

Theoretische und experimentelle Beschreibung von Oberflächenzuständen und negativer Brechung in dielektrischen photonischen Kristallen

genehmigte Dissertation

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

Universität Paderborn

Fakultät für Naturwissenschaften

Department Physik

von

Herrn Dipl.-Phys. Andreas von Rhein

Gutachter

Prof. Dr. R.B. Wehrspohn, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg

Prof. Dr. W. Sohler, Universität Paderborn

eingereicht am: 20. Oktober 2006

Tag der mündliche Prüfung: 21. Dezember 2006

Inhaltsverzeichnis

1. Einleitung	5
1.1. Zusammenfassung	5
1.2. Gliederung der Arbeit	6
2. Theoretische Beschreibung photonischer Kristalle	7
2.1. Photonische Kristalle	7
2.2. Einführung in die numerische Simulation von photonischen Kristallen	9
2.2.1. Wellengleichungen	11
2.2.2. Ebene-Wellen-Zerlegung	12
2.2.3. Finite Elemente Methode	16
2.2.4. Vergleich zwischen PWEM & FEM	20
2.2.5. Finite-Difference-Time-Domain-Methode	23
2.2.6. Transfermatrixmethode	31
2.3. Äquifrequenzflächen	35
2.4. Effektiv-Medium-Theorie	37
2.5. Methodenweiterentwicklung	39
2.5.1. OpenFDTD	39
2.5.2. Berechnung von $\epsilon(\omega)$ mit PWEM	45
2.5.3. Äquifrequenzflächen mit PWE	46
2.6. Zusammenfassung	49
3. Oberflächenzustände	51
3.1. Theoretische Beschreibung von Oberflächenzuständen	51
3.1.1. Anti-Reflexion-Layer-Konzept	51
3.1.2. Charakterisierung von Oberflächenzuständen	54
3.1.3. Stufenmodell der ARL	58
3.2. Anwendung auf einen Gassensor	58
3.2.1. Absorption	67
3.2.2. Winkelabhängigkeit, Äquifrequenzflächen am Arbeitspunkt	70
3.2.3. Dispersion des Gassensors	70
3.2.4. 3D-Simulation des Gassensors	73
3.2.5. Experimentelle Ergebnisse	75
3.2.6. Einfluss von Unordnung im PhC auf Propagation von Licht	80
3.2.7. Feststellung der Unordnung	82
3.3. Zusammenfassung	85

4. Negative Brechung	87
4.1. Negative Brechung mit photonischen Kristallen	90
4.1.1. Numerische Simulation der negativen Brechung	91
4.2. Das Negative-Brechungs-Modell	92
4.2.1. Diskussion	94
4.3. Experimentelle Verifikation der negativen Brechung im Mikrowellenbereich	96
4.3.1. Nahfeldvermessung	97
4.3.2. Numerische Analyse des negativen Brechungseffektes im Mikrowellenbereich	102
4.3.3. Strahlenoptik	102
4.4. Zusammenfassung	102
5. Zusammenfassung und Ausblick	105
5.1. Zusammenfassung	105
5.2. Ausblick	106
5.3. Weiterführende numerische Methode	107
5.3.1. Streumatrix-Methode	107
5.3.2. Group Velocity Dispersion	109
A. Ergänzende Informationen/ Atlas	113
B. Effektiv-Medium mit PhC und ARL	119
C. EPR-PhC	123
C.1. Anforderungen	124
C.2. Quadrupol-Defekt	125
C.3. Resonanz-Messungen	125
D. Eigene Veröffentlichungen	129
E. Verzeichnisse	131
Literaturverzeichnis	133
Abbildungsverzeichnis	139
F. Erklärung und Danksagung	141
F.1. Eidstattliche Erklärung	141
F.2. Danksagung	142

1. Einleitung

1.1. Zusammenfassung

Diese Arbeit beschäftigt sich mit photonischen Kristallen. Sie werden aus einem Verbund aus Materialien mit einem periodisch-wechselnden Brechungsindex aufgebaut. Sie bestehen meist aus geordneten 2D-Poren oder Kugeln im (sub-)Mikrometerbereich und weisen dadurch eine räumlich modulierte dielektrische Konstante auf. Mit ihnen lassen sich Dispersionsrelationen modellieren, wodurch neue Ansätze für optische Bauteile entstehen. Eine ihrer Grundeigenschaften ist, dass Licht an ihnen komplett reflektiert (Bandlücke) oder sehr langsam hindurchgeleitet (Bandkante) wird. Der Kristall kann auch transparent sein (Bandmitte). In dieser Arbeit werden zweidimensionale photonische Kristalle untersucht. Die hierfür verwendete Herstellungsmethode bietet große Freiheit in der Gestaltung und Realisierung.

Ein Kristall ist in der theoretischen Beschreibung unendlich ausgedehnt. Reale Kristalle haben nun aber Grenzen, an denen man Oberflächenzustände findet. Diese können z.B. bei kurzen photonischen Kristallen (kleiner 10 Gitterkonstanten) miteinander koppeln und erlauben Lichttransmission in der Bandlücke. In dieser Arbeit werden neue Oberflächenmoden verwendet, welche die Transmission an den Bandkanten signifikant erhöhen. Damit wird die Umsetzung eines Gassensorkonzeptes, welches auf niedrigen Gruppengeschwindigkeiten basiert, ermöglicht.

Oberflächenmoden haben ebenso einen hohen Einfluss auf den negativen Brechungsindexeffekt bei photonischen Kristallen. Das aus der Literatur bekannte Erklärungsmodell der negativen Brechung wird reflektiert und ein neues vorgeschlagen, welches die Funktion von nicht koppelnden Bändern hervorhebt. Messungen im Mikrowellenbereich an einem photonischen Kristall mit niedrigem Brechungsindex bestätigen den negativen Brechungsindexeffekt der Simulationen.

Abstract

In this thesis photonic crystals are discussed. They are composed of different materials and form a periodically structured index of refraction. Often, photonic crystals consist of 2D pores or spheres in the (sub-)micrometer range, which give a spatial modulated permittivity. The possibility to design the dispersion relation enables new approaches for optical devices. Light is reflected at band gaps, or propagates very slowly through the crystal close to the band edges. Inside a band the crystal is almost transparent. In this thesis 2D crystals are investigated. They are produced by an established and designable batched process.

1. *Einleitung*

Theoretically, a perfect crystal has no surfaces. But real crystals do have interfaces, where surface states can occur. The opposite surface states can couple in small crystals (with a lattice size smaller than ten periods) and allow transmission inside the band gap. In this thesis, new kinds of surface states are used to enhance the transmission at band edges. A novel gas sensor, based on low group velocities, could therefore be realized.

Surface states have an important influence on the negative refraction index effect of photonic crystals. For negative refraction the well-known model from literature is discussed and an improved model is suggested. The new model is based on non-coupling bands. To complete the negative refraction investigation the scattered light of a low index photonic crystal is simulated and measured in the microwave frequency range.

1.2. **Gliederung der Arbeit**

Die Arbeit teilt sich in zwei Hauptbereiche, eine Einführung in die benutzten Simulationsmethoden und die zu Grunde liegende Theorie der Maxwell'schen Gleichungen in periodischen Medien in Kapitel 2 und der Anwendung auf Oberflächenzustände und negative Brechung in dielektrischen photonischen Kristallen in den Kapiteln 3 und 4. Die Problemstellungen unterteilen sich in verschiedene Unterkapitel. Experimentelle Daten werden an unterschiedlichen Systemen mit der Simulation verglichen und neue Modelle entwickelt. Am Ende jedes Kapitels wird eine Zusammenfassung gegeben. In Kapitel 5 werden alle Ergebnisse abschließend diskutiert und ein Ausblick für weitere Arbeiten gegeben.

Tabellen und Abbildungen sind in amerikanisch-englischer Schreibweise gehalten.

2. Theoretische Beschreibung photonischer Kristalle

Am Anfang dieses Kapitels wird der Begriff der photonischen Kristalle geklärt. Anschließend werden numerische Berechnungsmethoden hergeleitet und beschrieben, welche in dieser Arbeit benutzt werden. Es werden Skizzen der Methoden gezeigt, welche das Verständnis und die Problematik aufzeigen. Die exakte numerische Implementierung ist durchaus komplexer als es sich mit analytischen Formeln beschreiben lässt, weshalb verzichtet wird auf diese einzugehen.

Als Einführung wird der Vergleich zwischen den photonischen Kristallen und der Festkörperphysik gezogen.

2.1. Photonische Kristalle

Im Bereich der Festkörperphysik wird schon lange das Verhalten der Elektronen in Stoffen untersucht. Zur Erinnerung soll hier das Festkörpermodell ohne Anspruch auf Vollständigkeit skizziert werden. Üblicherweise wird das Elektron als quasi freies Teilchen beschrieben, welches durch die regelmäßig angeordneten positiv geladenen Atomrümpfe eine Kraftwirkung erfährt. Die Quantenmechanik gibt Lösungsvorschriften, wie z.B. die Schrödinger-Gleichung, um sich diesem Problem zu nähern. Diese Vorschriften verbieten aber die Betrachtungen eines einzelnen Teilchens. Die Lösungen, welche man aus den Gleichungen erhält, sind Wahrscheinlichkeiten eines großen Teilchenpulses, der quantenmechanischen Gesamtheit. Diese Teilchenpulse werden als Wellen bzw. Wellenpakete beschrieben. Sperrt man Wellen in einen Kasten ein, so gibt es nur bestimmte Eigenfrequenzen, welche für die Welle erlaubt sind. Diese quantisierten Eigenschwingungen werden Moden oder Energieniveaus genannt. Werden viele dieser Kästen zu einem Kristall zusammen geführt, so überlagern sich diese Niveaus. Sie erfahren eine leichte Energieverschiebung gegeneinander und bilden schließlich ein zusammenhängendes Energieband.

In Festkörpern entstehen nun Energiebereiche in denen keine Eigenzustände gefunden werden können. Es existieren somit keine Wellenpakete in diesem Energiebereich im Festkörper. Diese Bereiche werden Bandlücken genannt.

Ein ähnliches Verhalten kann von Photonen in so genannten photonischen Kristallen (PhC, Photonic Crystals) gefunden werden. Die elektromagnetische Welle erfährt hierbei eine „Kraftwirkung“ durch eine räumlich-modulierte dielektrische Konstante ($\epsilon(\mathbf{r})$). Strahlt man mit einem Lichtbündel bestehend nur aus Frequenzen des verbotenen Bereiches auf einen solchen PhC, dann kommt es zur kompletten Reflexion der Energie. Dem Licht wird der Eintritt in den Kristall verboten.

2. Theoretische Beschreibung photonischer Kristalle

Diesen reflektierenden Effekt findet man in der Natur wieder. An einigen Tiere, z.B. die Flügel der Schmetterlinge, Federn des Pfaus oder die Haare der Seemaus, findet man eine photonisch strukturierte Oberfläche. Auch der Halbedelstein Opal erhält seinen Glanz und Farbspiel aufgrund einer periodischen Änderung des Brechungsindex.

Der Mensch kann künstliche PhCs herstellen. Schon alt ist die Züchtung von künstlichen Opalen. Kugeln aus Siliziumdioxid mit Durchmessern im sub-Mikrometerbereich werden über den Sol-Gel-Prozess [1] synthetisiert. Durch den Effekt der Selbstordnung bildet sich nach einer Sedimentation ein kubisch-flächenzentrierter (fcc, face-centered-cubic) Kugelkristall aus (dichteste Kugelpackung). Dieser Selbstordnungsprozess ist keineswegs perfekt. Neben der Vorbedingung, dass die synthetisierten Partikel homogen und monodispers sein müssen, nehmen weitere Parameter einen großen Einfluss auf den Sedimentationseffekt.

Etwas mehr Kontrolle auf die Kristall-Parameter kann bei der Herstellung zweidimensionaler Kristalle genommen werden. Ein etabliertes Verfahren ist die Herstellung von 2D-PhCs aus Silizium mittels photo-elektro-chemischem Ätzen [2, 3]. Üblicherweise wird hierbei ein Festkörper durch ein Lithographieverfahren vorstrukturiert und dann elektrochemisch geätzt. Mit Hilfe der Lithographie ist es so möglich die Geometrie des PhC vorzugeben.

Der eindimensionale (1D) PhC wird in der Technik schon lange eingesetzt. Sogenannte Bragg-Stacks dienen in Laser-Aufbauten als Spiegel. Auch können maßgeschneiderte Frequenzfilter erzeugt werden.

John [4] und Yablonovitch [5] haben das Konzept der PhCs für die Wissenschaft wieder entdeckt. Yablonovitchs Intention war es z.B. bessere Laserspiegel zu bauen. Der klassische Braggspiegel sperrt das Licht nur in einer Dimension ein, wodurch Strahlungsverluste in die verbliebenen Raumrichtungen entstehen. Ein geeigneter 3D-PhC könnte eine minimale Laserschwelle mit sehr hoher Effizienz aufweisen, da er eine hohe Reflexion für alle Raumrichtungen hätte und man die Resonatormoden gut einstellen könnte.

PhCs werden häufig auch als zukünftiger Ersatz der Halbleiter beschrieben. Man kann gezielt Defekte in die Kristallstruktur einbringen, ähnlich der Dotierung eines Halbleiters. Dadurch lassen sich erlaubte Energieniveaus in der Bandlücke konstruieren. Ein geeignet gewählter Liniendefekt dient z.B. als Wellenleiter und ein Punktdefekt als Resonator.

Trotz der vielen Gemeinsamkeiten und Analogien zwischen Halbleitern/Festkörpern und photonischen Kristallen gibt es auch gravierende Unterschiede. Üblicherweise wird der Spin des Elektrons nicht betrachtet, wohingegen die Polarisation des Lichtes einen entscheidenden Faktor darstellt. Außerdem sind Elektronen Fermi-Teilchen und Photonen Bosonen. Elektronen im Halbleiter kann man durch Lichtanregung in ein höheres Band heben, wohingegen dies bei Photonen nicht möglich ist, solange man lineare Optik betreibt.

In den folgenden Abschnitten wird auf verschiedene numerische Simulationsmöglichkeiten elektromagnetischer Strahlung eingegangen. Auch wenn der Begriff *photonische Kristalle* Teilchencharakter suggeriert, so wird doch zum Berechnen der Wellencharakter genutzt.

2.2. Einführung in die numerische Simulation von photonischen Kristallen

In dieser Arbeit werden verschiedene Konzepte zum Berechnen von elektromagnetischer Strahlung benutzt. Die Prinzipien der verschiedenen Methoden werden in den kommenden Abschnitten wiedergegeben. In dieser Arbeit werden keine grundsätzlich neuen Rechenkonzepte entwickelt. Es findet lediglich eine Anpassung von bekannten Konzepten statt. An gegebener Stelle wird auf weiterführende Literatur verwiesen.

Man unterscheidet grundsätzlich zeitabhängige Verfahren (Finite-Difference-Time-Domain, Kapitel 2.2.5) von stationären Verfahren (Ebene-Wellen-Ansatz, Kapitel 2.2.2; Finite-Elemente-Methode, Kapitel 2.2.3; Transfermatrix, Kapitel 2.2.6). Im Kapitel 2.5 werden Erweiterungen und Veränderungen dieser Rechenverfahren entwickelt. Nach der Einführung von periodischen Einheitszellen in diesem Kapitel folgt die Herleitung der Wellengleichungen.

Um den benötigten Rechenaufwand zu begrenzen, klassifiziert man die PhCs. Man stelle sich zuerst einen Verbund von zwei Materialien mit verschiedenen Brechungsindizes vor. Kann eine Regelmäßigkeit in diesem gefunden werden, so liegt es nahe in ihm Kristalleigenschaften zu suchen. Es sollen drei Verbundklassen unterschieden werden. Im ersten Fall wiederholen sich beide Materialien periodisch nur in eine Richtung (1D) und sind sonst konstant. Im zweiten Fall alternieren sie in einer Ebene (2D) (Abbildung <2.1>) und sind in Richtung der dritten Dimension konstant. Im dritten Fall alternieren sie in allen drei Raumrichtungen (3D). Der Materialverbund hat demnach eine Periodizität in 1D, 2D oder 3D.

Ein Kristall wird durch seine Einheitszelle und damit durch seine Translationsvektoren \mathbf{R}_i charakterisiert¹. Die Einheitszelle kann nun entlang dieser Translationsvektoren in beliebiger ganzzahliger Kombination kopiert werden. Für die späteren Berechnungen ist es notwendig den Kristall nicht im Realraum, sondern im reziproken Raum zu betrachten. Um die reziproken Gittervektoren \mathbf{G} aus den Translationsvektoren \mathbf{R} zu bestimmen, benützt man folgende Transformation:

$$\mathbf{G}_1 = 2\pi \frac{\mathbf{R}_2 \times \mathbf{R}_3}{\mathbf{R}_1 \cdot (\mathbf{R}_2 \times \mathbf{R}_3)} \quad (2.1)$$

Die Vektoren \mathbf{G} und \mathbf{R} sollen in kartesischen Koordinaten gegeben sein. Die anderen reziproken Gittervektoren gewinnt man durch zyklische Vertauschung der Indizes. Häufig wird der Faktor 2π auch weggelassen, um die Vektoren abzukürzen. Es gilt dann $\mathbf{R}_i \mathbf{G}_j = \delta_{i,j}$. Abbildung <2.2> soll den Zusammenhang zwischen Realraum, reziprokem Gitter und der Brillouin-Zone verdeutlichen. Als Beispiel wurde das 2D-hexagonale Kristallsystem gewählt, da es hier in der Arbeit häufig verwendet wird. Der Realraum-Kristall hat dabei die gleiche Orientierung wie die Brillouinzone. Die Hochsymmetrierichtung $\Gamma\mathbf{K}$ entspricht im Realraum der Richtung von einem Gitterpunkt zum nächsten. Die $\Gamma\mathbf{M}$ -Richtung liegt zwischen zwei $\Gamma\mathbf{K}$ Vektoren. Siehe hierzu auch Abbildung <2.1>. Ihre Länge ist

¹Fett geschriebene Buchstaben zeigen Vektoren an.

2. Theoretische Beschreibung photonischer Kristalle

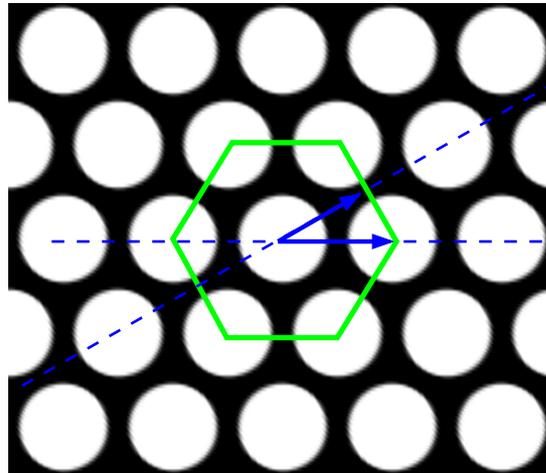


Abbildung 2.1.: Luftlöcher in 2D-hexagonaler Anordnung in einem hochbrechenden Material. Die blauen Pfeile markieren Hochsymmetrierichtungen und die grüne Linie die hexagonale Einheitszelle (nicht die Wigner-Seitz-Zelle). Der Mittelpunkt wird als Γ , die Nächst-Nachbarrichtung als $\Gamma\mathbf{K}$ -Richtung und die Richtung zwischen zwei $\Gamma\mathbf{K}$ als $\Gamma\mathbf{M}$ bezeichnet. Der Winkel zwischen $\Gamma\mathbf{K}$ und $\Gamma\mathbf{M}$ beträgt 30° .

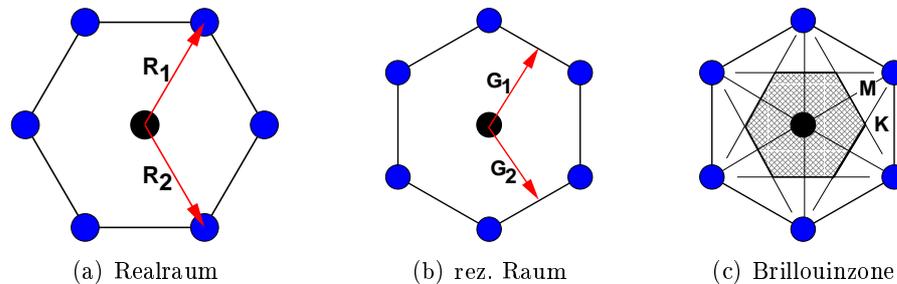


Abbildung 2.2.: Zusammenhang zwischen Realraum und reziprokem Raum eines 2D-hexagonalen Kristalls. Punkte in (a) markieren die Zentren der Einheitszellen. Punkte in (b) markieren die Zentren der reziproken Gitterzellen. Die Brillouinzone (grauschattierter Bereich in (c)) hat die gleiche Ausrichtung wie die Anordnung im Realraum. Die Hochsymmetrierichtungen $\Gamma\mathbf{M}$ und $\Gamma\mathbf{K}$ wurden eingezeichnet.

2.2. Einführung in die numerische Simulation von photonischen Kristallen

$|\mathbf{M}| = \sqrt{1/3} \approx 0,577\frac{1}{a}$ bzw. $|\mathbf{K}| = 2/3 \approx 0,667\frac{1}{a}$, mit a als Gitterabstand (=Nächst-Nachbar-Distanz). Der Faktor 2π wurde weggelassen.

Nachdem nun das Rechengebiet auf eine periodisch angeordnete Einheitszelle reduziert wurde, werden im folgenden Abschnitt die Differentialgleichungen der Maxwell-Relationen zusammengefasst, um die Wellengleichung herzuleiten.

2.2.1. Wellengleichungen

Es gibt zwei Grundgleichungen für photonische Kristalle. Beide können aus den Maxwell-Gleichungen gewonnen werden. In anderen Disziplinen werden sie auch Wellengleichungen genannt.

