B **58** (1998) 6791.
- [53] J. Schilling, A. Birner, F. Mueller, R. B. Wehrspohn, R. Hillebrand, U. Goesele, K. Busch, S. John, S. W. Leonard, H. M. van Driel, Opt. Mater. **17** (2001) 7.
- [54] S. W. Leonard, J. Mondia, H. van Driel, O. Toader, S. John, K. Busch, A. Birner, U. Gösele, V. Lehmann, Phys. Rev. B **61** (2000) R2389.
- [55] S. Leonard, Ph.D. thesis, University of Toronto, Dept. of Physics (2001).
- [56] P. Halevi, F. Ramos-Mendieta, Phys. Rev. Lett. **85** (2000) 1875.
- [57] V. Kuzmiak, A. Maradudin, F. Pincemin, Phys. Rev. B **50** (1994) 16 835.
- [58] S. Leonard, persönliche Mitteilung .
- [59] M. Polignano, F. Cazzaniga, A. Sabbadini, G. Queirolo, A. Cacciato, A. D. Bartolo, Mater. Sci. Eng. B **42** (1996) 157.
- [60] S. Ottow, Ph.D. thesis, Christian-Albrechts-Universität Kiel, Technische Fakultät (1996).
- [61] F. Müller, A. Birner, J. Schilling, U. Gösele, C. Kettner, P. Hänggi, Phys. Stat. Sol. (a) **182** (2000) 585.
- [62] J.C.M.Garnett, Philos. Trans. R. Soc. London **203** (1904) 385.
- [63] A. Yariv, *Optical waves in crystals*, John Wiley & Sons (1984).
- [64] J. Schilling, F. Müller, S. Matthias, R. Wehrspohn, U. Gösele, K. Busch, Appl. Phys. Lett. **78** (2001) 1180.
- [65] K. Sakoda, *Optical Properties of Photonic Crystals*, Springer (2001).
- [66] C. Weissmantel, C. Hamann, *Grundlagen der Festkörperphysik*, Dt. Verl. der Wissenschaften (1979).
- [67] L. Landau, E. Lifshitz, L. Pitaevskii, *Electrodynamics of continuous media*, Butterworth-Heinemann (1998).
- [68] M. Born, E. Wolf, *Principles of Optics*, Cambridge University Press (1998).
- [69] B. Batterman, Phys. Rev. B **45** (1992) 12 677.
- [70] A. Yariv, P. Yeh, J. Opt. Soc. Am. **67** (1977) 438.

- [71] S. W. Leonard, H. M. van Driel, J. Schilling, R. Wehrspohn, *Ultrafast all-optical band-edge switching in photonic crystals*, Patentanmeldung.
- [72] A. Feist, A. Lambrecht, J. Schilling, F. Müller, R. Wehrspohn, *Vorrichtung und Verfahren zur qualitativen und quantitativen Bestimmung von Gasen und Flüssigkeiten mit PBG-Struktur*, Patentanmeldung.
- [73] A. Tychonoff, A. Samarski, *Differentialgleichungen der mathematischen Physik*, VEB Deutscher Verlag der Wissenschaften (1959).
- [74] G. Szegö, *Partielle Differentialgleichungen der mathematischen Physik*, B.G. Teubner (1930).
- [75] *Properties of Silicon*, emis Datareviews series No.4, INSPEC (1988).
- [76] S. Sze, *Physics of semiconductor devices*, Wiley (1981).
- [77] A. Kirchner, K. Busch, C. Soukoulis, *Phys. Rev. B* **57** (1998) 277.
- [78] O. Wiener, *Phys. Zeitschrift* **5** (1904) 332.
- [79] E. Hecht, *Optics*, Addison-Wesley (1998).
- [80] B.E.A.Saleh, M.C.Teich, *Fundamentals of Photonics*, John Wiley & Sons, Inc. (1991).

Danksagung

An dieser Stelle bedanke ich mich bei all denen, die zum Gelingen dieser Arbeit in der ein oder anderen Weise beigetragen haben:

Prof. Ulrich Gösele danke ich für die Überlassung des interessanten Themas dieser Arbeit und für die stets freundliche Unterstützung während der letzten 3 Jahre.