Um diese herzuleiten geht man von den Maxwell-Gleichungen aus [6]:

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \varrho \quad (2.2)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (2.3)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\dot{\mathbf{B}} \quad (2.4)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = \dot{\mathbf{D}} + \mathbf{j} \quad (2.5)$$

wobei der Punkt über den Vektoren für eine zeitliche Ableitung steht. Es sollen die folgenden Materialverknüpfungen gelten:

$$\mathbf{B} = \mu\mathbf{H} = \mu_0\mu_r\mathbf{H} = \mu_r\mathbf{H} \quad (2.6)$$

$$\mathbf{D} = \epsilon\mathbf{E} = \epsilon_0\epsilon_r\mathbf{E} = \epsilon_r\mathbf{E} \quad (2.7)$$

Hierbei wurde $\mu_0 = \epsilon_0 = 1$ gesetzt. Es soll folglich in den Heavyside-Lorentz-Einheiten gerechnet werden. Somit wird die Lichtgeschwindigkeit zu $c_0 = 1$. Diese Schreibweise gilt ohne Beschränkung der Allgemeinheit. Es dient nur der vereinfachten Handhabung der Gleichungen und erlaubt das Einführen von normalisierten Einheiten. Die Frequenz z.B. wird normiert mit $f = \frac{\omega a}{2\pi c_0} = a/\lambda$ angegeben. Hierbei bedeutet a eine Bezugslänge (Gitterkonstante) und λ die zugehörige Wellenlänge des Lichtes. Simulationsergebnisse können somit relativ einfach z.B. für den Mikrowellen- oder Infrarot-Bereich umgerechnet werden. Desweiteren wird angenommen, dass die Materialkonstanten μ_r und ϵ_r nur Funktionen des Raumes und nicht der Zeit sind. Da meistens dielektrische Kristalle beschrieben werden, darf $\mu_r = 1$ gesetzt werden. Weiterhin werden keine freien Ladungsträgerdichten ($\varrho = 0$) und elektrische Ströme ($\mathbf{j} = 0$) betrachtet. Die Rotationsgleichungen der Maxwell-Relationen vereinfachen sich nun zu:

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\dot{\mathbf{H}} \quad (2.8)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = \epsilon_r \dot{\mathbf{E}} \quad (2.9)$$

2. Theoretische Beschreibung photonischer Kristalle

Eine weitere zeitliche Ableitung der Rotation des elektrischen Feldes führt zu:

$$\nabla \times \dot{\mathbf{E}} = -\ddot{\mathbf{H}} \quad (2.10)$$

$$\frac{1}{\epsilon_r} \nabla \times \mathbf{H} = \dot{\mathbf{E}} \quad (2.11)$$

Wie leicht ersichtlich ist, kann die untere Gleichung in die obere durch Multiplikation von $\nabla \times$ eingesetzt werden:

$$\nabla \times \left(\frac{1}{\epsilon_r} \nabla \times \mathbf{H} \right) = -\ddot{\mathbf{H}} \quad (2.12)$$

Jede beliebige Welle kann aus einer Superposition von zeit-harmonischen Wellen dargestellt werden (lineare Optik). Man entwickelt die Welle $\mathbf{H}(t)$ nach dem Fourier-Basis-System $e^{-i\omega t}$. Mit $\mathbf{H}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{H}(\mathbf{r}) \cdot e^{-i\omega t}$ folgt sofort:

$$\nabla \times \left(\frac{1}{\epsilon_r} \nabla \times \mathbf{H} \right) = \omega^2 \mathbf{H} \quad (2.13)$$

Statt nach dem magnetischen Feld können die Maxwell Gleichungen auch nach dem elektrischen Feld aufgelöst werden. Es folgt unter Anwendung ähnlicher Rechenoperationen:

$$\nabla \times (\nabla \times \mathbf{E}) = \epsilon_r \omega^2 \mathbf{E} \quad (2.14)$$

Beide Gleichungen, (2.13) und (2.14), werden die Hauptgleichungen der Photonik genannt. Möchte man nun Kristalle berechnen, so sind beide Gleichungen Eigenwertprobleme, wobei, unter der Annahme, dass ϵ_r reell ist, nur (2.13) hermitesch ist². Unter der weiteren Einschränkung, dass $\epsilon_r > 0$ ist, folgt, dass die Eigenwerte E von (2.13) selbst positiv sind. Mit der Verknüpfung $E = \omega^2$ folgt auch, dass alle Eigenfrequenzen positiv reell sind. Bei der Anwendung von (2.13) und (2.14) ist Vorsicht geboten, denn es gelten immer noch die Divergenznebenbedingungen der Maxwell-Gleichungen.

Im folgenden Abschnitt wird Gleichung (2.13) verwendet um Eigenwerte des Kristallsystems zu bestimmen.

2.2.2. Ebene-Wellen-Zerlegung

Eine beliebte Methode, um Wellengleichungen, ob nun die Schrödinger- oder die Maxwell-Gleichungen, zu lösen, ist der Ebene-Wellen-Ansatz (Plane-Wave-Expansion-Method = PWEM). Hierbei wird die gesuchte Lösung nach räumlichen Fourierkomponenten zerlegt. Das daraus resultierende Gleichungssystem kann anschließend relativ einfach mit vorgefertigten Matrixalgorithmen gelöst werden. Ein bekanntes Programm zum Berechnen von PhC-Bandstrukturen ist das MIT-Paket³ **mpb** [7]. Seine Popularität beruht sicherlich auch darauf, dass es kostenlos unter Beachtung der GPL-Lizenz erhältlich ist.

Das Rechenproblem wird über die Programmiersprache **Guile**⁴ formuliert. Sie beruht

²Dies kann man durch partielle Integration zeigen.

³http://ab-initio.mit.edu/wiki/index.php/MIT_Phonic_Bands

⁴<http://www.gnu.org/software/guile/guile.html>

2.2. Einführung in die numerische Simulation von photonischen Kristallen

auf der Sprache **Scheme**. Speziell für Kristalle gibt es eine Erweiterung von Guile namens **Libctl**⁵. Auf diese Erweiterung greift auch **OpenFDTD** zurück. Mit dem FDTD-Code, welcher noch genauer in den Kapiteln 2.2.5 und 2.5.1 beschrieben wird, können Transmissions- und Reflexionsdaten gewonnen werden. Es wird also später möglich sein, in ein und derselben Beschreibungssprache Transmissionsverhalten abzuleiten und mit den Bandstrukturrechnungen zu vergleichen.

Bandstrukturen geben eine grundsätzliche Auskunft über die Eigenschaften eines Kristalls. Aus diesem Grunde soll auf die Arbeitsweise von **mpb** eingegangen werden. Es ist ein auf einer Gradienten-Methode basierender Algorithmus zur Lösung der Hauptgleichung (2.13). Es wird die H-Darstellung gewählt, da diese hermitesch ist und durch das positive ϵ_r immer reelle Eigenfrequenzen liefert.

Für periodische Systeme bietet sich der Blochansatz

$$\mathbf{H}_{n,\mathbf{k}_{\text{Bloch}}}(\mathbf{r}) = \mathbf{u}_{n,\mathbf{k}_{\text{Bloch}}}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}_{\text{Bloch}}\mathbf{r}} \quad (2.15)$$

an, wobei \mathbf{u} eine gitterperiodische Funktion ist. Mit \mathbf{R} als einem beliebigen Translationsvektor des Gitters folgt:

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_{n,\mathbf{k}_{\text{Bloch}}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) &= \mathbf{u}_{n,\mathbf{k}_{\text{Bloch}}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) e^{i\mathbf{k}_{\text{Bloch}}(\mathbf{r} + \mathbf{R})} \\ &= \mathbf{u}_{n,\mathbf{k}_{\text{Bloch}}}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}_{\text{Bloch}}\mathbf{r}} e^{i\mathbf{k}_{\text{Bloch}}\mathbf{R}} \\ &= \mathbf{u}_{n,\mathbf{k}_{\text{Bloch}}}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}_{\text{Bloch}}\mathbf{r}} e^{i\phi} \end{aligned} \quad (2.16)$$

Unter einer Translationsverschiebung mit einem Gittervektor \mathbf{R} bleibt die Blochfunktion konstant. Die Feldverteilung wird lediglich um den Phasenfaktor $e^{i\phi}$ korrigiert. Es gibt für einen Blochvektor $\mathbf{k}_{\text{Bloch}}$ mehrere Lösungen n . Die Wellengleichung vereinfacht sich weiter zu:

$$(\nabla + i\mathbf{k}) \times \left(\frac{1}{\epsilon_r} (\nabla + i\mathbf{k}) \times \mathbf{u}_{n,\mathbf{k}} \right) = \omega_{n,\mathbf{k}}^2 \mathbf{u}_{n,\mathbf{k}} \quad (2.17)$$

Zur Übersichtlichkeit wurde $\mathbf{k} = \mathbf{k}_{\text{Bloch}}$ gesetzt. Jede Lösung $\mathbf{u}_{n,\mathbf{k}}$ steht für einen Eigenvektor der Gleichung (2.13) und hat somit eine korrespondierende Eigenfrequenz $\omega_{n,\mathbf{k}}$. Um das Eigenwertproblem im Blochansatz zu lösen, werden die Lösungen $\mathbf{u}_{n,\mathbf{k}}$ im Fourierraum (PWEM) gesucht. Dementsprechend ist:

$$\mathbf{u}_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} \left(a_{n,\mathbf{k},\mathbf{G}} \hat{a}_{\mathbf{G}} + b_{n,\mathbf{k},\mathbf{G}} \hat{b}_{\mathbf{G}} \right) e^{i\mathbf{G}\mathbf{r}} \quad (2.18)$$

Die Aufspaltung in zwei Vektorkomponenten wurde durchgeführt, um durch die Wahl von $\hat{a}_{\mathbf{G}}$ und $\hat{b}_{\mathbf{G}}$ zu gewährleisten, dass die Quellenfreiheit des H-Feldes sichergestellt wird. Diese ist ja eine Nebenbedingung zu (2.13):

$$\nabla \cdot \mathbf{H} = \nabla \cdot \mathbf{u}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} = \sum_{\mathbf{G}} (\mathbf{k} + \mathbf{G}) \cdot \left(a_{n,\mathbf{k},\mathbf{G}} \hat{a}_{\mathbf{G}} + b_{n,\mathbf{k},\mathbf{G}} \hat{b}_{\mathbf{G}} \right) = 0, \quad (2.19)$$

⁵<http://ab-initio.mit.edu/wiki/index.php/Libctl>

2. Theoretische Beschreibung photonischer Kristalle

d.h. die Nebenbedingung der Quellenfreiheit des H-Feldes reduziert sich auf ein Skalarprodukt. Man kann nun $\hat{a}_{\mathbf{G}}$ und $\hat{b}_{\mathbf{G}}$ geschickt so wählen, dass die obige Gleichung für beliebige Gewichtungen $a_{n,\mathbf{k},\mathbf{G}}$ und $b_{n,\mathbf{k},\mathbf{G}}$ erfüllt ist, bevor die eigentliche Eigenwertgleichung berechnet wird. Es muss also

$$(\mathbf{k} + \mathbf{G}) \cdot \hat{a}_{\mathbf{G}} = 0 \quad (2.20)$$

$$(\mathbf{k} + \mathbf{G}) \cdot \hat{b}_{\mathbf{G}} = 0 \quad (2.21)$$

für alle \mathbf{G} gelten. Wird ein 2D-Rechnung durchgeführt, so spiegelt $\hat{a}_{\mathbf{G}}$ oder $\hat{b}_{\mathbf{G}}$ eine Polarisationsrichtung wider. Für eine 3D-Rechnung spannen sie das Rechenggebiet auf. Im nächsten Schritt läge es nahe auch die Materialfunktion $1/\epsilon(\mathbf{r})$ in die Fourierdarstellung zu übertragen. Hierbei kann aber ein Problem auftreten: das Gibbsche Phänomen. Ein scharfkantiger Übergang (z.B. an einer Heavyside-Funktion) kann nur mit unendlich vielen Fourierkomponenten dargestellt werden. Jede Fourierdarstellung mit endlicher Basisgröße führt zu einem Über- und Untersteuern der Funktion. Die Intensität dieses Übersteuerns ist dabei unabhängig von der Fourierbasisgröße. Um dieses Phänomen zu umgehen, wird das Ergebnis des Vektorproduktes $(\mathbf{G} + \mathbf{k}) \times \mathbf{u}_{\mathbf{G}}$ vom Fourierraum mittels einer diskreten Fouriertransformation (DFT) in den Realraum gewandelt. In diesem kann direkt mit dem Inversen der dielektrischen Funktion multipliziert werden. Eine anschließende Rücktransformation (inverse DFT) erlaubt es nun das letzte Vektorprodukt mit $(\mathbf{G} + \mathbf{k})$ durchzuführen. Dieses Verfahren umgeht das Gibbsche Problem unter der Annahme, dass die Lösungen $\mathbf{u}_{n,\mathbf{k}}$ selbst „schön“ sind, d.h. keine Sprünge aufweisen. Durch die schnelle Fouriertransformation (FFT) sind keine Geschwindigkeitsprobleme beim häufigen Hin- und Rücktransformieren zu befürchten.

2D-Bandstrukturen

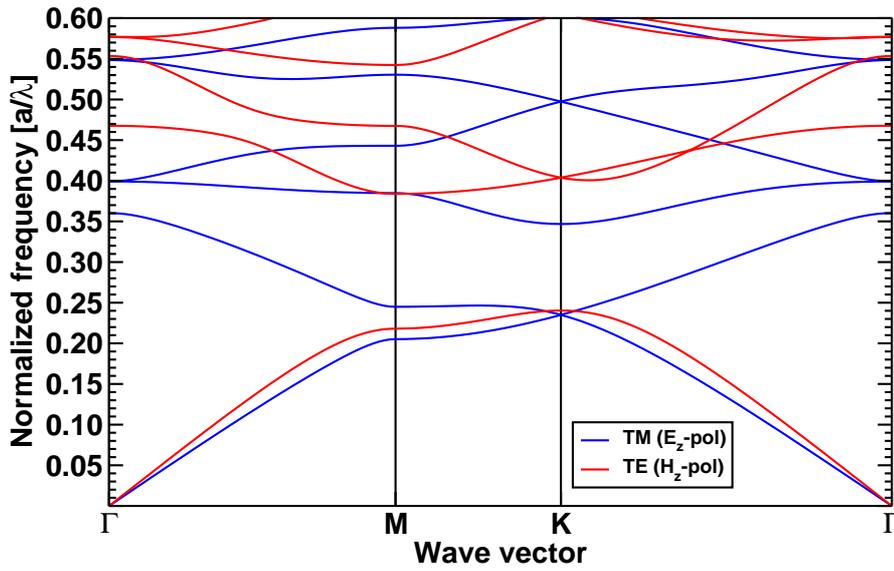
Die Abbildungen <2.3>(a)(b) wurde mit Hilfe der PWE-Methode berechnet. Es ist die Bandstruktur eines 2D-hexagonalen-Kristalls bestehend aus Luftlöchern im hochbrechenden Material ($\epsilon = 11,6$) zu sehen. Um diese zu erhalten, setzt man in Gleichung (2.17) den Blochvektor \mathbf{k} ein, ermittelt mit der PWE-Methode die zugehörigen Eigenwerte, und springt anschließend zum nächsten \mathbf{k} -Vektor. Wird ein \mathbf{k} -Pfad entlang der irreduziblen Brillouinzone gewählt, so erhält man die Bandstruktur.

Im 2D-Fall gibt es eine Aufspaltung der Bänder in zwei Polarisierungen. Dabei wird folgende Notation verwendet:

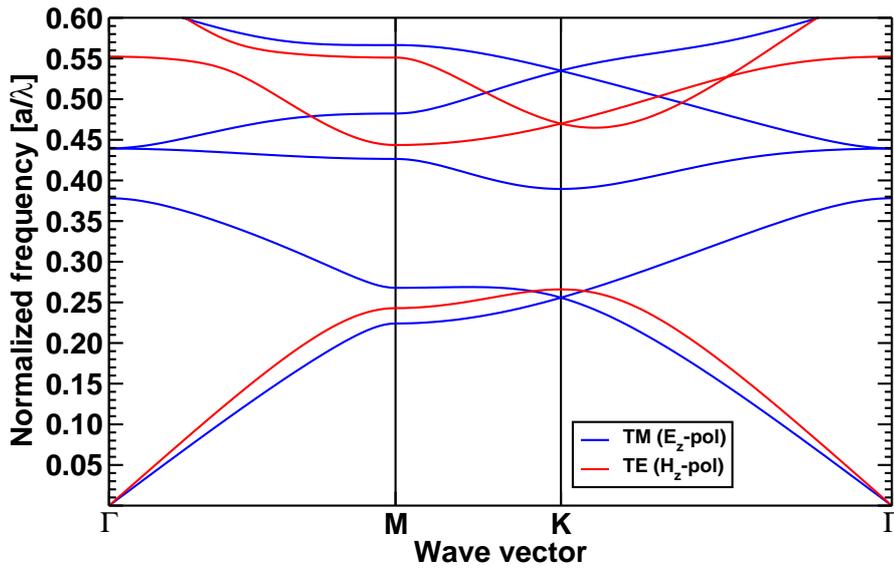
- TM: E_z parallel zu der Porenachse, H_x, H_y in der Ebene senkrecht zur Porenachse
- TE: H_z parallel zu der Porenachse, E_x, E_y in der Ebene senkrecht zur Porenachse

Für die TE-Polarisation ist schon bei kleinen Porenradien und geringem Indexkontrast eine Bandlücke zu beobachten, wohingegen für die TM-Polarisation nur Stop-Gaps, also Bandlücken in nur einer Kristallrichtung, zu finden sind. Erst für ein großes r/a -Verhältnis entsteht auch für diese Polarisation eine Bandlücke. Genauere Auskunft gibt

2.2. Einführung in die numerische Simulation von photonischen Kristallen



(a) $r/a = 0,385$



(b) $r/a = 0,42$

Abbildung 2.3.: Bandstruktur des 2D-hexagonalen Kristalls (Abbildung (2.1)) mit Luftlöchern in Silizium ($\epsilon = 11,6$) (PWE-Methode). Es gibt eine Aufspaltung in eine TM= E_z - und TE= H_z -Polarisation. Es zeigen sich Frequenzbereiche in denen keine Zustände existieren (Bandlücken). Abbildung (a) und (b) unterscheiden sich im Radius der Luftlöcher. Ein größeres r/a verschiebt die Bänder nach oben zu höheren Frequenzen.

2. Theoretische Beschreibung photonischer Kristalle

die so genannte Gapmap. Hier werden die Bandlücken beider Polarisationen über den Radius aufgetragen.

Statt im k -Raum kann man die Lösungen auch in der Realraumdarstellung finden. Dieser Ansatz wird von der Finiten-Elemente-Methode verwendet. Die Grundlagen dazu werden im folgenden Abschnitt aufgezeigt.

2.2.3. Finite Elemente Methode

In Anlehnung an die Beschreibung von Silvester und Ferrari [8] wird kurz auf das Prinzip der Finite-Elemente-Methode (FEM) in zwei Dimensionen eingegangen. In einem Rechengebiet soll die Laplace-Gleichung

$$\nabla^2 u = 0 \tag{2.22}$$

gelöst werden. Zu diesem Zwecke wird das Rechengebiet in Dreiecke unterteilt. Man stelle sich nun eines dieser Dreiecke vor. In diesem soll ein Potential gelten:

$$U(x, y) = a + bx + cy \tag{2.23}$$

mit den Unbekannten a , b und c . Dieses Potential existiert nur innerhalb des Dreiecks. Betrachtet man das Potential entlang der Kanten des Dreiecks so erkennt man einen linearen Verlauf zwischen den Potentialwerten an den Ecken. Diese Form der Annäherung wird Element erster Ordnung genannt, kurz linear. Man kann zur Gleichung (2.23) noch weitere Terme mit x^2 und y^2 dazu addieren. Dann spricht man von quadratischen Elementen oder Elementen der zweiten Ordnung.

Ausreichend beschrieben sind die Unbekannten a , b und c , wenn die Potentiale U_i aller drei Ecken der Fläche bekannt sind. Zunächst gilt das lineare Gleichungssystem:

$$\begin{aligned} U_1 &= a + bx_1 + cy_1 \\ U_2 &= a + bx_2 + cy_2 \\ U_3 &= a + bx_3 + cy_3 \end{aligned} \tag{2.24}$$

Die Koordinaten der Ecken seien demnach $\mathbf{r}_{1,2,3} = (x_{1,2,3}, y_{1,2,3})^T$. Das Gleichungssystem wird in eine Matrixschreibweise überführt:

$$\begin{pmatrix} U_1 \\ U_2 \\ U_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & x_1 & y_1 \\ 1 & x_2 & y_2 \\ 1 & x_3 & y_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} \tag{2.25}$$

Demnach kann die Funktion $U(x, y)$, welche das Potential an einer beliebigen Stelle innerhalb des Dreieckes beschreibt, auch ohne die Unbekannten a , b und c zu kennen ausgedrückt werden. Es reicht aus die Potentiale der Ecken U_1 , U_2 und U_3 als bekannt

2.2. Einführung in die numerische Simulation von photonischen Kristallen

vorauszusetzen.

$$U(x, y) = \begin{pmatrix} 1 & x & y \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & x_1 & y_1 \\ 1 & x_2 & y_2 \\ 1 & x_3 & y_3 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} U_1 \\ U_2 \\ U_3 \end{pmatrix} \quad (2.26)$$

Werden die Matrixmultiplikationen der rechten Seite durchgeführt, so kann man das Potential auch über eine Summe beschreiben:

$$U(x, y) = \sum_{i=1}^3 U_i \alpha_i(x, y) \quad (2.27)$$

Mit A als der Fläche des Dreiecks folgt eine lineare Funktion des Ortes:

$$\alpha_1(x, y) = \frac{1}{2A} [(x_2 y_3 - x_3 y_2 + y_2 - y_3)x + (x_3 - x_2)y] \quad (2.28)$$

Die anderen beiden Funktionen α_2 und α_3 werden durch zyklische Vertauschung der Indizes gewonnen.

Der Energieinhalt des Dreiecks soll nun bestimmt werden. Es gilt

$$W = \frac{1}{2} \int_A |\nabla U|^2 dx dy \quad (2.29)$$

Wird (2.27) in die obige Gleichung eingesetzt, folgt direkt

$$W = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 U_i \cdot \int_A \nabla \alpha_i \nabla \alpha_j dx dy \cdot U_j \quad (2.30)$$

Um wieder die Matrixschreibweise einzuführen definiert man

$$S_{ij} = \int_A \nabla \alpha_i \nabla \alpha_j dx dy \quad (2.31)$$

mit i und j als Positionsangaben in der Matrix S .

Folglich berechnet sich die Energie nach:

$$W = \frac{1}{2} U^T S U \quad (2.32)$$

Die Matrix-Elemente von S lassen sich ausrechnen, z.B. zu

$$S_{12} = \frac{1}{4A} ((y_2 - y_3)(y_3 - y_1) + (x_3 - x_2)(x_1 - x_3)) \quad (2.33)$$

Bis hierher wurde nur ein Dreieck des Rechengebietes betrachtet. Jetzt müssen die Dreiecke miteinander verbunden werden. Dies wird exemplarisch für zwei benachbarte Dreiecke durchgeführt. Der Vektor U beider Dreiecke, welche die Potentiale an den 6 Ecken

2. Theoretische Beschreibung photonischer Kristalle

vorgibt, ist formal

$$U_{\text{dis}}^T = (U_1 \ U_2 \ U_3 \ U_4 \ U_5 \ U_6)_{\text{dis}} \quad (2.34)$$

Der Index dis steht für disjunkt, d.h. die Elemente wurden noch nicht miteinander verbunden. Die Energie dieses disjunkten Systems berechnet sich nach

$$W = \frac{1}{2} U_{\text{dis}}^T S_{\text{dis}} U_{\text{dis}} \quad (2.35)$$

S_{dis} wird aus den S-Matrizen der beiden Dreiecke ($S^{(1)}$ und $S^{(2)}$) wie folgt aufgebaut:

$$S_{\text{dis}} = \begin{pmatrix} S^{(1)} & 0 \\ 0 & S^{(2)} \end{pmatrix} \quad (2.36)$$

Wenn die beiden Dreiecke verbunden werden, so stehen nur noch vier Potentiale als Variablen zur Verfügung, da zwei Knotenpunkte identisch sind. Um aus dem verbundenen Potential-Vektor U_{con} den disjunkten Vektor U_{dis} zu erzeugen bedient man sich einer rechteckigen Matrix C .

$$U_{\text{dis}} = C U_{\text{con}} \quad (2.37)$$

Ausgeschrieben wird dies zu:

$$\begin{pmatrix} U_1 \\ U_2 \\ U_3 \\ U_4 \\ U_5 \\ U_6 \end{pmatrix}_{\text{dis}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_1 \\ U_2 \\ U_3 \\ U_4 \end{pmatrix}_{\text{con}} \quad (2.38)$$

Somit lässt sich die Energie schreiben als

$$W = \frac{1}{2} U_{\text{con}}^T S U_{\text{con}} \quad (2.39)$$

mit

$$S = C^T S_{\text{dis}} C \quad (2.40)$$

als Matrix des verbundenen Systems. Nach diesem Verfahren können nun alle Dreiecke des Rechengebietes miteinander in Beziehung gesetzt werden.

Bis jetzt ist man davon ausgegangen, dass die Potentiale an den Knotenpunkten bekannt sind. Daraus konnte dann die Energie nach (2.39) berechnet werden. Die Potentiale sind aber nun unbekannt und sollen gesucht werden. Eine Lösung wird gefunden, wenn die Energie W des Systems minimal wird. Als freie Parameter dafür dienen die Potentiale an den Knotenpunkten. Demnach muss folgendes Gleichungssystem gelöst werden:

$$\frac{\partial W}{\partial U_k} = 0 \quad (2.41)$$

2.2. Einführung in die numerische Simulation von photonischen Kristallen

mit k als Knotenpunktnummer des verbundenen Systems (Element aus U_{con}). Ohne Nebenbedingungen hat das Problem eine triviale Lösung, nämlich 0. Nebenbedingungen werden durch Grenzbedingungen am Rechengebietsrande gesetzt. Es soll Ränder geben mit freiem Potential und welche mit einem festen, vorgegebenen Potential. Man sortiere nun den Vektor U nach freien (U_f) und vorgegeben (U_p) Potentialen und unterteile ihn in diese beiden Untervektoren. Damit wird (2.41) zu

$$\frac{\partial W}{\partial U_k} = \frac{\partial}{\partial [U_f]_k} \begin{pmatrix} U_f^T & U_p^T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} S_{ff} & S_{fp} \\ S_{pf} & S_{pp} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_f \\ U_p \end{pmatrix} = 0 \quad (2.42)$$

Eine Differenzierung nach den festen Potentialen ist trivial, somit wird nur nach den freien differenziert. Es folgt die rechteckige Matrixgleichung

$$\begin{pmatrix} S_{ff} & S_{fp} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_f \\ U_p \end{pmatrix} = 0 \quad (2.43)$$

Ausgeschrieben wird sie zu

$$S_{ff}U_f = -S_{fp}U_p \quad (2.44)$$

Dies kann bequem durch Multiplikation von S_{ff}^{-1} nach U_f aufgelöst werden. Es folgt die Lösung

$$U = \begin{pmatrix} -S_{ff}^{-1}S_{fp}U_p \\ U_p \end{pmatrix} \quad (2.45)$$

Man unterscheidet bei den Randbedingungen eines Rechengebietes zwischen Dirichlet- und Neumann-Randbedingungen, wobei erste ein fixes Potential vorgibt und bei der zweiten die Normal-Komponente ($\frac{\partial u}{\partial n}$) null sein muss.

Dieses Grundprinzip kann von der Laplace-Gleichung auch auf die Wellengleichungen überführt werden. Darauf soll hier nicht eingegangen werden. Nähere Informationen über die genaue Implementierung sind in den Handbüchern von **Comsol Multiphysics**⁶ zu finden. Dieses Programm wird als FEM-Löser in dieser Arbeit eingesetzt.

Es wurden kurz die Grundlagen der FEM gezeigt. Um nun mit dieser Methode PhCs zu simulieren wird im Folgenden die Konvergenz des Fehlers bei verschiedenen Netzaufösungen berechnet und mit der PWEM verglichen. Aus dieser Abschätzung für beide Methoden werden die Auflösungsparameter für alle Simulationen dieser Arbeit festgelegt.

Bloch- und Kristallmoden, 2D-Bandstruktur

Man kann mittels der FEM eine Einheitszelle in 2D definieren. Im quadratischen Gitter ist dies relativ einfach zu gewährleisten. Etwas aufwändiger wird es für das hexagonale System. Die Form der Einheitszelle ist in Abbildung <2.4> zu finden. Es ist eine Raute mit einem Öffnungswinkel von 60° . Die Seitenlänge beträgt $1a$. Die Ränder der Raute

⁶<http://www.comsol.com>

2. Theoretische Beschreibung photonischer Kristalle

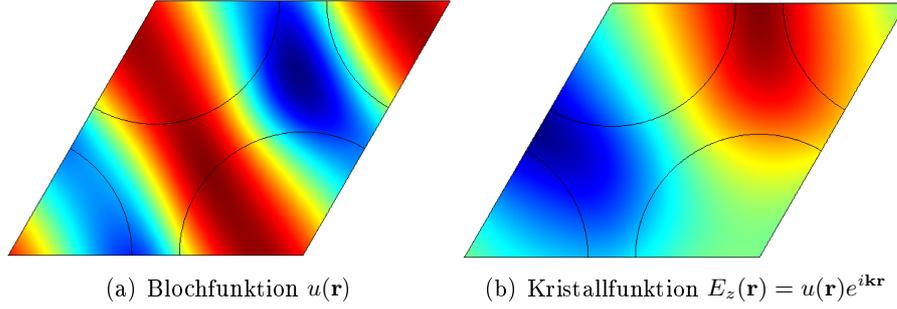


Abbildung 2.4.: Bloch- und Kristallfunktion des zweiten Bandes des hexagonalen Kristalls mit Luftlöchern $r/a = 0,385$ in Silizium ($\epsilon = 11,6$) am \mathbf{K} -Punkt, TM= E_z -Polarisation (FEM-Rechnung). Seitenlänge der Raute ist $1a$ mit einem Öffnungswinkel von 60° .

werden mit periodischen Randbedingungen verknüpft:

$$E_{\text{links}} = E_{\text{rechts}} e^{-ik_x a} \quad (2.46)$$

$$E_{\text{unten}} = E_{\text{oben}} e^{-ik_y a - ik_x 0.5a} \quad (2.47)$$

$$\mathbf{k}_{\text{Bloch}} = (k_x, k_y)^T \quad (2.48)$$

Jetzt kann man sich die Eigenwerte des Systems als Funktion des Blochvektors ausrechnen lassen. Wird der Blochvektor $\mathbf{k}_{\text{Bloch}}$ nur in \mathbf{x} -Richtung variiert, so spricht man von der $\Gamma\mathbf{K}$ -Richtung. Wird $\mathbf{k}_{\text{Bloch}}$ in einem Winkel von 30° zur Horizontalen variiert, so spricht man von der $\Gamma\mathbf{M}$ -Richtung. Die Länge der beiden k -Richtungen sind $|\mathbf{K}| = 4\pi/3$ bzw. $|\mathbf{M}| = 2\pi/\sqrt{3}$. Werden für alle notwendigen $\mathbf{k}_{\text{Bloch}}$ die Eigenwerte berechnet, so ergibt dies das Banddiagramm. Siehe hierzu Abbildung (2.5). Die Randverknüpfungen sind bei der FEM kritisch und müssen per Hand gesetzt werden. Benützt man die PWEM, so erlaubt diese das Erstellen einer Einheitszelle etwas einfacher. Man braucht sich keine Gedanken um die Verknüpfung der Ränder zu machen, sondern definiert nur die Gittervektoren der Einheitszelle (Superzelle) und setzt nachher in diese Rechenbühne Objekte frei nach Belieben. Die periodischen Randbedingungen sind durch die Periodizität der DFT gewährleistet.

2.2.4. Vergleich zwischen PWEM & FEM

FEM und PWEM gehen verschiedene Wege zum Berechnen von Bandstrukturen. Beim genutzten FEM-Löser muss etwas mehr Anpassung geleistet werden als bei dem PWEM-Löser **mpb**. Die FEM-Implementation ist allgemeiner gehalten. Man kann nicht nur elektromagnetische, sondern auch strukturmechanische oder quantenmechanische Phänomene untersuchen. Es ist also nicht für photonische Kristalle optimiert worden, was sich vor allem bei 3D-Rechnungen zeigt. Hierbei ist der FEM-Löser überfordert. Es ist jedoch sicherlich durch **Comsols** allgemeinen Ansatz möglich eine Anpassung für PhC-Probleme durchzuführen.

2.2. Einführung in die numerische Simulation von photonischen Kristallen

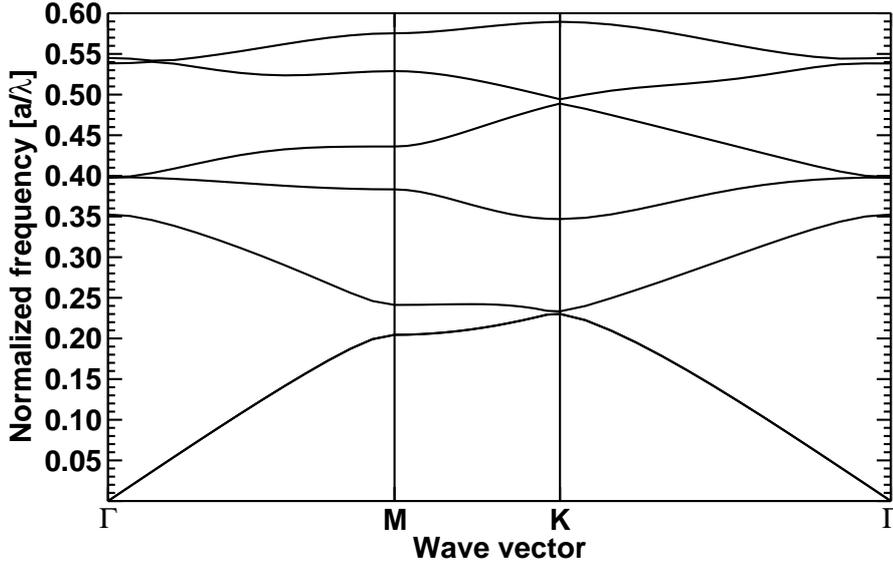


Abbildung 2.5.: Bandstruktur eines hexagonalen Kristalls mit Luftlöchern $r/a = 0,385$ in Silizium ($\epsilon = 11,6$). TM= E_z -Polarisation (FEM-Rechnung).

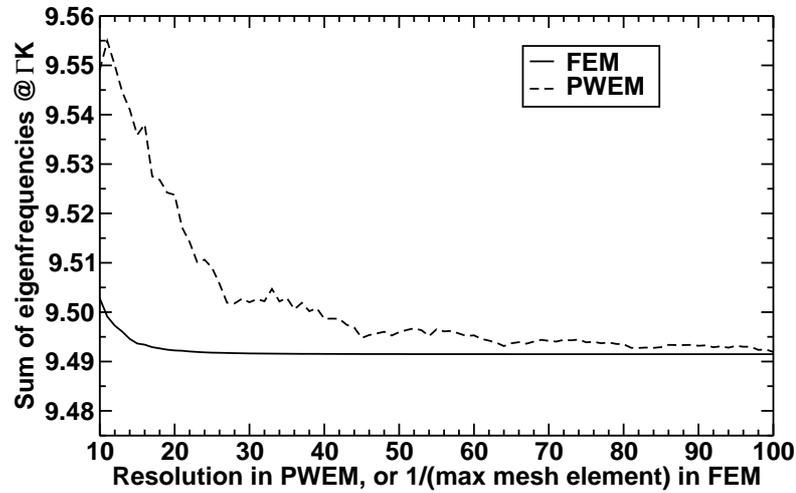
Da mittels FEM in dieser Arbeit Transmissions-, Streu- und Eigenwertrechnungen durchgeführt werden, ist es notwendig zu wissen, bei welchen Einstellungen man ein stabiles, vertrauenswürdiges Ergebnis bekommt.

Als Konvergenz-Kriterium soll die Summe der ersten 15 Eigenfrequenzen am **K**-Punkt des hexagonalen Kristalls mit Luftlöchern von $r/a = 0,385$ in Silizium mit $\epsilon = 11,6$ dienen (TM= E_z -Polarisation). Als Daumenregel gilt bei FEM, dass der maximale Abstand zwischen zwei Knotenpunkten bei linearen Elementen ein Zehntel der lokalen Wellenlänge betragen darf (ein Fünftel für quadratische Elemente). Mit nur Silizium in der Einheitszelle folgt schließlich wegen des höheren Brechungsindex der Wert ein $\frac{1}{35}$ ($\frac{1}{18}$). Als Konvergenz-Parameter wird somit die Auflösung, bzw. maximale Kantenlänge eines Dreiecks gewählt. Es sollen quadratische Elemente benutzt werden. Für die PWEM wurde die Auflösung, also die Diskretisierung in Kästchen, als Parameter gewählt. In Abbildung 2.6) wurde die Summe $\sum_{n=1}^{15} f_n$ und deren Ableitung über die Auflösung aufgetragen. Man kann das Konvergenzverhalten beobachten. Es zeigt sich, dass die FEM-Methode schon recht früh, ab einer maximalen Dreieckskantenlänge von $a/30$, stabile Eigenfrequenzen liefert, wohingegen sich die PWEM erst bei sehr großer Auflösung mit mehr als 100 Elementen je Gitterkonstanten der FEM-Lösung nähert.

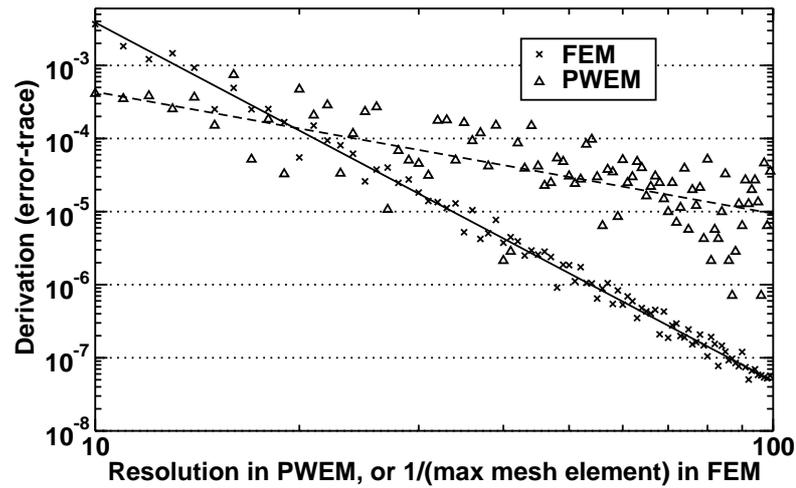
Trotz dieses Konvergenzproblems der PWEM wird das Programm zum Berechnen von Banddiagrammen und Äquifrequenzflächen benutzt, da es dazu viel einfachere Funktionen bietet und schneller als eine FEM-Eigenfrequenzrechnung ist. Außerdem sind die Konvergenzwerte absolut betrachtet gut, für die ersten drei Bänder sogar sehr gut.

Die recht feine FEM-Netzauflösung von $a/30$ erscheint relativ hoch. Der Wert muss aber relativiert werden. Es befindet sich zu 50% hochbrechendes Material in der Einheits-

2. Theoretische Beschreibung photonischer Kristalle



(a) Summe der Eigenfrequenzen



(b) Betrag der Abweichungen der Summe zum vorigen Wert (Ableitung)

Abbildung 2.6.: Konvergenzverhalten des Eigenwertproblems für PWEM und FEM am K -Punkt des hexagonalen Kristalls mit Luftlöchern ($r/a = 0,385$) in Silizium ($\epsilon = 11,6$) für $TM=E_z$ -Polarisation. Aufgetragen wurde in (a) die Summe der ersten 15 Eigenfrequenzen als Funktion der Auflösung. In (b) wurde die Ableitung und damit die Änderung der Summe der Eigenfrequenzen als Funktion der Auflösung aufgetragen.

2.2. Einführung in die numerische Simulation von photonischen Kristallen

zelle. Zudem wurden Eigenfrequenzen $f > 1$ gefunden. Beide Gründe bedingen eine feine Netzauflösung. Für FEM-Simulationen in dieser Arbeit werden quadratische Elemente mit einer maximalen Kantenlänge von $1/10$ der lokalen Wellenlänge gewählt, und wenn es zu Speicherproblemen kommt auf $1/5$ reduziert und mittels eines adaptiven Verfahrens nur lokal das Netz verfeinert (Adaptiv meshing). Alle PWEM Rechnungen werden mit einer Auflösung von $a/32$ gerechnet.

Neben den zeitunabhängigen Lösungen gibt es noch eine zeitabhängige Methode die Maxwell-Relationen anzuwenden. Auch hier bleibt man im Realraum. Im kommenden Abschnitt wird eine Methode gezeigt, mit der man die zeitliche Entwicklung eines Feldes beobachten und auch Eigenwerte bestimmen kann. Zur Vervollständigung wird auch für diese Methode der Fehler abgeschätzt.

2.2.5. Finite-Difference-Time-Domain-Methode

Die bisherigen Verfahren transformierten die Maxwellgleichungen in den Frequenzraum. Dort wurden dann zeitharmonische Lösungen gesucht. Der Finite-Difference-Time-Domain (FDTD)-Ansatz geht nun den entgegengesetzten Weg [9]. Es belässt die Maxwellgleichungen im Zeit- und Ortsbereich. Ziel ist hierbei dynamisch das Ausbreiten eines Frequenzbündels zu beobachten. Die Divergenzbedingungen sollen jeweils null sein. Es bleiben folgende Verknüpfungen übrig:

$$\nabla \times \mathbf{H} = \frac{d\mathbf{D}}{dt} \quad (2.49)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{d\mathbf{B}}{dt} \quad (2.50)$$

Wird die Zeitdifferentiation diskret durchgeführt so folgt:

$$\nabla \times \mathbf{H} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\mathbf{D}(t + \Delta t) - \mathbf{D}(t)}{\Delta t} \quad (2.51)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\mathbf{B}(t + \Delta t) - \mathbf{B}(t)}{\Delta t} \quad (2.52)$$

Der Limes soll über die gesamte Gleichung gezogen werden. Desweiteren ersetzt man $\mathbf{D} = \epsilon \mathbf{E} = \epsilon_r \epsilon_0 \mathbf{E}$ und $\mathbf{B} = \mu \mathbf{H} = \mu_r \mu_0 \mathbf{H}$. Es folgt:

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \left(\mathbf{E}(t + \Delta t) = \mathbf{E}(t) + \frac{\Delta t}{\epsilon_0 \epsilon_r} \nabla \times \mathbf{H} \right) \quad (2.53)$$

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \left(\mathbf{H}(t + \Delta t) = \mathbf{H}(t) - \frac{\Delta t}{\mu_0 \mu_r} \nabla \times \mathbf{E} \right) \quad (2.54)$$

Es ist sofort ersichtlich, dass man mit dieser Darstellung eine iterative Methode hat, mit der man ein elektromagnetisches Feld durch ein Rechengebiet schicken kann. Es wird zuerst das E-Feld aus dem alten E-Feld plus einem Korrekturfaktor berechnet. Ebenso kann das H-Feld aus einem alten H-Feld plus Korrekturfaktor berechnet werden. In die Korrekturfaktoren gehen jeweils die örtlichen Materialeigenschaften μ und ϵ ein, sowie die

2. Theoretische Beschreibung photonischer Kristalle

Rotation des konkurrierenden Feldes (E oder H). Die E- und H-Felder werden in einem Kubus nach dem Yee-Würfel-Schema [10] aufgesetzt. Wird der Zeitschritt klein genug gewählt, so kann der Limes weggelassen. Üblicherweise wird die Rotation auch diskretisiert, weshalb bei uniformem Netz der Courant-Faktor $\Delta t/\Delta a$ erscheint, mit Δa als räumlicher und Δt als zeitlicher Diskretisierung. Aus numerischen Stabilitäts-Gründen wird eine obere Grenze für Δt verlangt:

$$\Delta t < \frac{\sqrt{\mu_0 \epsilon_0}}{\sqrt{(\Delta a_x)^2 + (\Delta a_y)^2 + (\Delta a_z)^2}} \quad (2.55)$$

Mehr zum FDTD-Algorithmus und der Anwendung in photonischen Kristallen ist in [11] zu finden.

Bis jetzt wurde nur ein Verfahren entwickelt, welches die zeitabhängige Ausbreitung einer elektromagnetischen Welle in einem System berechnet. Zuerst muss aber eine solche Welle erzeugt werden. Dies geschieht, indem man z.B. an einem beliebigen Quellort einen Wert zum E-Feld dazu addiert. Es bietet sich ein Gaußpuls im Zeitbereich an:

$$\mathbf{E}_{\text{quelle}} = \mathbf{E}_0 e^{-(t-t_0)^2/2\sigma_t^2} \sin(\omega_0(t-t_0)) \quad (2.56)$$

Der Wert t_0 hängt von der Breite des Pulses σ_t ab. Da die Gaußeinhüllende relativ schnell abfällt, reicht das zehnfache von σ_t aus.

Die eingebrachte Energie kann nun durch das System propagieren. Es ist vorauszu-sehen, dass es Probleme an den Rechengbiet-Rändern gibt. Am einfachsten sind die Randbedingungen perfekt magnetisch bzw. perfekt elektrisch zu handhaben. An diesen Rändern wird das entsprechende Feld auf null gehalten. Ebenso gut sind periodische Randbedingungen zu implementieren. Hierbei werden, ähnlich wie oben bei der FE-Methode (Kapitel 2.2.3) beschrieben, Felder von einer Grenzfläche auf die andere kopiert. Am schwierigsten wird die Realisierung von offenen Grenzbedingungen, d.h. die einfallende Welle darf an dieser Grenze nicht reflektiert werden. Ein gängiges Verfahren, um sich diesem optimalen Verhalten zu nähern, ist die Perfect-Matched-Layer (PML)-Methode, wobei die generalisierte Variante bevorzugt wird [11]. Die PML lässt sich auch in der FE-Methode realisieren. Es soll hier deshalb anhand des zeitharmonischen Bereiches die Funktion der PML beschrieben werden. Ziel der Schicht ist es eine möglichst schnelle Dämpfung der Welle am Rande des Rechengbietes zu erzeugen, ohne dabei Reflexionen in Kauf nehmen zu müssen. Damit dies gelingt, muss im Allgemeinen Energie vernichtet werden. Dies geschieht durch Einführen einer imaginären Konstante. Im Randbereich des Rechengbietes werden die Materialkonstanten μ und ϵ jeweils durch die Matrix L ersetzt:

$$L = \begin{pmatrix} L_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & L_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & L_{zz} \end{pmatrix} = \mu = \epsilon \quad (2.57)$$

Dabei setzen sich die Komponenten wie folgt zusammen:

$$L_{xx} = \frac{s_y s_z}{s_x} \quad (2.58)$$

2.2. Einführung in die numerische Simulation von photonischen Kristallen

Die y - sowie z -Komponente werden analog (zyklisch) dazu berechnet. Die Variablen $s_{x,y,z}$ sind im normalen Rechengebiet eins. Im PML-Bereich wird eine ortsabhängige imaginäre Zahl dazu addiert. Eine andere Möglichkeit neben dem Weg über eine Matrix zu gehen, ist die Streckung der Ortsvariablen in die komplexe Ebene hinein. Beide Darstellungen sind gleichwertig. In dieser Arbeit wird die Matrixdarstellung gewählt. An den Flächen des Rechengebietrandes (z.B. x -Seite) wird s zu

$$s = \begin{pmatrix} a - ib(x - x_{\text{pml}})^p \\ a \\ a \end{pmatrix} \quad (2.59)$$

an den Kanten z.B. zu

$$s = \begin{pmatrix} a - ib(x - x_{\text{pml}})^p \\ a - ib(y - y_{\text{pml}})^p \\ a \end{pmatrix} \quad (2.60)$$

und an den Ecken z.B. zu

$$s = \begin{pmatrix} a - ib(x - x_{\text{pml}})^p \\ a - ib(y - y_{\text{pml}})^p \\ a - ib(z - z_{\text{pml}})^p \end{pmatrix} \quad (2.61)$$

Mit jeweils x , y und z als Ortsvariable und x_{pml} , y_{pml} und z_{pml} als Start-Koordinaten der PML. Die Parameter b und p müssen nun geschickt gewählt werden. Für p erweist sich ein Wert von 3-4 als geeignet. b hängt von der Schichtdicke ab. Wird nur eine eindimensionale PML in x -Richtung betrachtet, so ergibt sich folgende Matrix:

$$L = \begin{pmatrix} \frac{a+ib}{a^2+b^2} & 0 & 0 \\ 0 & a - ib & 0 \\ 0 & 0 & a - ib \end{pmatrix}, \quad (2.62)$$

d.h. die PML ist ein aktives Medium, welches für eine Absorption der y - und z -Komponente, aber für eine Verstärkung der x -Komponente sorgt.