Dr. Ralf Wehrspohn bin ich für die direkte intensive Betreuung zu tiefem Dank verpflichtet. Er hatte jederzeit ein offenes Ohr für experimentelle Probleme und gab viele Anregungen zu deren Lösung. Besonders bedanke ich mich dafür, daß er mir während der Phase des Zusammenschreibens meiner Arbeit alle organisatorischen Verpflichtungen abgenommen hat.

Cecile Jamois, Dr. Kurt Busch, Dr. Reinald Hillebrand und Prof. Wolfram Hergert danke ich für die vielen Rechnungen zu Feldverteilungen und Bandstrukturen sowie für hilfreiche Diskussionen zu theoretischen Fragen. Ohne sie wäre ein Vergleich der experimentellen Messungen mit der Theorie nicht möglich gewesen.

Bei Dr. Steve Leonard und Prof. Henry van Driel von der University of Toronto bedanke ich mich für die Durchführung optischen Experimente zur Schaltbarkeit der photonischen Bandlücke.

Dr. Frank Müller danke ich vielmals für die Einweisung und in die IR-Spektroskopie sowie für interessante Diskussionen zu verschiedenen optischen und elektrochemischen Fragestellungen.

Dr. Albert Birner danke ich für die Einführung in das Gebiet des elektrochemischen Ätzens von Silizium und für die Konstruktion der Ätzapparaturen, die ich für die Herstellung meiner Proben so intensiv genutzt habe.

Bei Dr. Volker Lehmann bedanke ich mich für die schnelle Hilfe bei speziellen Fragen zum Makroporenätzen in Silizium.

Sven Matthias und Andreas Herbst danke ich vielmals für die experimentelle Unterstützung im Labor.

Für die sehr gute Arbeitsatmosphäre und die große Hilfsbereitschaft danke ich meinen Kollegen Cecile Jamois, Yun Luo, Johannes Heitmann, Norbert Engler, Paul Miclea, Stefan Richter, Sven Matthias, Kornelius Nielsch und Jinsub Choi.

Schließlich bin ich meinen Eltern zu tiefem Dank verpflichtet, die mich während meiner Studienzeit und während der Doktorarbeit jederzeit nach allen Kräften unterstützt haben.

Eidesstattliche Erklärung

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

Jörg Schilling

Halle (Saale), den 11. Februar 2002

Lebenslauf

PERSÖNLICHE DATEN

Name: Schilling
Vorname: Jörg
Adresse: Carl-Robert-Str. 5, 06114 Halle
Geburtsdatum: 26. September 1973
Geburtsort: Halle

BILDUNGSWEG

Sept.1980-Juli 1990: Polytechnische Oberschule in Halle

Sept.1990-Juni 1992: Südstadt-Gymnasium in Halle

Juni 1992: Abitur

Sept. 1992- Okt. 1993: Zivildienst im Berufsförderungswerk für Blinde und Sehbehinderte in Halle

Okt.1993-Sept. 1996: Physikstudium an der Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg

Okt.1996-März 1997: Physikstudium an der Heriot-Watt-University in Edinburgh (Schottland)
Projearbeit mit dem Thema: „Spectroscopy of II-VI Quantum wells“

Juli 1997-Sept.1997: Werkstudententätigkeit bei Siemens (München)
Thema: „Test und Justierung von Multilayer-Spiegeln und
asymmetrischen Kristallmonochromatoren für Röntgenstrahlen“

April 1997-Februar 1999: Fortsetzung des Physikstudiums an der Martin-Luther-Universität
Halle-Wittenberg

Mai 1998-Februar 1999: Diplomarbeit mit dem Thema: „Reflektometrie von Röntgenstrahlen
an Dünnschichten“

Februar 1999: Diplom in Physik

März 1999-Februar 2002: Doktorarbeit am Max-Planck-Institut für Mikrostrukturphysik in Halle

Jörg Schilling