Einfluss der PML

Eigentlich sollte die Summe von Reflexion und Transmission ohne Absorption konstant sein ($R + T = 1$). Dies ist aber nicht immer gewährleistet. Die PML reflektiert einen gewissen Prozentsatz der elektromagnetischen Energie wieder in das Rechengebiet zurück. Dadurch ergeben sich Abweichungen. In Abbildung (2.7) wird der Einfluss der PML auf die Reflexion und Transmission einer ebenen Welle dargestellt. In dem betrachteten Frequenzintervall ist die Summe der Abweichungen kleiner als 10^{-3} .

2. Theoretische Beschreibung photonischer Kristalle

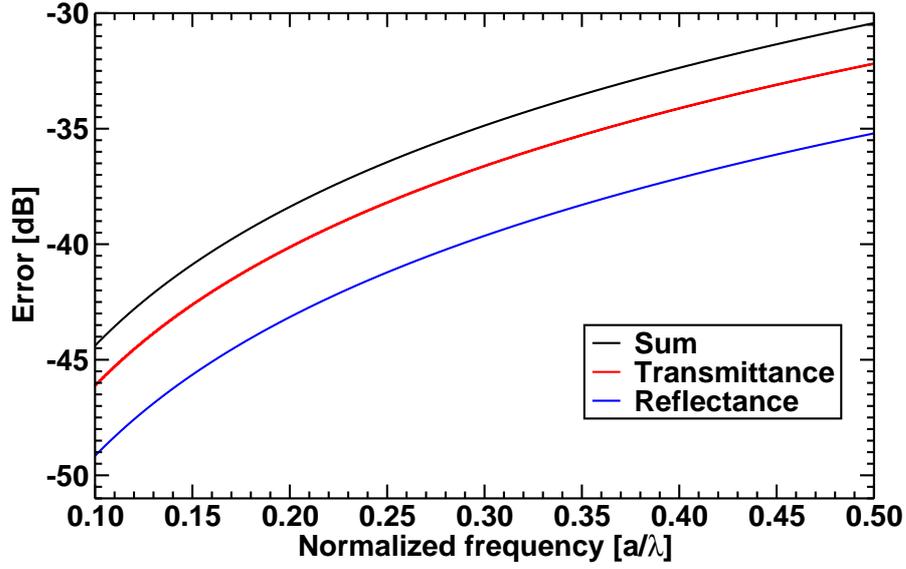


Abbildung 2.7.: Es wurde der relative Fehler einer Rechnung in dB über die normalisierte Frequenz aufgetragen. Im üblicherweise betrachteten Frequenzbereich ist er somit kleiner als 30dB. Der Reflexionskoeffizient der PML ist kleiner als 10^{-3} . In der Simulation bestand das Rechengebiet nur aus Luft.

Eigenfrequenzrechnung mittels FDTD

Die FDTD-Methode ist auch dazu geeignet Eigenfrequenzen bzw. Defektfrequenzen von Kristallen zu berechnen. Hierfür wird die periodische Randbedingung an allen Grenzen des Rechensystems aufgesetzt. Es gilt für zwei Grenzen des Systems:

$$E_{\text{links}}(\mathbf{r}) = E_{\text{rechts}}(\mathbf{r})e^{-i\mathbf{k}_{\text{Bloch}}\mathbf{R}} \quad (2.63)$$

mit \mathbf{R} als Gitterabstand zwischen den Grenzen links und rechts. Diese Verknüpfung erklärt sich folgendermaßen: Die nächste Einheitszelle, welche sich virtuell rechts an die erste anschließt, hat die gleiche Blochfunktion (Blochfunktion ist translationsinvariant), aber die Welle ist um dem Blochphasenfaktor weiter gewandert. Werden die Rotationsanweisungen nun numerisch und diskret durchgeführt, so folgt:

$$\hat{e}_z \cdot (\nabla \times \mathbf{E}) = \frac{E_y(x+1, y, z) - E_y(x, y, z) - E_x(x, y+1, z) + E_x(x, y, z)}{\Delta x} \quad (2.64)$$

$$\hat{e}_z \cdot (\nabla \times \mathbf{H}) = \frac{H_y(x, y, z) - H_y(x-1, y, z) - H_x(x, y, z) + H_x(x, y-1, z)}{\Delta x} \quad (2.65)$$

2.2. Einführung in die numerische Simulation von photonischen Kristallen

Erreicht man jetzt in der Rechenschleife die Grenzen, entweder an $x = 0$ oder $x = x_{\max}$, so wird

$$E_y(x_{\max} + 1, y, z) = 1/p_x E_y(0, y, z) \quad (2.66)$$

$$H_y(0 - 1, y, z) = p_x H_y(x_{\max}, y, z) \quad (2.67)$$

mit $p_x = e^{-i\mathbf{k}_{\text{Bloch}} \mathbf{R}}$. Ausgeschrieben ergibt dies wieder für die z -Komponente

$$\hat{e}_z \cdot (\nabla \times \mathbf{E}) = \frac{E_y(0, y, z) - E_y(x_{\max}, y, z) - E_x(x_{\max}, y + 1, z) + E_x(x_{\max}, y, z)}{\Delta x} \quad (2.68)$$

$$\hat{e}_z \cdot (\nabla \times \mathbf{H}) = \frac{H_y(0, y, z) - p_x H_y(x_{\max}, y, z) - H_x(0, y, z) + H_x(0, y - 1, z)}{\Delta x} \quad (2.69)$$

Diese Randverknüpfung wird für alle Grenzen durchgeführt. Jetzt muss das Anfangsfeld gesetzt werden. Dieses muss wie gehabt die Divergenzbedingung erfüllen. Deswegen initialisiert man mit

$$\mathbf{H}_{\text{init}}(\mathbf{r}) = \hat{H}_0 e^{i\mathbf{k}_{\text{Bloch}} \mathbf{r}} \quad (2.70)$$

Mit $\hat{H}_0 \cdot \mathbf{k}_{\text{Bloch}} = 0$ wird die Divergenzbedingung sichergestellt, um longitudinale Wellen zu vermeiden. \hat{H}_0 wählt die Polarisation. In 2D wird damit die TE- oder TM-Polarisation erzeugt. Da aber die gesuchten photonischen Kristallmoden unter Umständen keine nullte Fourierkomponente besitzen, muss man auch höhere Koeffizienten anregen. Dies geschieht mit folgendem Ansatz: Man erzeugt sich einen Vektor \hat{v} aus \hat{H}_0 :

$$\hat{v} = \mathbf{k}_{\text{Bloch}} \times \hat{H}_0 \quad (2.71)$$

und normiert ihn auf 1 (für $\mathbf{k}_{\text{Bloch}} = 0$ wird ein Zufallsvektor gewählt). Das Anfangsfeld setzt sich nun nach

$$\mathbf{H}_{\text{init}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} \frac{\hat{v} \times (\mathbf{G} + \mathbf{k}_{\text{Bloch}})}{|\mathbf{G}|^2 + 1} e^{i\phi_{\mathbf{G}, \text{random}}} e^{i(\mathbf{G} + \mathbf{k}_{\text{Bloch}}) \mathbf{r}} \quad (2.72)$$

zusammen. Für den Sonderfall $\mathbf{k}_{\text{Bloch}} = 0$ und $\mathbf{G} = 0$ wird obiger Bruch auf 1 gesetzt. Es wird über die ersten 5 reziproken Gittervektoren summiert. Die Zufallsphase stellt sicher, dass korrespondierende Exponenten nicht zu einem rein reellen Sinus oder Kosinus führen. Das Iterationsverfahren wird mit dem E-Feld begonnen. Man setzt nun Sensordpunkte in den Kristall und notiert dafür das Skalarprodukt $\mathbf{H} \cdot \hat{H}_0$ für jeden Iterationsschritt. Damit wird die eingestellte Polarisation (TE, TM) ausgewählt. Dem Rechensystem wird etwas Zeit zum Relaxieren gelassen. Nach 7% der angestrebten Iterationszeit wird mit der Detektion des Zeitsignals begonnen. Somit vergrößert sich die Iterationszahl um den Faktor 1,07. Eine anschließende diskrete Fouriertransformation unter Anwendung einer geeigneten Fensterfunktion liefert ein diskretes Spektrum. Jedes Maximum entspricht dabei einem Eigenzustand. Siehe hierzu Abbildung (2.8). Der Nachteil der diskreten Fouriertransformation ist die dabei bedingte Festlegung auf eine Frequenzeinteilung, wobei die Frequenzeinteilung feiner wird mit größer werdender Iterationszeit. Es

2. Theoretische Beschreibung photonischer Kristalle

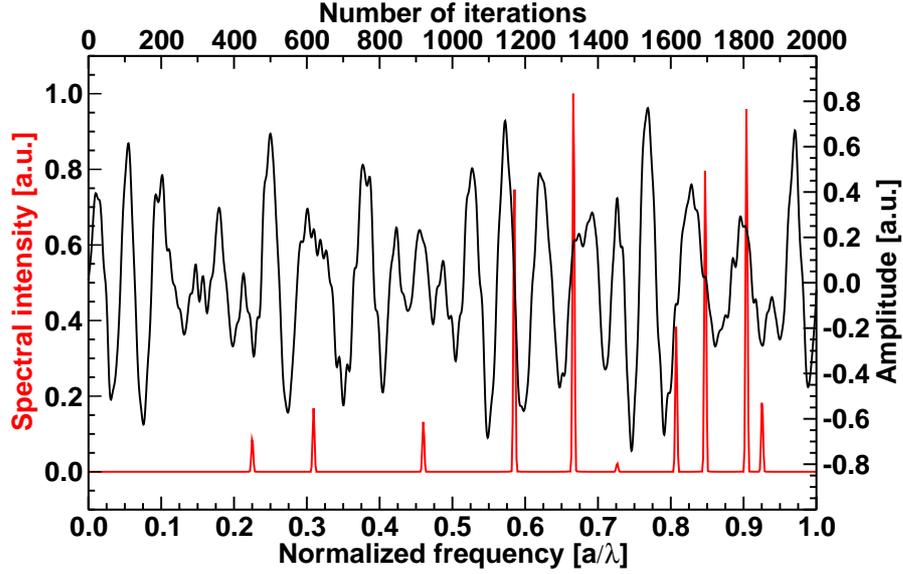


Abbildung 2.8.: Auszug aus dem Zeitverhalten (nur Realteil) einer FDTD-Eigenfrequenz-Simulation und ihr zugehöriges Fourier-Leistungsspektrum (Blackman-Fenster-Funktion). Quadratisches Gitter mit Luftlöchern von $r/a = 0,4$ in Silizium mit $\epsilon = 11,6$ für eine Blochvektor auf der Hälfte des Weges zwischen \mathbf{X} und \mathbf{M} . TE= H_z -Polarisation.

gilt $\Delta f = \frac{1}{\text{Iterationszeit}}$, d.h. Eigenzustände, welche sich enger als Δf zu einander befinden, können nicht unterschieden werden.

Eine viel elegantere Methode, um Eigenzustände aus einer Zeitreihe zu bestimmen, ist die der harmonischen Inversion⁷ [12]. Wie in Abbildung (2.8) zu erkennen ist, verhalten sich die Eigenzustände wie Delta-Signale. Es bietet sich also an, das Zeitverhalten als Summe über diskrete Frequenzpunkte zu schreiben:

$$H(t) = \sum_n A_{0,n} e^{i\phi_n} e^{i\omega_n t - \alpha_n t} \quad (2.73)$$

Jetzt kann nach den Frequenzen ω_n durch ein Minimierungsverfahren gesucht werden. Diese Methode benötigt mehr Speicher und Zeit als die klassische diskrete Fouriertransformation, doch kann dieser Nachteil schnell wieder durch eine viel kleinere Iterationszeit wett gemacht werden. Mit Hilfe dieser Methode sind die Lösungen nicht mehr auf die Auflösung der diskreten Fouriertransformation beschränkt.

In Abbildung (2.9) wurden eine PWEM- und eine FDTD-Bandstruktur-Rechnung miteinander verglichen. Es zeigt sich eine sehr gute Übereinstimmung. Zur weiteren Abschätzung des Fehlers und der Konvergenz wurden die ersten 15 Bänder eines k-Punktes addiert und deren Abweichung über die Auflösung des Rechensystems aufgetragen. Sie-

⁷<http://ab-initio.mit.edu/wiki/index.php/Harminv>

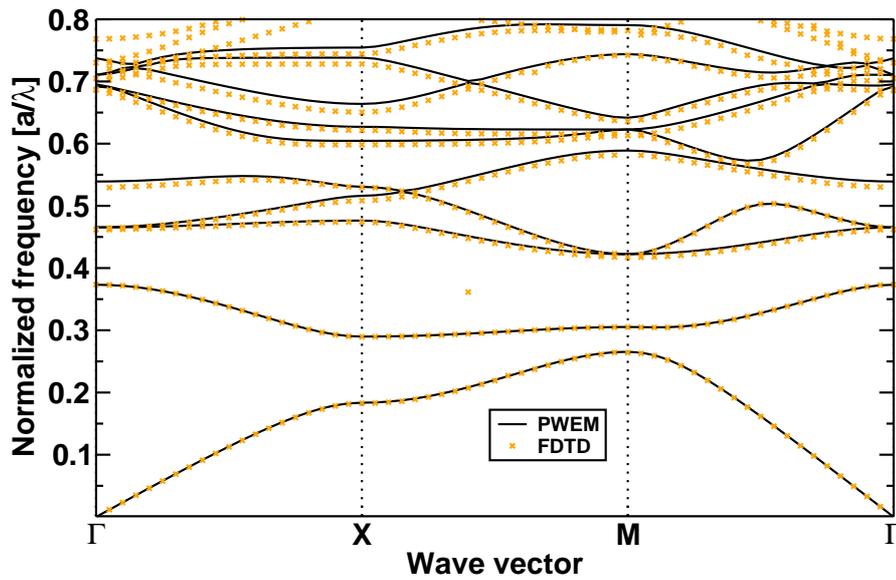


Abbildung 2.9.: Vergleich zwischen den Bandstruktureregebnissen der PWEM und der FDTD-Methode. Luftlöcher mit $r/a = 0,4$ in Silizium ($\epsilon = 11,6$), quadratisches Gitter, FDTD-Auflösung: 31, TE= H_z -Polarisation, normierte Iterationszeit=400. Eigenfrequenzen, die über die PWE-Methode bestimmt wurden, wurden mit durchgezogener Linie gekennzeichnet und mit Kreuzen die über die FDTD-Methode bestimmten.

2. Theoretische Beschreibung photonischer Kristalle

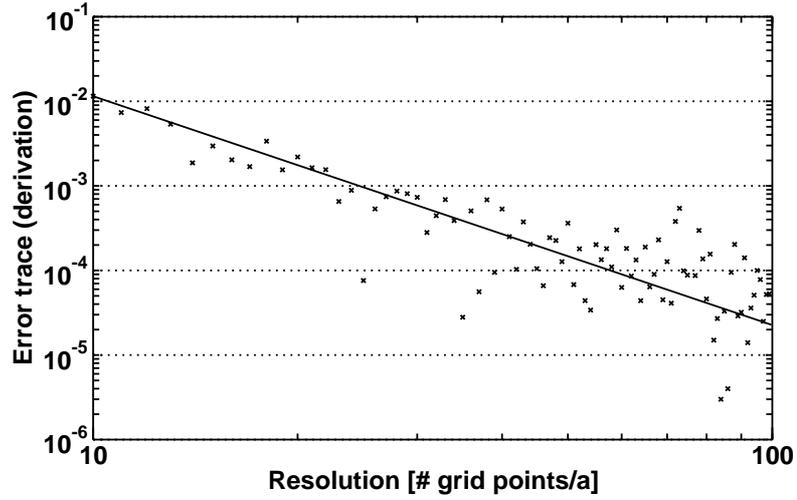


Abbildung 2.10.: Konvergenzverhalten einer Eigenfrequenzrechnung mittels FDTD. Ableitung der Summe der ersten 15 Eigenwerte. Quadratisches Gitter mit Luftlöchern $r/a = 0,4$ in Silizium ($\epsilon = 11,6$), $TE=H_z$ -Polarisation, normierte Iterationszeit=400. Die durchgezogene Linie gibt den durchschnittlichen Verlauf der Konvergenz an.

he hierzu Abbildung (2.10). Ein akzeptabler Wert wird etwa für eine Auflösung von 64 Punkten je Gitterkonstanten erreicht. Vergleicht man das Konvergenzverhalten mit dem von der PWEM aus Abbildung (2.6) so sieht man, dass sich beide Kurven ähnlich verhalten. Die Auflösung von 64 Diskretisierungspunkte je Gitterkonstante wird für alle nachfolgenden FDTD-Transmissionsrechnungen festgesetzt.

Frequenzabhängige Materialfunktion

Mit Hilfe der FDTD-Methode lässt sich auch eine frequenzabhängige Materialfunktion realisieren. Wird der cw-Modus⁸ benutzt, so kann die Materialkonstante für die eingestellte Frequenz verwendet werden. Möchte man Informationen über ein breites Frequenzfenster erlangen, so wird eine Differentialgleichung zum vorhandenen Iterationsschritt hinzu gefügt.

Als Material-Modell soll hier die Differentialgleichung einer erzwungenen Schwingung dienen.

$$\ddot{\mathbf{P}}(t) + \gamma\dot{\mathbf{P}}(t) + \omega_0^2\mathbf{P}(t) = \alpha\omega_0^2\mathbf{E}(t) \quad (2.74)$$

Mit dem Ansatz $\mathbf{E}(t) = \mathbf{E}_0 e^{-i\omega t}$ lässt sich obige Gleichung lösen und es folgt:

$$\mathbf{P}(\omega) = \frac{\alpha\omega_0^2}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\gamma\omega} \mathbf{E}_0 \quad (2.75)$$

⁸Gaußpuls mit sehr großer Halbwertsbreite

2.2. Einführung in die numerische Simulation von photonischen Kristallen

Mit \mathbf{P} ist die Polarisation im dielektrischen Medium gemeint. Aus den Maxwellgleichungen folgt der Zusammenhang:

$$\mathbf{D} = \epsilon_0 \epsilon_r (\mathbf{E} + \mathbf{P}) = \epsilon_0 \epsilon_r \left(1 + \frac{\alpha \omega_0^2}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\gamma\omega} \right) \mathbf{E} \quad (2.76)$$

Somit wurde eine Materialfunktion modelliert mit folgendem Aussehen:

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_r \left(1 + \frac{\alpha \omega_0^2}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\gamma\omega} \right) \quad (2.77)$$

Um das Drude-Modell zu simulieren lässt man $\omega_0^2 \rightarrow 0$ gehen und wählt ein großes α um den Nenner zu kompensieren.

2.2.6. Transfermatrixmethode

Die Transfermatrixmethode beschäftigt sich mit der Fragestellung, wie einfallende und reflektierte Wellen an Grenzschichten berechnet werden können. Man schreibt üblicherweise Felder links von einer Grenzschicht mit ${}^m a$ und ${}^m b$ und rechts davon mit ${}^{m+1} a$ und ${}^{m+1} b$. Die Koeffizienten a beschreiben dabei eine nach rechts laufende Welle und b eine nach links laufende Welle.

Es sei eine Welle gegeben mit folgendem Aussehen:

$$|E\rangle = \sum_n \left[a_n e^{ik_n z} + b_n e^{-ik_n z} \right] |e_n\rangle \quad (2.78)$$

Die einfallende Welle wurde aufgeschlüsselt nach Moden $|e_n\rangle$ des Mediums. Die Feldverteilung in der xy-Ebene ist durch $|e_n\rangle$ gegeben. Als Darstellung der Moden wurde die elektrische Feldkomponente gewählt. Jede Mode darf einzeln betrachtet werden. Elektrische und magnetische Feldkomponente sind über die Maxwellgleichungen verknüpft, folglich soll es einen Operator Ω geben, welcher auf das E-Feld angewendet ein H-Feld erzeugt:

$$|H\rangle = \Omega |E\rangle = \sum_n \left[a_n e^{ik_n z} - b_n e^{-ik_n z} \right] \Omega_n |e_n\rangle \quad (2.79)$$

Ω führt eine Ableitung entlang der z-Achse durch, welches das Vorzeichen der b Komponenten dreht. Desweiteren gilt:

$$\Omega_n |e_n\rangle = |h_n\rangle, \quad (2.80)$$

d.h. der Operator Ω_n erzeugt aus der E-Darstellung eine H-Darstellung. Wenn die Mode des Mediums eine ebene Welle ist, dann wird $\Omega_n = \omega \epsilon / k_z (0, 0, 1)^T \times$ in normierten Einheiten. Kennt man die Moden beider Seiten einer Grenzschicht, so kann man daraus die Transmissions- und Reflexionskoeffizienten ermitteln [13]. Zuerst werden die Überlapp-

2. Theoretische Beschreibung photonischer Kristalle

matrizen bestimmt:

$$\Phi(i, j) = \langle \mathbf{E}_i^m | \mathbf{H}_j^{m+1} \rangle \quad (2.81)$$

$$\Xi(i, j) = \langle \mathbf{E}_i^{m+1} | \mathbf{H}_j^m \rangle \quad (2.82)$$

Werden die Moden nach $\langle \mathbf{E}_i^m | \mathbf{H}_i^m \rangle = 1$ normiert⁹, so folgen direkt die Koeffizienten

$$T_{m,m+1} = 2 (\Phi + \Xi^T)^{-1} \quad (2.83)$$

$$R_{m,m+1} = 0,5 (\Xi^T - \Phi) T_{I,II} \quad (2.84)$$

$T_{m,m+1}$ ist die Transmissionskoeffizientenmatrix für den Übergang von Schicht m in Schicht $m + 1$ und $R_{m,m+1}$ entspricht der Reflexionskoeffizientenmatrix.

Bandstruktur mittels Transfermatrix

Mit Hilfe der Transfermatrix-Methode kann auch auf die Bandstruktur geschlossen werden. Dies wird exemplarisch im 1D-Fall gezeigt. Die Variablen a und c beschreiben das Feld in Ausbreitungsrichtung und b und d das Feld entgegengesetzt der Ausbreitung, wobei a und b sich auf einer Seite der Grenzschicht und c und d auf der anderen Seite befinden. Hierfür wird folgendes Gleichungssystem aufgesetzt, welches sich aus Transmissions- und Reflexionsüberlegungen herleiten lässt:

$$\begin{aligned} c &= t_{1,2}a + r_{2,1}d \\ b &= t_{2,1}d + r_{1,2}a \end{aligned} \quad (2.85)$$

c setzt sich demnach zusammen aus dem transmittierten Anteil von a und dem reflektierten von d . Ähnliches gilt für b . Aufgelöst nach Variablen, welche auf einer Seite stehen, folgt:

$$\begin{aligned} a &= t_{1,2}^{-1} c - r_{2,1}t_{1,2}^{-1} d \\ b &= r_{1,2}t_{1,2}^{-1} c + (t_{2,1} - r_{2,1}r_{1,2}t_{1,2}^{-1}) d \end{aligned} \quad (2.86)$$

Dieses Gleichungssystem lässt sich auch in Matrixform schreiben:

$$\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = I_{1,2} \begin{pmatrix} c \\ d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} t_{1,2}^{-1} & -r_{2,1}t_{1,2}^{-1} \\ r_{1,2}t_{1,2}^{-1} & t_{2,1} - r_{2,1}r_{1,2}t_{1,2}^{-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c \\ d \end{pmatrix} \quad (2.87)$$

Die Matrix verknüpft die Felder links und rechts von einer Schicht miteinander. Die Propagation in einer Schicht wird durch die Phasenmatrix beschrieben:

$$P_n = \begin{pmatrix} e^{-ik_n d_n} & 0 \\ 0 & e^{ik_n d_n} \end{pmatrix} \quad (2.88)$$

⁹ $\langle \mathbf{F}_1 | \mathbf{F}_2 \rangle = \int_A \mathbf{F}_1 \times \mathbf{F}_2 \cdot \hat{z} dA$

2.2. Einführung in die numerische Simulation von photonischen Kristallen

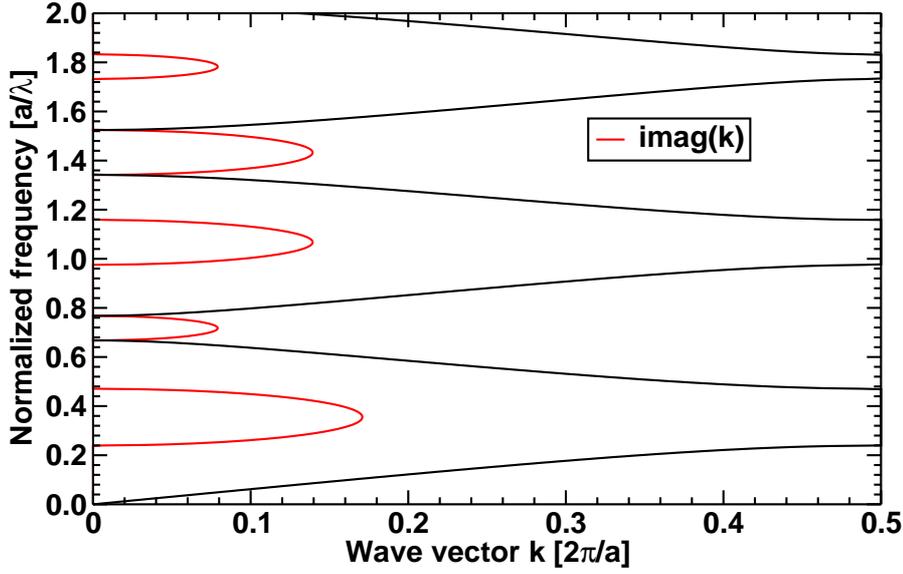


Abbildung 2.11.: Banddiagramm eines 1D Kristalls mit $n_1 = 3$, $n_2 = 1$, $d_1 = 0,2a$ und $d_2 = 0,8a$.

Mit k_n als Wellenvektor in der n -ten Schicht und d_n als Schichtdicke. Damit kann nun eine 1D-Einheitszelle zusammengesetzt werden:

$$T_{1D} = P_1 I_{1,2} P_2 I_{2,1} \quad (2.89)$$

Die Eigenwerte dieser 2×2 -Matrix entsprechen dem Blochphasenfaktor und können somit sofort in den Blochvektor umgerechnet werden. Es gilt:

$$\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = T_{1D} \begin{pmatrix} c \\ d \end{pmatrix} = e^{ikd} \begin{pmatrix} c \\ d \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \quad (2.90)$$

Mit dieser Methode wurde Abbildung (2.11) berechnet. Der Vorteil dieser Methode ist, dass man bei einem frequenzabhängigen Material den Brechungsindex für eine feste Frequenz vorgibt und als Eigenwerte die zugehörigen Blochvektoren bekommt. Die berechneten Blochvektoren haben zudem noch einen imaginären Anteil. Dieser wurde in Abbildung (2.11) rot gekennzeichnet. Imaginäre Anteile geben eine exponentiell abfallende Welle an und damit die Eindringtiefe in den Kristall. Die Eindringtiefe ist an den Rändern der Bandlücke am größten, wobei der Realanteil des k -Vektors fest bei 0,5 bzw. bei 0 liegt. Dies ist ein prinzipielles Verhalten und kann auch auf 2D- und 3D-Systeme übertragen werden.

Beim Zusammensetzen der Transfermatrix können numerische Instabilitäten auftreten. Diese werden ersichtlich, wenn man bedenkt, dass der Nenner der Transfermatrix die Transmission beinhaltet. Eine niedrige Transmission, infolge z.B. einer Bandlücke oder eines stark absorbierenden Mediums, muss demnach zu einer großen reziproken Trans-

2. Theoretische Beschreibung photonischer Kristalle

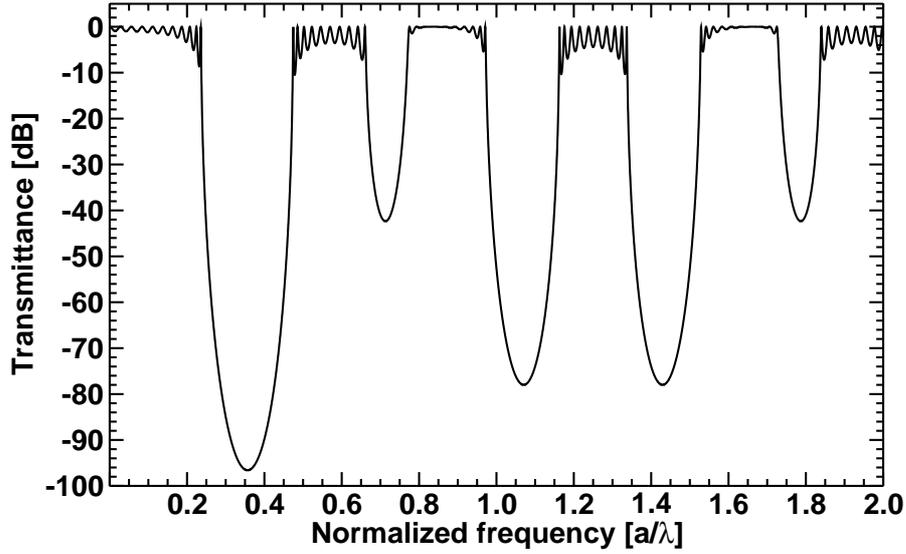


Abbildung 2.12.: Transmission durch einen 1D Kristall bestehend aus 10 Einheitszellen mit $n_1 = 3$, $n_2 = 1$, $d_1 = 0,2a$ und $d_2 = 0,8a$.

mission führen. Im Computer sind aber nicht beliebig große Zahlen darstellbar. Um dieses Problem zu umgehen kann man verschiedene Schichten miteinander verknüpfen, indem man sich der Mehrfachinterferenzen, wie sie in einem Fabry-Perot-Etalon auftreten, bedient. Folgende Lösungen verbinden die Schicht 0 mit der Schicht 2 durch den Übergang durch Schicht 1:

$$r_{0,2} = r_{0,1} + r_{0,1} \frac{e^{i2k_1 d_1} r_{1,2}}{1 - e^{i2k_1 d_1} r_{1,0} r_{1,2}} t_{1,0} \quad (2.91)$$

$$t_{0,2} = t_{0,1} \frac{e^{ik_1 d_1}}{1 - e^{i2k_1 d_1} r_{1,2} r_{1,0}} t_{1,2} \quad (2.92)$$

$$r_{2,0} = r_{2,1} + t_{2,1} \frac{e^{i2k_1 d_1} r_{1,0}}{1 - e^{i2k_1 d_1} r_{1,2} r_{1,0}} t_{1,2} \quad (2.93)$$

$$t_{2,0} = t_{2,1} \frac{e^{ik_1 d_1}}{1 - e^{i2k_1 d_1} r_{1,0} r_{1,2}} t_{1,0} \quad (2.94)$$

Man kann gut erkennen, dass dieses Verknüpfungsverfahren für geringe Transmissionen besser geeignet ist als die direkte Multiplikation der Transfermatrizen. In Abbildung (2.12) wurde mit dieser Methode die Transmission eines 1D Kristalls, bestehend aus 10 Schichten, berechnet.

Nachdem nun die numerischen Grundwerkzeuge zum Simulieren von PhCs eingeführt wurden, werden zuerst zwei Aspekte der „normalen“ Materie näher betrachtet. Zum einen die Effektiv-Medium-Theorie in Kapitel 2.4 und zum anderen die Betrachtungsweise der Äquifrequenzflächen im direkt folgenden Kapitel 2.3. Auf diese beiden Informationen

wird später im Kapitel 3 und 4 zurückgegriffen.

2.3. Äquifrequenzflächen

Flächen konstanter Energie sind eine aus der Festkörperphysik für Elektronen bekannte Darstellung [14]. Dort werden sie Fermiflächen genannt. Um sie zu konstruieren wird im k -Raum eine Oberfläche gesucht, auf der das Elektron eine konstante Energie besitzt. Übertragen auf den photonischen Fall wird nach Flächen gesucht, auf denen das Photon konstante Energie besitzt. Für die Energie gilt:

$$E(\omega) = \hbar\omega \quad (2.95)$$

Die Energie ist proportional zur Frequenz, demnach darf man diese Flächen Äquifrequenzflächen (EFS, Equi-Frequency-Surface) nennen. Diese Frequenz ist mit dem k -Vektor über die Lichtgeschwindigkeit verknüpft, welche aber zu $c_0 = 1$ gesetzt wurde:

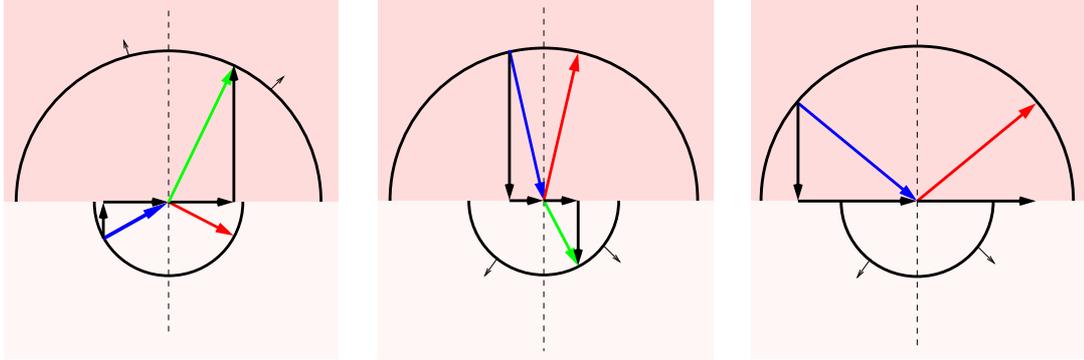
$$\omega = c_0|\mathbf{k}_0| = |\mathbf{k}_0| \quad (2.96)$$

\mathbf{k}_0 entspricht dem Wellenvektor im freien Raum und ω ist die zugehörige Kreisfrequenz. Im freien Raum ist die Äquifrequenzfläche eine Kugel. Wird ein Medium mit homogenem Brechungsindex n eingeführt, so vergrößert sich der Radius der Kugel um diesen Faktor n . Der Brechungsindex ist aber nicht zwingend homogen. Er kann von der Frequenz und der Richtung abhängig sein. Der Wellenvektor \mathbf{k} soll nun auf die Äquifrequenzfläche zeigen:

$$\mathbf{k} = n(\omega, \hat{k}_0)\mathbf{k}_0 \quad (2.97)$$

mit $n(\omega, \hat{k}_0)$ als richtungs- und frequenzabhängigem Brechungsindex. Die Vorzüge des Konzeptes der Äquifrequenzfläche zeigen sich in der geometrischen Deutung des Reflexions- und Brechungsgesetzes. Siehe hierzu auch Abbildung (2.13). Das grundlegende physikalische Prinzip, welches dahinter steckt, ist die Bedingung, dass die Tangentialkomponenten der E- und H-Felder an der Grenzfläche zwischen zwei Medien stetig sein müssen. Diese Stetigkeitsbedingung vereinfacht sich im Falle einer ebenen Welle zu der so genannten \mathbf{k}_{\parallel} -Erhaltung. Die einfallende, reflektierte und ausgehende Welle werden zerlegt in k -Komponenten senkrecht und parallel zur Oberfläche der Grenzschicht. In Abbildung (2.13) wurden die beiden Medien farblich kodiert. In (a) fällt der Strahl von links unten vom niederbrechenden Medium ein. Das hochbrechende Material hat einen größeren Äquifrequenzkreis. Da nun \mathbf{k}_{\parallel} erhalten bleiben muss (in diesem Beispiel die x -Komponente) wird dieser von der linken Seite auf die rechte Seite kopiert. Es wird nun ein Vektor senkrecht dazu (y -Komponente) gesucht, welcher in Summe mit \mathbf{k}_{\parallel} auf den Kreis im hochbrechenden oder im niederbrechenden Material zeigt. Die Ausbreitungsrichtung ist gegeben durch die Oberflächennormale der EFS selbst. Damit wurden jetzt die Richtungen des reflektierten und des gebrochenen Strahles konstruiert. In (b) fällt das Licht vom hochbrechenden Material auf die Grenzfläche ein und wird vom Lot weg ins niederbrechende Medium gebrochen. In (c) wird der Fall der Totalreflexion beschrieben.

2. Theoretische Beschreibung photonischer Kristalle



(a) Normale Reflexion. Der Strahl wird zum Lot gebrochen. (b) Normale Reflexion. Der Strahl wird vom Lot weg gebrochen. (c) Totalreflexion. Es findet sich kein passender k_{\parallel} -Vektor im niederbrechenden Medium.

Abbildung 2.13.: Geometrische Beschreibung des Reflexions- und Brechungsgesetzes. Die Halbkreise charakterisieren die Äquifrequenzflächen in den beiden Medien. Das obere ist das höher brechende Medium. Der einfallende Strahl ist blau, der reflektierte rot und der gebrochene grün gekennzeichnet.

ben. Im niederbrechenden Medium kann keine Projektion auf den kleinen Kreis gefunden werden, somit kann nur ein reflektierender Strahl konstruiert werden.

Die Richtung des gebrochenen Strahles wird durch die Oberflächennormale der Äquifrequenzfläche gegeben. Man muss beim Anwenden der EFS darauf achten, wie oben beschrieben, dass die zugrundeliegende Grenzbedingung, die Kontinuität der tangentialen Komponenten, auch gilt. Dies kann beim Anwenden der EFS auf photonische Kristalle zu Problemen führen. Eine PhC-Mode wird, wie in Kapitel 2.2.2 beschrieben, über die Summe von ebenen Wellen dargestellt. Es wird nun angenommen, eine PhC-Mode bestünde aus hauptsächlich zwei Wellenkomponenten:

$$E_{\text{PhC},k_0} = A_0 e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} + A_1 e^{i(\mathbf{G}+\mathbf{k})\mathbf{r}} \quad (2.98)$$

Das Licht soll von außen unter dem Winkel α auf den Kristall treffen, somit wird $\mathbf{k}_{\parallel} = \mathbf{k}_0 \hat{n}_{\parallel} = \sin \alpha |k_0|$. Das Feld an der Grenzfläche wird zu

$$E_{\text{PhC},k_0}(s) = A_0 e^{i\mathbf{k}\hat{n}s} + A_1 e^{i(\mathbf{G}+\mathbf{k})\hat{n}s} \quad (2.99)$$

$$E_{\text{Luft},k_0}(s) = B_0 e^{i\mathbf{k}_0 \hat{n}s} \quad (2.100)$$

mit s als Laufvariable am Rande und \hat{n} als Einheitsvektor parallel zur Oberfläche. Ohne den A_1 -Anteil ist sofort ersichtlich, dass $\mathbf{k}\hat{n} = \mathbf{k}_0 \hat{n} = k_{\parallel}$ gelten muss. Mit dem A_1 -Anteil kann man nicht mehr von k_{\parallel} Erhaltung sprechen. Auf diese Sonderfälle wird später im Kapitel 3.1 und Kapitel 4 etwas detaillierter eingegangen. Jiang et. al. [15] haben eine Methode gezeigt, welche die komplette Blochmode nutzt, um die Brechung zu bestimmen. Für sehr kleine Frequenzen besteht die Blochmode hauptsächlich aus der

nullten räumlichen Fourierkomponente. In diesem Fall kann man die EFS anwenden. Für diesen Bereich gibt es aber auch die so genannte Effektiv-Medium-Theorie, welche im folgenden Abschnitt kurz beschrieben wird.

2.4. Effektiv-Medium-Theorie

Schon sehr früh in der Physik der Elektromagnetik wurden Effektiv-Medium-Theorien entwickelt. Die Grundidee dahinter ist der Versuch, ein Metamaterial, welches aus mehreren Stoffkomponenten besteht, zu beschreiben. Jede Komponente des Stoffes hat seine eigene Dielektrizitäts- oder Permeabilitätskonstante. Die Frage war, wie nun die effektiven Konstanten aussehen, d.h. wie man die Konstanten mitteln sollte.

Eine der ersten Lösungen wurde von Wiener [16] geliefert. Seine beiden Gleichungen werden auch als Wiener Grenzfälle oder Wiener Bounds bezeichnet. Sie lauten:

$$\epsilon_{\text{eff}} = f\epsilon_1 + (1 - f)\epsilon_2 \quad (2.101)$$

und

$$\frac{1}{\epsilon_{\text{eff}}} = \frac{f}{\epsilon_1} + \frac{1 - f}{\epsilon_2} \quad (2.102)$$

mit f als Füllfaktor der Komponente ϵ_1 in ϵ_2 . In Abbildung (2.14) wurde die effektive Dielektrizitätszahl eines zwei-Komponenten-Materials als Funktion des Füllfaktors aufgetragen. Wiener ging von einem eindimensionalen System aus, welches aus zwei Materialien zusammen gesetzt wurde. Gleichungen (2.101) und (2.102) beschreiben den jeweils parallel bzw. senkrecht polarisierten Fall. Hierbei liegt das E-Feld entweder parallel zur Grenzschicht oder steht senkrecht darauf. Die Wiener-Grenzfälle sind Näherungen [17, 18] von

$$\frac{k_y^a}{\xi_a} \tan \frac{k_y^a d_a}{2} + \frac{k_y^b}{\xi_b} \tan \frac{k_y^b d_b}{2} = 0 \quad (2.103)$$

$$\epsilon_{\text{eff}} = \left(\frac{ck_z}{\omega} \right)^2 \quad (2.104)$$

$$= \epsilon_a - \left(\frac{ck_a}{\omega} \right)^2 \quad (2.105)$$

$$= \epsilon_b - \left(\frac{ck_b}{\omega} \right)^2 \quad (2.106)$$

mit $\xi_{a,b} = \epsilon_{a,b}$ oder $\xi_{a,b} = 1$ für senkrecht bzw. parallel polarisiertes Licht. Für $d_{a,b} \rightarrow 0$ folgen sofort die Wiener Gleichungen.

Neben den Wiener Gleichungen werden häufig noch Maxwell-Garnet und Bruggeman [19] genannt. Beide Gleichungen kann man zu einer einheitlichen Formelschar zusammenfassen [20]:

$$\frac{\epsilon_{\text{eff}} - \epsilon_e}{\epsilon_{\text{eff}} + \epsilon_e + \nu(\epsilon_{\text{eff}} - \epsilon_e)} = f \frac{\epsilon_i - \epsilon_e}{\epsilon_i + \epsilon_e + \nu(\epsilon_{\text{eff}} - \epsilon_e)} \quad (2.107)$$

2. Theoretische Beschreibung photonischer Kristalle

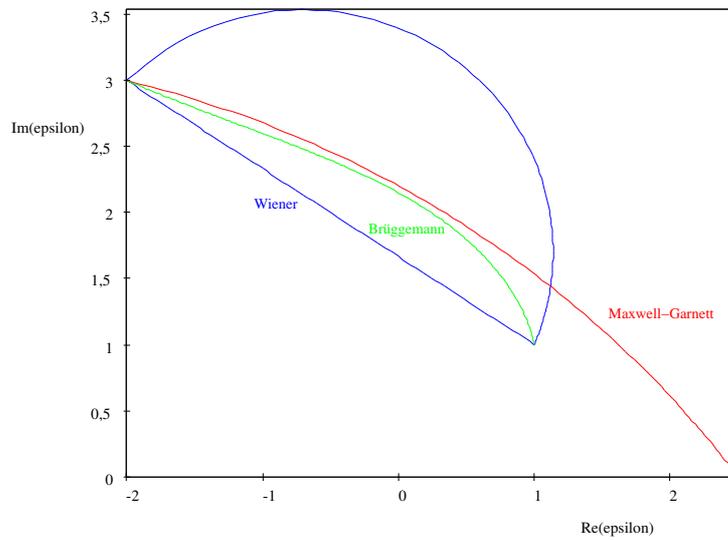


Abbildung 2.14.: Die effektive Dielektrizitätskonstante von zwei Komponenten wurde nach Wiener, Bruggeman und Maxwell-Garnett berechnet und dargestellt. Als Parameter dient der Füllfaktor f , $\epsilon_1 = -2 + 3i$, $\epsilon_2 = 1 + 1i$. Jeder Wert einer Effektiv-Medium-Theorie muss innerhalb der Wiener Grenzen liegen.

mit $\nu = 0$ für Maxwell-Garnett, $\nu = 1$ für Bruggemann, ϵ_e als dielektrische Konstante der Umgebung, ϵ_i als dielektrische Konstante der Einschlüsse und f ihr Füllfaktor.

Im Anhang B wird für kleine Frequenzen im ersten Band der effektive Brechungsindex für ein PhC-System berechnet und mit den klassischen Verfahren verglichen.

2.5. Methodenweiterentwicklung

In den vorigen Abschnitten wurden einige der bekannten Verfahren erläutert, welche genutzt werden um elektromagnetische Wellen zu simulieren. Im Nachfolgenden werden die im Rahmen dieser Arbeit entstandenen Erweiterungen beschrieben.

2.5.1. OpenFDTD

OpenFDTD ist ein in dieser Arbeit weiter entwickeltes 2D-FDTD-Programm. Zur Zeit sind periodische Randbedingungen als Grenzbedingungen für die Richtung senkrecht zur Ausbreitungsrichtung definiert. Parallel zur Ausbreitungsrichtung wurde eine PML-Schicht appliziert.

Das Programm zeichnet sich dadurch aus, dass es mit enorm langsamen Gruppengeschwindigkeiten umgehen kann, was die Standard-FDTD-Codes nicht bewältigen. Dies erkauft es sich durch einen kleinen Verlust an Rechengeschwindigkeit. Es führt nämlich in der Zeitdomäne eine Autokorrelation durch. Dies ist vergleichbar mit der Spiegelbewegung in einem FTIR-Spektrometer.

Um den Unterschied zur klassischen Vorgehensweise zur Bestimmung der Transmissions- und Reflexionswerte zu erläutern, soll kurz auf diese eingegangen werden.

Wird zeitharmonisch gerechnet, so kann an einem beliebigen Sensorpunkt \mathbf{P} der Poynting Vektor \mathbf{S} gewonnen werden:

$$\mathbf{S} = \mathbf{E} \times \mathbf{H} \quad (2.108)$$

Die Richtung und Größe von \mathbf{S} gibt die Richtung und Größe des Energieflusses an. Wird nun an einer Sensorfläche über das Skalarprodukt zwischen Poyntingvektor und Oberflächennormalen integriert, so erhält man die Intensität des Lichtes, welches sich in Richtung der Oberflächennormalen bewegt.

Bei der FDTD-Methode wird nun üblicherweise nicht monochromatisch gerechnet, sondern für ein breites Frequenzbündel. Um aus diesem Paket die Intensitätswerte an den Sensorpunkten für verschiedene Frequenzen zu gewinnen, bedient man sich der Fouriertransformation. Hierbei wird für die Sensorpunkte das \mathbf{E} -Feld und das \mathbf{H} -Feld je Iterationsschritt notiert und anschließend fouriertransformiert, oder in jedem Zeitschritt mit $e^{i\omega t}$ multipliziert und addiert.

In beiden Fällen erhält man nach der Transformation die Feldkomponenten für den elektrischen und magnetischen Anteil aufgeschlüsselt nach Frequenzen. Nun kann wieder das Kreuzprodukt gebildet und über eine Fläche integriert werden. Man erhält die Intensität je Frequenzpunkt für eine bestimmte Richtung. Um Reflexionswerte gewinnen zu können wird vor der Integration noch der Poyntingvektor der einfallenden Welle subtrahiert.

2. Theoretische Beschreibung photonischer Kristalle

Autokorrelation

In OpenFDTD wird ein anderer Weg bevorzugt. Da man im Experiment meistens nur Transmission und Reflexion in nullter Ordnung bestimmen kann, sollen auch nur diese berechnet werden. Für die ebene Welle in nullter Ordnung ist die Modenstruktur bekannt, es ist eine Konstante. Eine Modenprojektion der Transmissionsseite vereinfacht sich zu einer Integration über die Tangentialkomponenten in der Sensorfläche. In 2D, bei Rechnungen aufgeschlüsselt nach TE- und TM-Polarisation, reicht die Angabe einer Komponente (H_z oder E_z). Auf der Einfallsseite wird von der Modenprojektion das Quellfeld im Zeitbereich subtrahiert. Die nun gewonnene Funktion $g(t)$ für Reflexion oder Transmission kann fouriertransformiert werden. Das Betragsquadrat davon entspricht den Intensitätswerten der Reflexion bzw. Transmission aufgeschlüsselt nach ihren Frequenzkomponenten.

Statt den Weg der direkten Fouriertransformation zu gehen, wird der Umweg über die Autokorrelationsfunktion (AKF, ACF, Auto-Correlation-Function) benutzt und die Länge dieser begrenzt. Wegen der eingeschränkten AKF-Länge repräsentiert jeder Frequenzpunkt nach der Transformation ein Bündel von Frequenzen.

Die AKF ist wie folgt definiert:

$$G(t) = \text{AKF}(g(\tau)) = \int_{-\infty}^{+\infty} g(\tau)g(t + \tau)d\tau \quad (2.109)$$

Mit $g(t)$ als zeitliche Entwicklung des Feldes im Rechengebiet an den Sensorpunkten. Des weiteren gilt die Beziehung (Wiener-Khinchin-Theorem):

$$\text{FT}(\text{AKF}(g(\tau))) = |\text{FT}(g(\tau))|^2 \quad (2.110)$$

Demnach entspricht die Fourier-Transformierte der AKF dem Leistungsspektrum der Funktion selbst. Wird (2.109) diskret berechnet, so folgt:

$$G_T(n) = \frac{1}{T} \sum_{t=0}^T g(t)g(t+n) \quad (2.111)$$

Da die AKF für reelle Funktionen eine gerade Funktion ist, soll im Folgenden n durch $-n$ in der Summe ersetzt werden. Es werden ab jetzt nur AKF-Punkte im Intervall $[0, N]$ betrachtet.

$$G_T(n) = \frac{1}{T} \sum_{t=0}^T g(t)g(t-n) \quad (2.112)$$

Nun wendet man den Trick einer gleitenden AKF an, welche nichts anderes als eine Erweiterung des gleitenden Durchschnittes ist:

$$G_{T+1}(n) = \frac{1}{T+1} \sum_{t=0}^{T+1} g(t)g(t-n) = \frac{1}{T+1} \sum_{t=0}^T g(t)g(t-n) + \frac{g(T+1)g(T+1-n)}{T+1} \quad (2.113)$$

Ersetzen der ersten Summe der rechten Seite durch $G_T(n)$ führt zu:

$$G_{T+1}(n) = \frac{T}{T+1}G_T(n) + \frac{g(T+1)g(T+1-n)}{T+1}, \quad (2.114)$$

d.h. man besitzt ein iteratives Verfahren, welches aus der alten AKF G_T eine neue G_{T+1} für den nächsten Zeitschritt erzeugt. Dies passt gut zum Iterationsverfahren der FDTD-Methode. Man benötigt nur einen Speicher der letzten N Funktionswerte von g . Üblicherweise wird die Normierung nicht während der AKF-Berechnung durchgeführt. Da $G(0)$ dem Mittelwert der Funktion entspricht, ist dieser ein geeigneter Normierungsfaktor. Für spätere Transmissions- und Reflexionssimulationen werden unnormierte AKFs benutzt. Die Intensitätswerte erhält man durch eine Relativierung gegen die AKF der Quellfunktion. Die Funktion vereinfacht sich zu:

$$G_{T+1}(n) = G_T(n) + g(T+1)g(T+1-n) \quad (2.115)$$

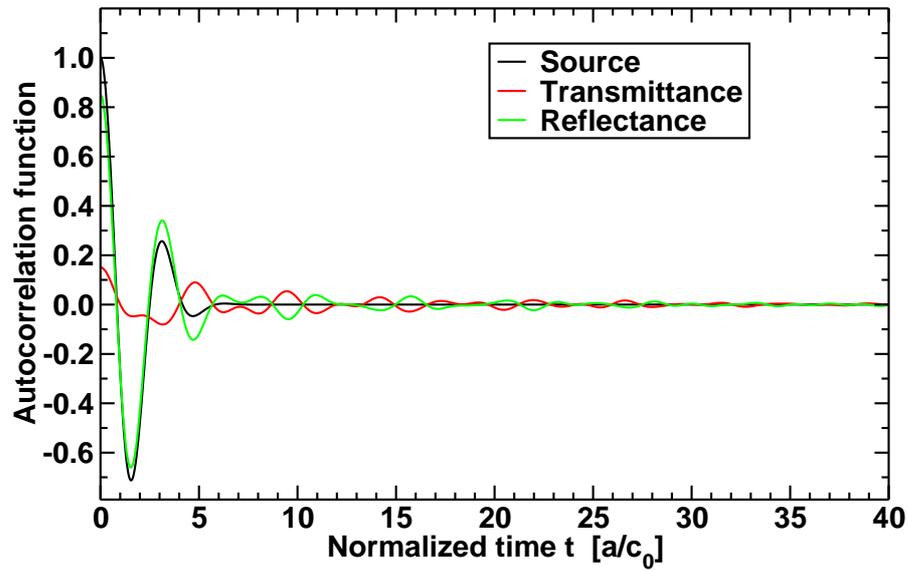
Durch die Festsetzung der AKF-Länge wird die Frequenzauflösung des Leistungsspektrums einer anschließenden diskreten Fouriertransformation festgesetzt. Dem Fouriertransformationsalgorithmus wird dabei noch mitgeteilt, dass es sich um eine reelle und symmetrische Funktion handelt. Bei einer üblichen AKF-Größe von $2^{16} = 65536$, einer Diskretisierung von $a/64$ und einem Courant-Faktor von $1/\sqrt{2}$ ergibt sich ein normierter Zeitwert von $\tau_{\max} = 724$. Dies entspricht einer Frequenzauflösung von $\Delta f = 1,3810^{-3}$. Die AKF fällt aufgrund ihrer Natur bei der Analyse eines Pulses relativ schnell ab. Siehe hierzu die schwarze Kurve des Eingangssignals (Quellfunktion) in Abbildung (2.15). Es würde somit ein Rechteckfenster für die DFT ausreichen. Werden Zeitsignale analysiert, welche durch resonante Effekte erzeugt wurden, dann bleiben endliche Werte selbst für große n bzw. τ noch übrig. Deswegen ist die Anwendung einer 3-Term-Blackman Fensterfunktion

$$f(n) = 0,42 - 0,5 \cos\left(\pi \frac{n+N}{N}\right) + 0,08 \cos\left(2\pi \frac{n+N}{N}\right), \quad (2.116)$$

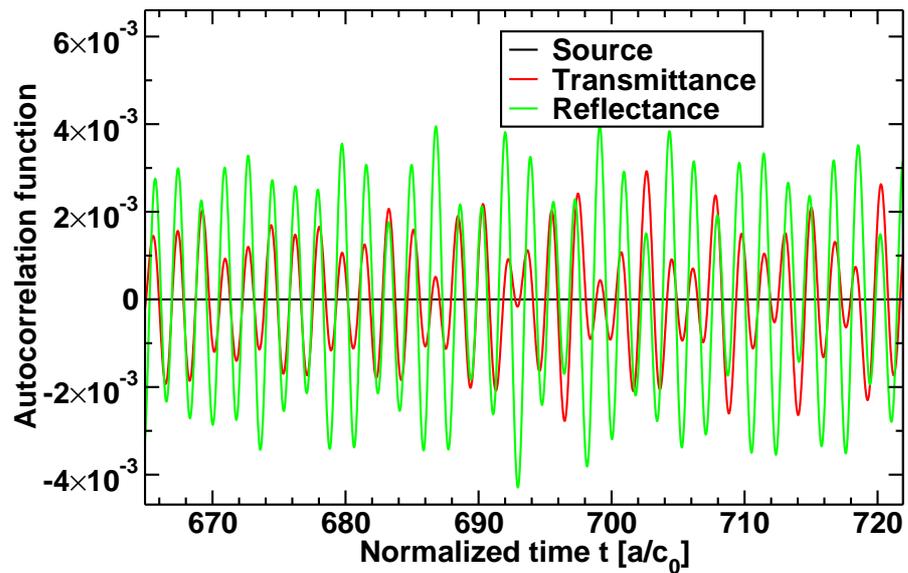
mit N als AKF-Länge, vor Durchführung der DFT sinnvoll. Die Frequenzschätzung der gleitenden AKF verbessert sich mit der Anzahl der Zeitschritte. Die AKF bietet sich für die Analyse von langsamen Gruppengeschwindigkeiten sowie deren Dispersion an, denn hierbei wählt man am Anfang die Anzahl der AKF-Punkte und beschränkt sich dafür in der Frequenzauflösung. Die benötigte Speichermenge bleibt begrenzt. Nun kann zu jedem Iterationsschritt ein Spektrum aus der AKF erzeugt werden. Damit kann man die Reflexion und Transmission eines Frequenzpunktes zeitabhängig auftragen. Dieser Frequenzpunkt ist eine gewichtete Mittelung über das Frequenzintervall $\Delta f = 1/\tau_{\max}$.

Über die Steigung der Transmission, aufgetragen gegenüber der Zeit, lassen sich Rückschlüsse auf die Dispersion des Materials für das entsprechende Frequenzintervall ziehen. Die Bezeichnung Gruppengeschwindigkeit hat hierbei auch einen Sinn, denn es kann die Geschwindigkeit eines Frequenzbündels beobachtet werden. In Abbildung (2.16) ist ein Beispiel zu finden. Es wurde ein 2D-hexagonaler PhC mit Luftlöchern von $r/a = 0,36$ im

2. Theoretische Beschreibung photonischer Kristalle



(a) Beginn der AKF. Die Werte fallen sehr schnell ab.



(b) Ende des AKF-Signals. Es sind nur noch sehr geringe Amplituden gegenüber dem Startwert zu erkennen.

Abbildung 2.15.: Autokorrelationssignale einer PhC-Simulation. Ausschnitt vom Funktionsbeginn (a) und dem Ende (b) der AKF.

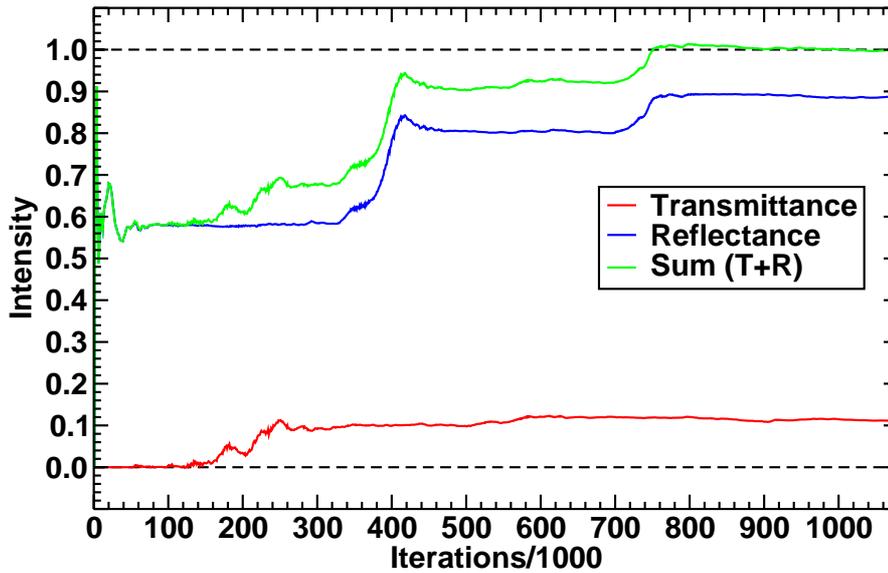
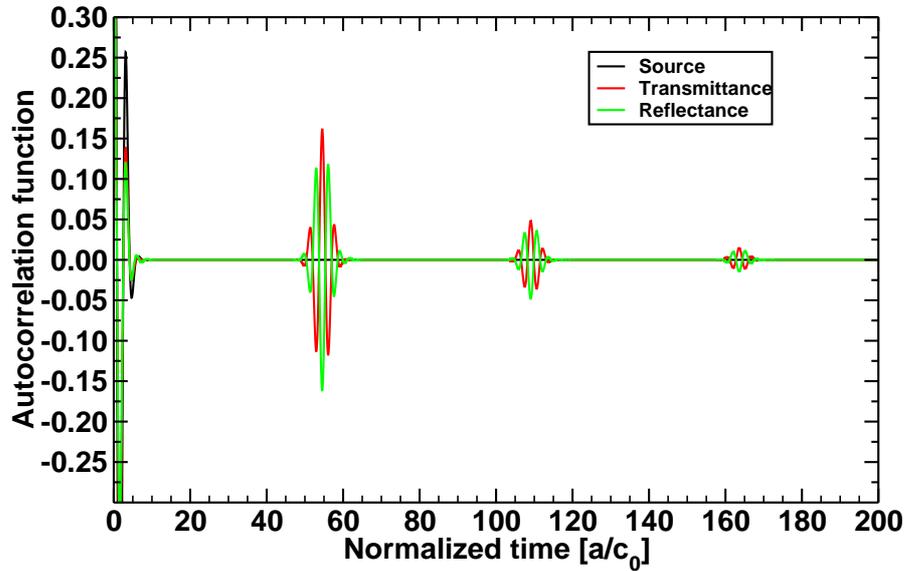


Abbildung 2.16.: Aufgetragen wurde die Intensität der Transmission und Reflexion sowie deren Summe über die Iterationsdauer. Viele Programme brechen schon nach $128 \cdot 10^3$ Iterationen ab. Photonischer Kristall mit $r/a = 0,36$ und $\epsilon = 11,6$. Beobachtete Frequenz $a/\lambda = 0,22$.

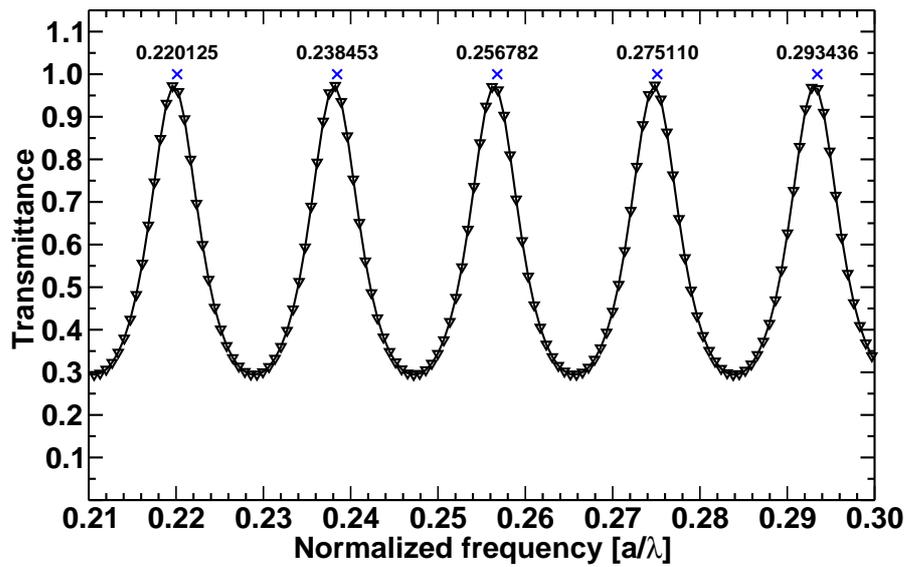
hochbrechenden Material von $\epsilon = 11,6$ simuliert. Alle 1000 Iterationen wurde ein Spektrum berechnet. Für jedes Spektrum wurden danach für eine Frequenz, z.B. $a/\lambda = 0,220$, die Werte für Transmission und Reflexion herausgefiltert und über die Iterationsnummer aufgetragen. Man kann schön erkennen, wie der Puls durch den Kristall wandert und Energie an der Transmissionsseite abgibt. Anschließend wird ein Teil der Energie wieder reflektiert und erhöht die Intensität an der Eingangsseite ein wenig. Dort wird er wiederum reflektiert und wandert zur Transmissionsseite. Dieser Ablauf wird sich unendlich oft wiederholen. Jedesmal gibt der Puls einen Teil seiner Energie über die Grenzschichten ab. Aus den Laufzeitdifferenzen der Übergangspunkte, welche zu einer signifikanten Intensitätserhöhung führen, und dem Abstand der Sensorpunkte kann man auf die Gruppengeschwindigkeit der beobachteten Frequenz schließen. Die Steigung bzw. Art der Intensitätsverläufe gibt Auskunft über die Dispersion des Frequenzbündels. Diese Umlaufzeiten werden später im Anhang B verwendet um die so ermittelte Gruppengeschwindigkeit mit der aus einem Banddiagramm gewonnenen zu vergleichen.

Ein weiterer Vorteil davon, die Reflexion und Transmission im Zeitbereich zu lassen, begründet sich in der Analyse resonanter Effekte (z.B. Fabry-Perot-Effekte). Wie schon im Abschnitt über die Eigenfrequenzanalyse mittels FDTD (Kapitel 2.2.5) beschrieben, kann man nun auf das Zeitsignal die Methode der harmonischen Inversion anwenden. Siehe hierzu Abbildung (2.17). Die Analyse im Frequenzbereich nach einer Fouriertransformation erlaubt nur die Feststellung der Maxima in der Auflösung der Fouriertransformationspunkte, wohingegen die harmonische Inversion genauere Ergebnisse liefert. Zur

2. Theoretische Beschreibung photonischer Kristalle



(a) Autokorrelationsfunktion



(b) Fouriertransformation (schwarze Kurve) und harmonische Inversion des Zeitsignals (blaue Kreuze)

Abbildung 2.17.: Vergleich zwischen Frequenzbereichsauswertung und harmonischer Inversionsmethode anhand eines Fabry-Perot-Resonators. Die Dicke der Schicht beträgt $8a$.

Veranschaulichung wird eine Transmissionssimulation eines dünnen Plättchens aus Silizium durchgeführt und die Frequenzlage der Maxima verglichen. Aus dem höchsten Transmissionswert der Fouriertransformierten im interessanten Frequenzbereich erhalten wir einen Wert von $f_{\text{Fourier}} = 0,2195898$. Die harmonische Inversion liefert einen Wert von $f_{\text{harminv}} = 0,2201250$, was einer Abweichung von ca. 0,3% entspricht. Halbierung der AKF-Auflösung liefert immerhin den Wert $f_{\text{harminv}} = 0,220047$. Aus dem Abstand zweier Maxima kann wiederum auf die Dicke des Plättchens zurückgerechnet werden. Es folgt ein $d_{\text{ist}} \approx 8,01$. Das Plättchen wurde mit $d_{\text{soil}} = 8,00$ angegeben. Der Fehler von 0,01 entspricht 0,64 Pixel und ist somit kleiner als die räumliche Diskretisierung.

2.5.2. Berechnung von $\epsilon(\omega)$ mit PWEM

Bisher wurde mit Hilfe der PWEM nur Materie betrachtet, welche einen frequenzunabhängigen Brechungsindex besitzt. Dies stimmt in der Regel nur in einem kleinen Frequenzfenster. Um den Brechungsindex als Funktion der Frequenz zu beschreiben, gibt es viele Modelle. Eines der Einfachsten ist das Drude Modell (Kapitel 2.2.5):

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_{\infty}(1 - \omega_0^2/\omega^2) \quad (2.117)$$

Ein PhC aufgebaut aus einem frequenzabhängigen Material lässt sich nur schwer durch die Eigenwertgleichung in der H-Darstellung lösen. Für die E-Darstellung der Wellengleichung und das Drude-Modell ergibt sich:

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{E} = \omega^2 \epsilon(\mathbf{r}) \mathbf{E} \quad (2.118)$$

$$= \omega^2 \epsilon_{\infty}(\mathbf{r}) [1 - \omega_0^2(\mathbf{r})/\omega^2] \mathbf{E} \quad (2.119)$$

$$= \omega^2 \epsilon_{\infty}(\mathbf{r}) \mathbf{E} - \epsilon_{\infty}(\mathbf{r}) \omega_0^2(\mathbf{r}) \mathbf{E} \quad (2.120)$$

Mit $\epsilon(\mathbf{r})$ als ortsabhängige Materialfunktion und $\omega_0(\mathbf{r})$ als ortsabhängige Plasma-Frequenz. Die Plasma-Frequenz ist null für dispersionsfreies Material in der Einheitszelle. Stellt man die Gleichung um so folgt:

$$[\nabla \times \nabla \times + \epsilon_{\infty}(\mathbf{r}) \omega_0^2(\mathbf{r})] \mathbf{E} = \omega^2 \epsilon_{\infty}(\mathbf{r}) \mathbf{E} \quad (2.121)$$

Diese Eigenwertgleichung lässt sich nun wiederum durch die gleichen Matrixalgorithmen wie die dispersionfreie Wellengleichung lösen.

Hat die Materialfunktion ein kompliziertes Aussehen, so muss eine Gradienten-Methode benutzt werden: Ein Eigenfrequenzlöser liefert eine Frequenz des n-ten Bandes für ein festes ϵ . Hierbei wird zuerst eine Frequenz geraten und die korrespondierende dielektrische Zahl benutzt. Man definiert den Abstand $\Delta\omega$ als

$$\Delta\omega = \omega_{\text{start}} - \omega_n(\text{PWEM}(\epsilon(\omega_{\text{start}}))) \quad (2.122)$$

und fordert $\Delta\omega \rightarrow 0$. Um dies zu erreichen, muss ω_{start} variiert werden um sich ω_n zu nähern. Diese Vorgehensweise ist beschränkt auf monoton fallende oder steigende Funktionen. Lokale Extremstellen können das Gradientenverfahren zum Abbrechen zwingen

2. Theoretische Beschreibung photonischer Kristalle

ohne eine Lösung zu hinterlassen. Die Wahl der Startfrequenz und der Suchränder ist hierbei kritisch.

Für PhCs bestehend aus den üblichen Materialien (Si , SiO_2 , $PMMA$) und den betrachteten Frequenzbereichen ($1,5\mu m - 10,0\mu m$, $400nm - 1000nm$) darf ein konstantes Epsilon angenommen werden. Wird aber ein Material mit hoher Dispersion verwendet, so muss man die Bandstruktur wie oben beschrieben berechnen. Titandioxid ist ein solches interessantes Material. Mit ihm kann man Opale invertieren. Man erhält ein Gerüst aus Titandioxid mit Luftlöchern in fcc-Anordnung. Titandioxid gibt es in verschiedenen Modifikationen: amorph, Anatas, Rutil, Brookit. Jeder dieser Zustände hat seine eigene frequenzabhängige dielektrische Konstante. Aus mehreren Reflexionsmessungen von selbst hergestellten invertierten Opalen aus Titandioxid mit verschiedenen Gitterkonstanten wurde die Dispersionsrelation

$$\epsilon = 12,386 - 0,0096119\lambda + 3,2089 \cdot 10^{-6}\lambda^2 \quad (2.123)$$

abgeschätzt, mit λ angegeben in nm .

Damit ergeben sich für Titandioxid z.B. $\epsilon(1000nm) = 5,98$ und $\epsilon(400nm) = 9,05$. Erst ab $\epsilon > 8$ existiert eine totale Bandlücke¹⁰ bei $f = 0,9$.

Es ist ersichtlich, dass die Wahl der Gitterkonstante einen entscheidenden Einfluss auf das Aussehen der Bandstruktur hat. Die Bandstruktur ist damit nicht mehr ohne weiteres skalierbar. In Abbildung (2.18) wurde diese für $a = 400nm$ und $a = 500nm$ aufgetragen. Es zeigt sich, dass sich nur bei kleiner Gitterkonstante eine totale Bandlücke ausbildet (bei $f = 0,88$).

2.5.3. Äquifrequenzflächen mit PWE

Im Kapitel 2.3 wurde das Konzept der Äquifrequenzflächen eingeführt. Diese können relativ einfach für ein homogenes Material bestimmt werden. In diesem Abschnitt wird gezeigt, wie man mit dem PWE-Verfahren Äquifrequenzflächen für PhCs berechnet. Es ist, wie in der Festkörperphysik bekannt, zu erwarten, dass sie keine Kreisform mehr besitzen sondern sich zu interessanten Mustern verändern. Um sie zu berechnen, muss man die Fragestellung an den PWE-Algorithmus umkehren. Für Bandstrukturrechnungen wurde bis jetzt der Blochvektor gesetzt und errechnet, welche Frequenzen dazu passen. Jetzt muss umgekehrt gefragt werden: Die Frequenz wird fest vorgegeben und nach dem zugehörigen Blochvektor gesucht (ähnlich der Transfermatrixmethode). Das PWE-Verfahren kann diese Frage nicht direkt beantworten. Es nähert sich der vorgegebenen Zielfrequenz über die Variation des Blochvektors an. Dabei wird in einem bestimmten Bandbereich gesucht. Wird kein Blochvektor nach einer vorbestimmten Iterationsanzahl gefunden, dann bricht das Iterationsverfahren mit einem Fehler ab. Es werden nur reelle Vektoren bestimmt. Abklingende imaginäre k -Vektoren, wie sie in den Bandlücken auftreten, können nicht berechnet werden. Für jede Richtung in der Brillouin-Zone wird ein k -Vektor zur Frequenz gesucht. Dies ist in 2D relativ einfach zu bewerkstelligen. Man definiert eine Liste von k -Punkten am Rande der Brillouin-Zone; im hexagonalen PhC

¹⁰Bandlücke für alle Kristallrichtungen und Polarisationen

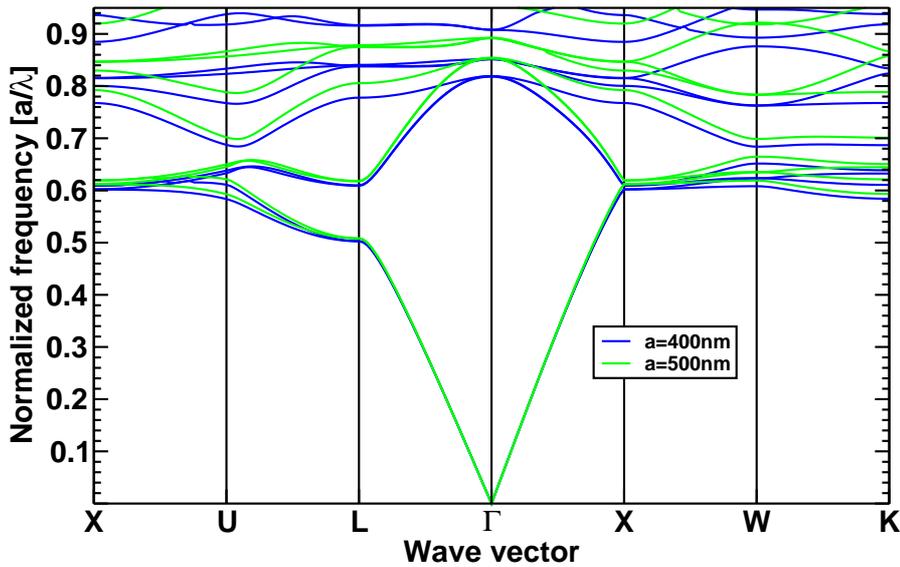


Abbildung 2.18.: Bandstrukturvergleich von zwei verschiedenen Gitterkonstanten. Die dielektrische Funktion wurde nach (2.123) berechnet. Für $a = 400\text{nm}$ tut sich eine komplette Bandlücke bei $f = 0,88$ auf.

Punkte zwischen **K** und **M**. Nun lässt man den k -Vektor suchen, welcher sich zwischen einem Vektor aus der Liste **KM** und Γ befindet und die Zielfrequenz liefert. Ergebnisse sind in Abbildung (2.19) zu finden. Es ist schön zu erkennen, dass die Äquifrequenzflächen im ersten Band kreisförmig sind, also einem effektiven Medium (Kapitel 2.4 und Anhang B) ähneln. Mit steigender Frequenz werden sie größer. Sie gelangen schließlich an die Grenze der Brillouin-Zone, wo sie aufbrechen und sich Stop-Gaps für bestimmte Richtungen ausbilden. An diesen aufgebrochenen Bändern wird unter anderem negative Brechung beobachtet. Die Richtung der Lichtausbreitung ist durch den Oberflächenvektor der EFS gegeben. An den verkrümmten Flächen ändert sich die Oberflächennormale nun sehr schnell. Mehr zum negativen oder anormalen Brechungsverhalten ist in Kapitel 4 zu finden. Im zweiten Band werden die Äquifrequenzflächen von außen nach innen hin kleiner mit steigender Frequenz. Sie sind auch nicht mehr kreisförmig und weisen Abflachungen auf. Im dritten Band werden die Flächen wieder größer mit steigender Frequenz. Die Äquifrequenzflächen sind nun kaum mehr kreis- sondern sternförmig. Auf gleichem Weg, nur mit erheblich höherem Rechenaufwand, lassen sich auch die Äquifrequenzflächen eines fcc Kristalls darstellen. Dazu wird ein Vektor aufgesetzt, welcher länger als jeder andere Vektor in der Brillouin-Zone ist. Diesen lässt man in einer spiralförmigen Kurve auf die Ebene senkrecht zum Startvektor zu rotieren. In jedem Schritt wird dann der Vektor auf die tatsächliche Länge ($=k_{\max}$) gekürzt, so dass er auf den Rand der Brillouinzone zeigt. Nun kann der EFS-Vektor zwischen dem Γ -Punkt und dem berechneten k_{\max} gesucht werden. Wie in Abbildung (2.20) zu sehen ist, sind die Äquifrequenzflächen der höheren Bänder nach innen gewölbt. Dies sagt ein ungewöhnliches Lichtbrechungsver-

2. Theoretische Beschreibung photonischer Kristalle

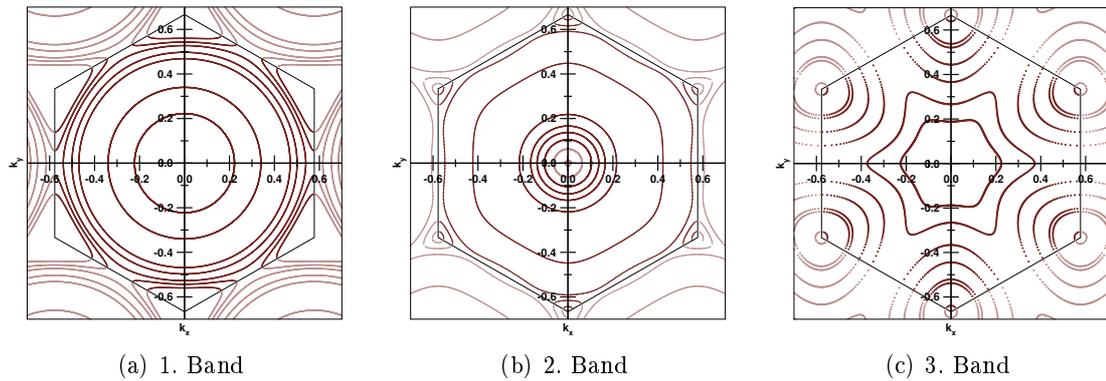
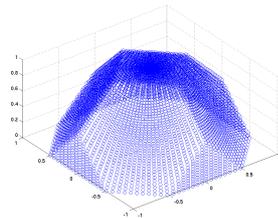
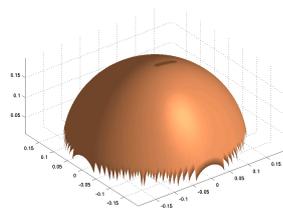


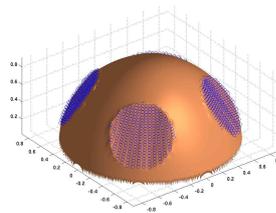
Abbildung 2.19.: Äquifrequenzflächen verschiedener Frequenzen in den ersten drei Bändern. 2D-hexagonaler Kristall, TM-Mode, Luftlöcher ($r/a = 0,41$) in Silizium ($\epsilon = 11,6$). Mit steigender Frequenz werden die Kreise größer (a). Zum Rand der Brillouinzone hin verformen sich die Kreise und brechen schließlich auf. Im zweiten Band (b) werden die Flächen mit steigender Frequenz kleiner. Im dritten Band (c) entstehen schließlich komplizierte Flächen, z.B. Sterne.



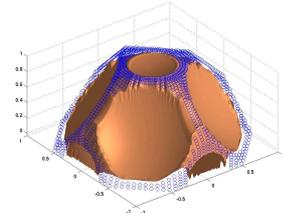
(a) Brillouinzone



(b) 1. und 2. Band $f = 0,15$



(c) 2. Band $f = 0,68$



(d) 3. Band $f = 0,78$

Abbildung 2.20.: Äquifrequenzflächen eines fcc Kugelkristalls aus Siliziumdioxidkugeln ($\epsilon = 2, r/a = 0,354$). Die Kreise markieren Punkte auf der Brillouinzone in denen ein Stopgap vorhanden ist.

halten voraus, da die Richtung der gebrochenen Strahlen durch die Oberflächenvektoren gegeben wird. Anwendungen von Opalen sind z.B. in [21] zu finden.

2.6. Zusammenfassung

In diesem Kapitel 2 wurden die Grundlagen für die Simulation photonischer Kristalle gelegt. Insbesondere wurde auf die Plane-Wave-Expansion-Methode zur Berechnung von Bandstrukturen (Kapitel 2.2.2) und Äquifrequenzflächen (Kapitel 2.5.3) eingegangen. In Kapitel 2.5.2 wurde gezeigt, wie man eine Materialdispersion in das vorhandene Verfahren integrieren kann. Mittels der Finite Elemente Methode in Kapitel 2.2.3 wurden ebenso Bandstruktur und Feldverteilung bestimmt. Die Finite-Difference-Time Domain-Methode wurde in Kapitel 2.2.5 und 2.5.1 als genereller Lösungsalgorithmus der Maxwell Gleichungen im Zeitbereich eingeführt. Die Transfermatrixmethode wurde auf den 1D Fall angewandt (Kapitel 2.2.6).

Im Folgenden wird gezeigt, wie man diese Techniken anwendet um neue Effekte, nämlich

- resonante Oberflächenzustände, Kapitel 3.1
- deren Anwendung als Gassensor, Kapitel 3.2
- negative Brechung, im Kapitel 4

an PhCs berechnet. Diese Vorhersagen werden mit Messungen verglichen. Es werden zwei Frequenzbereiche genutzt. Zum einen der infrarote Wellenlängenbereich im Kapitel 3.2 und zum anderen der Mikrowellenbereich im Kapitel 4.3 und im Anhang C. Zum Simulieren werden verschiedene Tools eingesetzt (PWE, Transfermatrix, FEM, FDTD). Der Rechenaufwand und Speicherbedarf variiert dabei stark. Als Hardware stehen Einzelplatz-Workstations, welche bei Bedarf zu einem Ethernet-Cluster zusammen geschaltet werden können, und eine 4-Wege-Opteron-Workstation, welche einen linearen Speicher von 16GB bereitstellt, zur Verfügung. Für FEM-Analysen wird hauptsächlich die Opteron-Workstation eingesetzt.

2. Theoretische Beschreibung photonischer Kristalle

3. Oberflächenzustände

Im Kapitel 2 über Theorie wurden die Grundlagen dargelegt, mit denen man PhCs berechnen kann. Nun werden die Techniken auf Oberflächenzustände angewandt. Wie man diese Zustände findet und charakterisiert wird im Kapitel 3.1 betrachtet. Es wird das 2D-hexagonale Kristallsystem mit Luftlöchern im hochbrechenden Material (Silizium mit $\epsilon = 11,6$) untersucht. Die verwendeten Kristallparameter und ermittelten Oberflächenzustände sind ein Vorgriff auf Kapitel 3.2. In diesem werden diese Parameter ergänzt, um schließlich einen PhC-Gassensor zu entwickeln.

3.1. Theoretische Beschreibung von Oberflächenzuständen

Jeder reale Kristall ist endlich, d.h. er besitzt Ränder. Bei einem 2D-Kristall gibt es die Ränder in dritte (z -)Dimension, welche vernachlässigbar sind, wenn der PhC eine gewisse Dicke ($d_z \gtrsim 20\lambda_0$) aufweist. Bei entsprechender Tiefe des Kristalls kann von einem 2D-Verhalten gesprochen werden. Die Ankopplung von PhC-Moden an Luft über und unter dem Kristall wird über die Lichtgerade im Banddiagramm angegeben, d.h. Moden überhalb der Lichtgeraden werden an die Umgebung koppeln und Energie abgeben. Sie werden nicht lange geführt.

Ein 2D-PhC besitzt aber auch Ränder in der Ausbreitungsebene, an der Grenze zwischen Luft und PhC. Diese Ränder können Oberflächenzustände induzieren. Sie erlauben damit Zustände in der Bandlücke, die sonst verboten wären, oder verändern die Transmissionseigenschaften der Bänder. Im folgenden Kapitel sollen diese Zustände charakterisiert werden. Durch geschickte Wahl der Terminierung des PhC erreicht man eine erhöhte Kopplung zwischen Luft und PhC an den Bandkanten. Dadurch wird nicht nur die Transmissionseigenschaft des betrachteten sondern aller Bänder verändert. Dieser Einfluss macht sich auch für das erste Band bemerkbar. Der Zusammenhang zwischen Oberflächenterminierung und einer Effektiv-Medium-Theorie im ersten Band wird im Anhang B ab Seite 119 untersucht. Nach der Motivation und Einführung eines neuen Oberflächenabschlusses im Kapitel 3.1.1 werden die daraus resultierenden Oberflächenmoden im Kapitel 3.1.2 charakterisiert. Es wird deren Eigenschaft eine Transmission im Stopgap zu erzeugen untersucht. Ein Modell, welches eine verbesserte Kopplung zwischen Luftmode und PhC-Mode durch den Zwischenschritt einer Oberflächenmode erklärt, wird entwickelt und im Kapitel 3.1.3 veranschaulicht.

3.1.1. Anti-Reflexion-Layer-Konzept

In der Optik gibt es etablierte Verfahren um Licht möglichst effektiv in ein Bauteil zu leiten. Es werden Taper genutzt, mit denen ein Lichtstrahl verjüngt wird, so dass

3. Oberflächenzustände

er in einen schmalen Wellenleiter passt. Als Entspiegelung wird eine Anti-Reflexions-Beschichtung u. a. auf Brillengläsern aufgetragen, um Reflexionen zu vermeiden. Diese Konzepte basieren meist auf der Annahme, dass sich das Licht durch eine ebene Welle beschreiben lässt.

Dies gilt nicht im PhC. Um Licht in einen PhC hinein zu bekommen, gibt es verschiedene Ansätze. Es gibt die Möglichkeit, Emitter [22] in den PhC zu platzieren, welche durch ein äußeres Feld angeregt werden. Dieser Ansatz wird verfolgt, wenn das Ziel ein Laser ist, da die Modendichte (Density of States, DOS) zu den Bandkanten hin steigt. Mit höher werdender DOS ergibt sich laut Fermis Goldener Regel eine höhere Übergangswahrscheinlichkeit. Damit lassen sich theoretisch Laser mit sehr niedriger Laserschwelle erzeugen. In der Regel wird Licht aber nicht im PhC erzeugt, sondern extern zugeführt. Dies geschieht klassischerweise in einem Spektrometer. Im IR-Bereich und vor allem im MIR ($2 - 20\mu\text{m}$ Wellenlänge) dient hierzu ein FTIR-Spektrometer. Idealerweise wird der Lichtstrahl vom Spektrometer so aufbereitet, dass er einer ebenen Welle gleicht. Diese wird vom zu untersuchenden Objekt zum Teil reflektiert, transmittiert, gestreut und natürlich auch absorbiert. Im ungestörten PhC treten idealerweise keine Absorptions- und Streueffekte (bei niedrigen Frequenzen) auf. Somit wird die Summe von Transmission und Reflexion zu eins.

Im unteren Bereich des ersten Bandes darf eine Effektiv-Medium-Theorie angewandt werden, um auf einen effektiven Brechungsindex und damit auf die Transmissionseigenschaften zu schließen (siehe Kapitel 2.4). Folgt man dem Band hin zu einem Hochsymmetriepunkt, so wird dieses flacher. Ein flacheres Band führt zu einer langsameren Gruppengeschwindigkeit. Dies entspricht wiederum einem Impedanzsprung, weshalb ein Großteil der Energie reflektiert wird. Der Einfachheit halber soll hier das Reflexionsgesetz nach Snellius für den senkrechten Einfall von Luft angegeben werden:

$$R = \left| \frac{n_{\text{gr}} - 1}{n_{\text{gr}} + 1} \right|^2 \quad (3.1)$$

n_{gr} entspricht dabei dem Brechungsindex gegeben durch den Kehrwert der Gruppengeschwindigkeit ($n_{\text{gr}} = c_0/v_{\text{gr}}$). Wenn man nun Effekte im PhC, welche auf langsamer Gruppengeschwindigkeit beruhen, anwenden möchte, ergibt sich hieraus ein Problem. Um auf der Ausgangsseite noch messbare Intensitäten zu erhalten, muss daher mit viel Leistung auf den Kristall eingestrahlt werden. Würde man nach dem klassischen Ansatz versuchen, diese Impedanzfehlانpassung zu vermeiden, so müsste man den Brechungsindex adiabatisch ausgehend von Luft vergrößern. Dies ist aber nur für Moden mit hohem Energieanteil in der nullten Fourierkomponente möglich. Bänder höherer Ordnung haben diese Eigenschaften nicht. Somit ist die adiabatische Taper-Idee nicht anwendbar. Ein neues Konzept musste im Rahmen meiner Dissertation entwickelt werden.

Dieses Konzept wird im Weiteren Anti-Reflexions-Schicht (ARL, Anti-Reflection-Layer), in Anlehnung an die klassische Anti-Reflexions-Beschichtung (ARC, Anti-Reflection-Coating, $\lambda/4$ -Plättchen), genannt. Siehe hierzu auch Abbildung 3.1. Die Handhabung eines $\lambda/4$ -Plättchens im PhC ist etwas komplizierter, da eine komplizierte Phasenfront der Moden vorliegt. Bei der Beschreibung der Kopplung wird der Umweg über Oberflächen-

3.1. Theoretische Beschreibung von Oberflächenzuständen

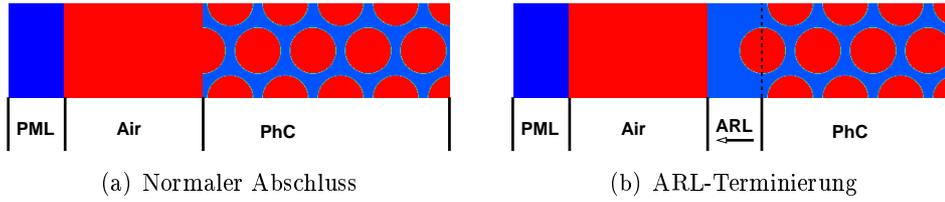


Abbildung 3.1.: Terminierungen des PhCs. Gemessen wird die ARL von der Mitte der letzten Pore bis zum Übergang Silizium/Luft. In (a) ist $d_{\text{ARL}} = 0,00$ und in (b) $d_{\text{ARL}} = 1,00$. Ausschnitt aus einer FDTD-Simulation. Eingestrahlt wird von links. Hexagonales Kristallsystem mit Luftlöchern von $r/a = 0,42$ in Silizium ($\epsilon = 11,6$). Der Kristall ist in $\Gamma\mathbf{K}$ orientiert. Die periodischen Randbedingungen wurden in y -Richtung appliziert. Farbkodierung: PML ist dunkelblau, Luft ist rot und Silizium hellblau.

moden benutzt. Diese werden durch die Wahl der Oberflächenterminierung erzeugt. Oberflächenzustände an PhCs sind schon länger in der Literatur bekannt [23, 24, 25]. Auch die Abstrahlcharakteristik eines PhC-Wellenleiters reagiert empfindlich auf die Oberflächenterminierung [26]. Mit einem passenden Abschluss lässt sich eine Strahlfokussierung erreichen. Vor allem wurde bis jetzt dieser Effekt für kurze PhCs untersucht [27] in denen die Oberflächenmoden beider Grenzflächen durch die Bandlücke miteinander koppeln können. Mihi et. al. [28] haben diesen sogar in der Bandlücke von invertierten Opalen nachgewiesen und berechnet. Die Anwendung direkt an der Bandkante wurde bisher noch nicht untersucht.

Eine Oberflächenmode soll nun gesucht werden, welche eine Feldverteilung ähnlich der Moden an der unteren Bandkante eines Bandes in $\Gamma\mathbf{K}$ -Richtung besitzt. Dies ist ein Vorgriff auf Kapitel 3.2. Dort wird diese ARL-Terminierung genutzt, um Licht in einen PhC zu bekommen, welches dort von einem Gas absorbiert wird. Der Oberflächenzustand muss also in Luft die Form einer ebenen Welle und im Kristall die einer PhC-Mode besitzen. Die Oberflächenmode soll als Vermittler zwischen der freien Luft- und der PhC-Mode dienen. Zusätzlich muss die PhC-Terminierung leicht herstellbar sein; z.B. idealerweise während des Ätzprozesses eines 2D-PhC, oder durch einfache Säge-Anweisungen in einer mechanischen Bearbeitung.

Im Folgenden werden unterschiedliche ARL-Dicken auf ihre Eigenschaften bezüglich der Kopplung von Oberflächenmoden untersucht. Die Dicke $d_{\text{ARL}} = 0$ ist definiert als ein Schnitt durch die Mitte der Poren der letzten Porenreihe. Diese Terminierung lässt sich durch Brechen entlang der Hochsymmetrierichtung realisieren. Wird der Schnitt nicht durch die Mitte sondern etwas weiter zur Luft hin durchgeführt, also noch etwas Silizium bzw. hochbrechendes Material stehen gelassen, so erhält man positive Werte z.B. $d_{\text{ARL}} = 0,2$. Übersteigt die ARL-Dicke den Radius der Randpore, so bleibt eine glatte Koppelkante übrig (Abbildung 3.1)). Dies ist mit einem Ätzverfahren über so genannte Ätzgräben [29] realisierbar, wohingegen kleinere ARL-Dicken nicht produzierbar sind; oder nur in einem Folgeprozess durch Laserschneiden, Trockenätzen, Brechen oder An-

3. Oberflächenzustände

schleifen [30]. Damit Poren und Koppelkante gerade wachsen können, wird die mögliche ARL-Dicke auf einen bestimmten Bereich begrenzt: $d_{\text{ARL}} = [0,4; 1,1]$. Eine größere Dicke wäre auch nicht sinnvoll, da die PhC-Mode sich exponentiell abklingend der Luftmode annähert. Um nun die richtige ARL-Dicke zu finden muss bei den Rechnungen auf numerische Artefakte geachtet werden, welche leicht ein falsches positives Verhalten suggerieren. Ein beliebter Fehler bei Rechnungen im Frequenzraum sind Fabry-Perot-Effekte, d.h. z.B für eine dünne homogene Siliziumschicht ist die Transmission für bestimmte Frequenzen maximal und für andere minimal (Abbildung 2.17), obwohl sie bei ca. 50% liegen sollte. Wird die Schicht dicker, so rücken diese Minima und Maxima im Frequenzraum dichter zusammen. Trifft man mit der ausgewählten Frequenz auf ein Maximum, so erhält man hohe Transmission, obwohl nur leicht frequenzverschoben ein Minimum liegt.

Dieses Problem kann man über einen Frequenzfilter umgehen. Das gewonnene Transmissionsspektrum in Abhängigkeit der Frequenz wird selbst fouriertransformiert, die höheren Fourierkomponenten eliminiert und wieder zurücktransformiert, oder man korreliert mit einer Fensterfunktion direkt im Frequenzraum. Oszillationen, welche einen kleineren Abstand haben als die Frequenzfilterbreite, werden herausgemittelt. OpenFDTD führt diese Transformation im Zeitbereich durch. Ein Transmissionsspektrum gewonnen über einen stationären Löser (Transfermatrix, FEM) muss dementsprechend nachbehandelt werden.

Im folgenden Kapitel werden mögliche Oberflächenzustände in $\Gamma\mathbf{K}$ charakterisiert und eine Notation für diese eingeführt.

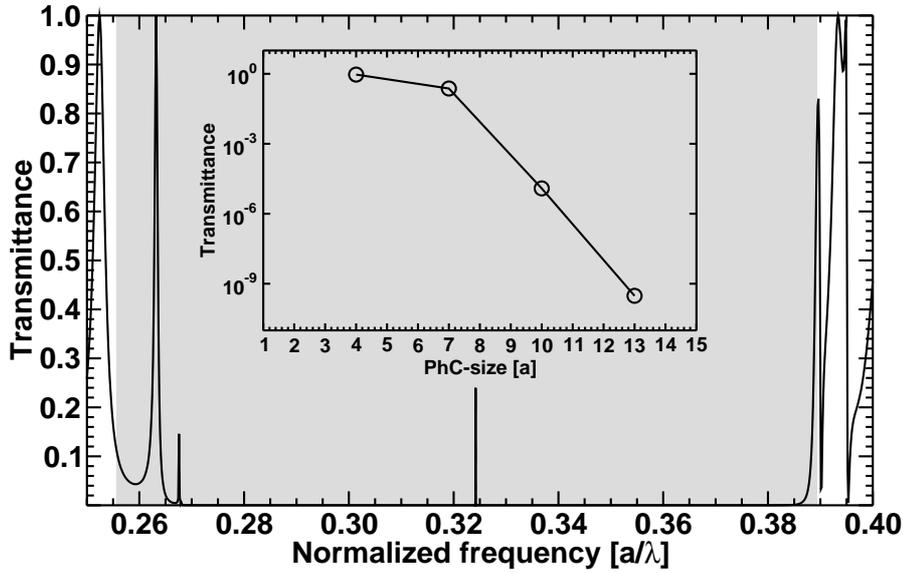
3.1.2. Charakterisierung von Oberflächenzuständen

Für die Charakterisierung der durch die ARL induzierten Oberflächenmoden sollen zwei verschiedene Methoden genutzt werden, zum einem die PWEM und zum anderen die FEM. Dies dient zur Absicherung der Ergebnisse.

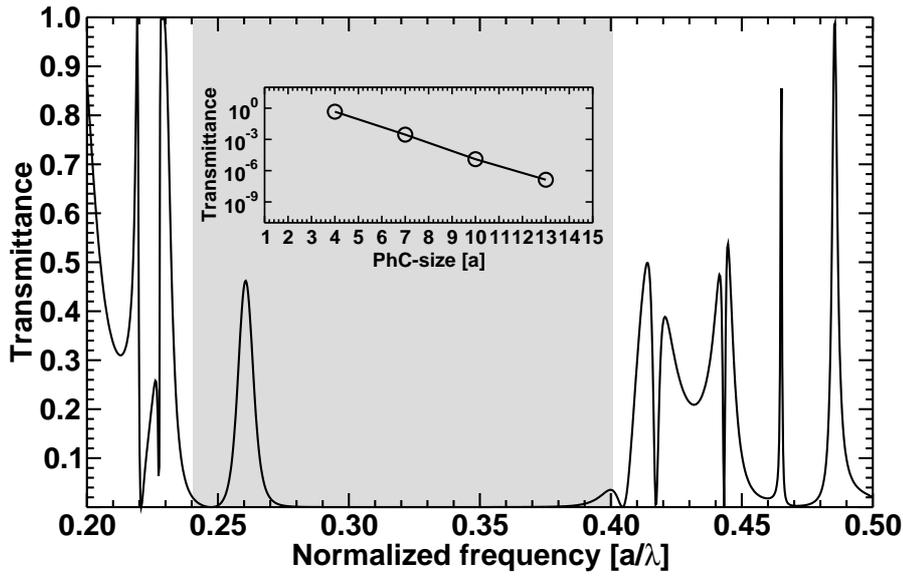
Bestimmt man die Transmission in der Bandlücke, bzw. im Bereich nicht koppelnder Bänder, so kann man für kleine Kristalle einen signifikanten Transmissionswert finden, der auf koppelnde Oberflächenmoden beider Grenzflächen zurückzuführen ist. In Abbildung <3.2>(a) und <3.2>(b) wurde die Transmission durch einen dünnen Kristall für die beiden Polarisierungen und zwei r/a -Verhältnisse dargestellt. Es lässt sich in beiden Fällen sehr schön ein Maximum mitten im verbotenen Bereich erkennen. Die Höhe des Maximums ist eine abfallende Funktion der Kristallgröße. Siehe hierzu auch das Inset. Bei einer Kristalllänge ab $10a$ sehen sich die beiden Oberflächenmoden des Kristalls praktisch nicht mehr. Die Kopplung ist sehr schwach.

Um die Oberflächenmoden zu charakterisieren, wird eine Bandstrukturrechnung durchgeführt. Zuerst soll die projizierte Bandstruktur eines defektfreien Kristalls analysiert werden. Siehe hierzu Abbildung <3.3>. Der Pfeil im Inset gibt die Richtung des Blochvektors an, für den die Bandstruktur berechnet wurde. Moden in Luft und Kristall sollen durch zwei aufeinander folgende Buchstaben (X_1X_2) klassifiziert werden, wobei der erste Buchstabe für Luft und der zweite für den Kristall steht. Sie werden jeweils durch zwei Zustandskennungen ersetzt:

3.1. Theoretische Beschreibung von Oberflächenzuständen



(a) TM= E_z -Polarisation, $r/a = 0,42$, $d_{\text{ARL}} = 0,99$, Transmission bei einer Kristalllänge von $7a$. Inset: Transmission für $f \approx 0,325$ in Abhängigkeit der Kristalllänge.



(b) TE= H_z -Polarisation, $r/a = 0,385$, $d_{\text{ARL}} = 0,57$, Transmission bei einer Kristalllänge von $3a$. Inset: Transmission für $f \approx 0,26$ in Abhängigkeit der Kristalllänge.

Abbildung 3.2.: Transmissionsrechnungen (FEM) für einen 2D-hexagonalen Kristall mit Luftlöchern in Silizium ($\epsilon = 11,6$). Die Insets zeigen die Transmission einer Oberflächenmode in Abhängigkeit der Kristallgröße. Die grauschattierte Fläche zeigt den verbotenen Frequenzbereich aufgrund nicht-koppelnder Bänder oder einer Bandlücke an.

3. Oberflächenzustände

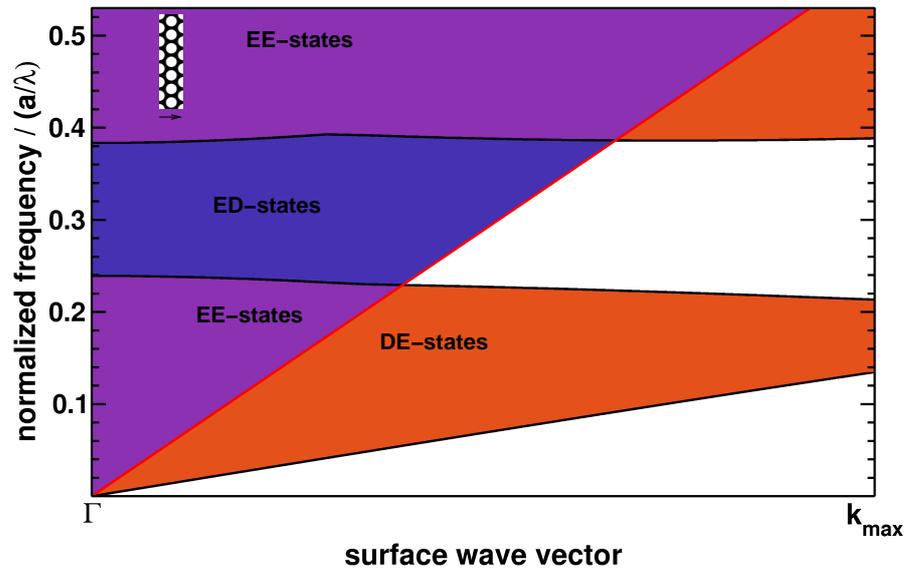


Abbildung 3.3.: Projizierte Bandstruktur eines 2D-hexagonalen Kristalls entlang der Oberfläche (ΓM). Luftlöcher mit $r/a = 0,385$ in Silizium ($\epsilon = 11,6$), $TE=H_z$ -Polarisation. rot=Lichtlinie. Die Moden werden mit zwei Buchstaben gekennzeichnet. Ersterer steht für Luft und zweiterer für den PhC: D=Decaying (exponentiell abfallend), E=Extended (erlaubt).

- D steht für eine abklingende Feldintensität (decaying)
- E steht für einen ausgedehnten Zustand (extended)

Somit ergeben sich folgende Kombinationsmöglichkeiten eines Zustandes, siehe hierzu auch Abbildung (3.3):

DD: Der Zustand hat keinen erlaubten Moden in Luft und PhC, er ist auf der Oberfläche zwischen beiden Medien stark lokalisiert.

EE: Der Zustand ist in Luft und PhC erlaubt. Eine Transmission durch den PhC ist möglich.

ED: Diese Zustände treten in der Bandlücke auf. Sie sind in Luft erlaubt und im PhC verboten.

DE: Nun tritt der umgekehrte Fall auf, die Zustände sind im PhC erlaubt und in Luft verboten. Diesen Fall kann man mit der internen Totalreflexion vergleichen.

Die Notation wurde von [6] entnommen. Es ist leicht zu erkennen, dass in der Bandlücke nur im Luftbereich erlaubte Zustände existieren, im PhC jedoch nicht (ED). Die purpurnen EE-Bereiche bezeichnen erlaubte Moden für Luft und Kristall. Orange DE-

3.1. Theoretische Beschreibung von Oberflächenzuständen

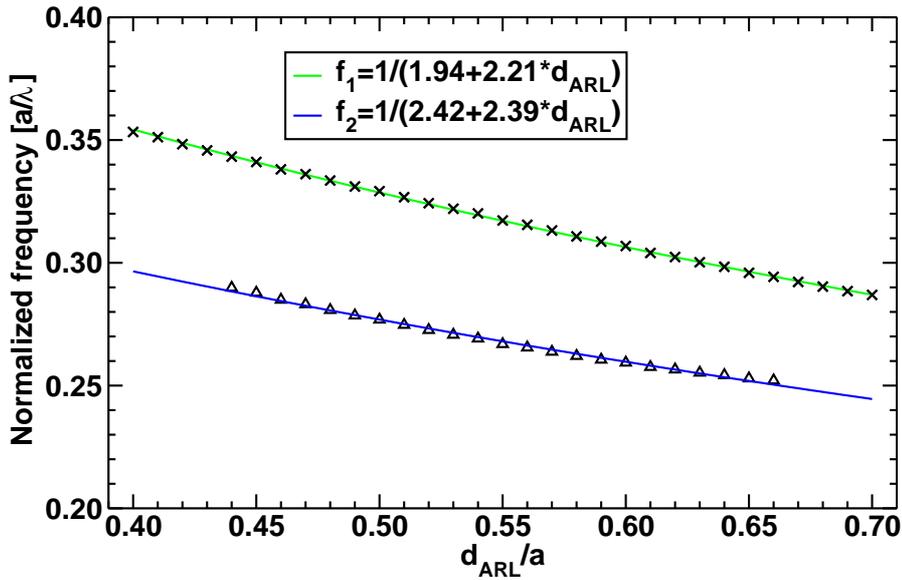


Abbildung 3.4.: Oberflächenzustände als Funktion der ARL-Dicke. $r/a = 0,385$, Luftlöcher in 2D-hexagonaler Kristallanordnung in Silizium ($\epsilon = 11,6$). TE= H_z -Polarisation. Aufgetragen wurden zwei Oberflächenmoden in der Bandlücke. Mit steigender ARL-Dicke verschiebt sich die Resonanzfrequenz in Richtung tieferer Frequenz. Nur die untere Mode (f_2) kann von außen angeregt werden, da die obere (f_1) eine antisymmetrische Feldverteilung aufweist. Mit Hilfe der Ausgleichskurve f_2 kann durch Reflexionsmessungen auf die ARL-Dicke geschlossen werden.

Bereiche sind Moden, welche im Kristall gebunden sind und nur dort vorkommen. Gebundene DD-Moden müssten in der Bandlücke außerhalb des ED-Bereichs auftreten. Diese können aber erst entstehen, wenn ein Defekt eingeführt wird. Mit größer werdendem k -Vektor dreht sich der einfallende k -Vektor langsam in Richtung der Oberfläche. Dies wird durch die Lichtgerade gekennzeichnet. Nun wird die Notation erweitert. Der Suffix r soll besondere, resonante Zustände bezeichnen. r -E Moden sind solche, bei denen zwar ein ausgedehnter Zustand zu sehen ist, die Energie aber zum größten Teil an der Oberfläche gebunden vorliegt. Durch die Einführung der ARL entstehen r -ED Zustände. Abbildung (3.4) zeigt die Lage dieser Oberflächenzustände für die TE= H_z -Polarisation in der Bandlücke als Funktion der ARL-Dicke. Der energetisch höhere Zustand aus Abbildung (3.4) hat eine anti-symmetrische Feldverteilung, wohingegen der energetisch niedrigere Zustand an eine ebene Welle ankoppeln kann. Die energetisch tiefere Mode ist für eine Vermessung der ARL-Dicke geeignet.

Da r -ED Moden keine Energie speichern, sondern relativ schnell wieder abgeben, werden sie in Reflexionsrechnungen (Transfermatrix, FEM) nicht detektiert. Die FDTD Simulationen reagieren aber empfindlich darauf, da sie ja erst nach sehr großer Iterationszahl einen stabilen Zustand erreicht haben. Moden, welche die angebotene Energie

3. Oberflächenzustände

aufnehmen und leicht zeitverzögert wieder zurückgeben, können somit aufgespürt werden. Leider passiert dies schon in einem Zeitfenster, in dem nicht die nötige Auflösung erreicht wird. Die Auflösung geht reziprok mit der Iterationszeit. Als Ausweg aus diesem Dilemma kann eine Absorption in der FE-Methode in die Oberfläche eingebaut oder über die Energiedichte an der ARL integriert werden. Hier soll der Weg über die Absorption gegangen werden, um Reflexionsrechnungen besser mit den FDTD-Simulationen vergleichen zu können. Eine Absorption ist am einfachsten über einen Leitfähigkeitsanteil in einer FEM-Simulation zu realisieren. Da in der Bandlücke keine Transmission erlaubt ist gibt die Umrechnung von $A = 1 - R$ die Absorption an der Oberfläche wieder. Diese wird logarithmisch in Abbildung [\(3.8\)](#) über die Frequenz aufgetragen. Mit Hilfe verschiedener Verfahren (FEM mit Absorption, FEM Eigenwertbestimmung, FDTD Frequenzraum und FDTD harmonische Inversion) wurde die Lage verschiedener r-EDs für die $TM=E_z$ -Polarisation bestimmt und in Abbildung [\(3.5\)](#) dargestellt. Die zugehörige Feldverteilung findet sich in Abbildung [\(3.7\)](#). In Abbildung [\(3.6\)](#) wurde die Reflexion an der Bandkante für verschiedene ARL-Dicken simuliert. Die Minima können Oberflächenzuständen zugeordnet werden. Jedes mal, wenn eine Mode die Bandkante erreicht, erniedrigt sich die Reflexion signifikant. Mit diesen Ergebnissen soll nun das Stufen-Modell der ARL eingeführt werden.

3.1.3. Stufenmodell der ARL

Das Konzept der ARL kann man auch anhand eines Stufenmodells intuitiv erklären. Eine einfallende Luftmode koppelt dabei zuerst an den resonanten Oberflächenzustand (r-ED), dessen Frequenzlage und Modenprofil durch die ARL-Dicke vorgegeben wird. Über diesen Parameter kann der Zustand so nahe an die Bandkante geschoben werden, dass das Oberflächenzustandsfeld im PhC nur sehr langsam abklingt und schließlich im Grenzfall zu einer r-EE-Mode wird. Durch den großen räumlichen Modenüberlapp wird schließlich die PhC-Mode angeregt. Siehe hierzu auch Abbildungen [\(3.9\)](#). Die Luftmode wurde auf der linken Seite und die PhC-Mode auf der rechten Seite skizziert. Durch die Wahl der ARL-Dicke kann eine passende Mode (in der Mitte der Abbildung [\(3.9\)](#)) zu einer erhöhten Transmission an der Bandkante führen.

3.2. Anwendung auf einen Gassensor

Ein photonischer Kristall bietet die Möglichkeit Licht so zu manipulieren, dass ein gewünschtes Dispersionsverhalten mit fast beliebiger Modenstruktur entsteht.

Ein Anwendungsgebiet photonischer Kristalle ist ein Gassensor [\[30, 31, 32\]](#). Der vorgestellte Gassensortyp basiert auf der Absorption von IR-aktiven Substanzen. Das Aufbauschema ist in Abbildung [\(3.10\)](#) zu finden. Als Lichtquelle dient ein breitbandiger IR-Emitter. Ein nachgeschalteter Bandpassfilter selektiert Polarisation und Frequenzband auf welches der PhC abgestimmt ist. Durch den PhC strömt ein Gas. Die Gaskonzentration soll so gering sein, dass das Gas keinen Einfluss auf die Bandstruktur hat. Das Licht wird vom Gas zum Teil absorbiert und die verbliebene Intensität von einem IR-Detektor

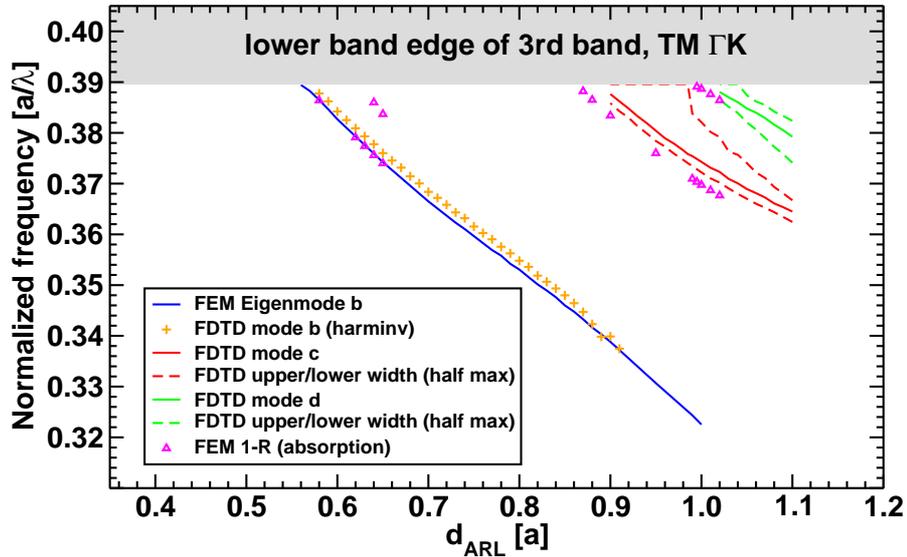


Abbildung 3.5.: Lage der Oberflächenmoden in Abhängigkeit der ARL-Dicke. Die Positionen wurden über verschiedene Verfahren gewonnen (FEM, FDTD, harmonische Inversion). Die starke Mode (b) konnte mittels einer FEM-Eigenwert-Rechnung gefunden werden, wohingegen schwächere Moden (c) und (d) nur durch eine Absorption und der zugehörigen Reflexionsrechnung mittels der FEM entdeckt wurden ($1 - R$, Abbildung 3.8)). Aus FDTD-Reflexions-Simulationen wurde im Frequenzraum nach kurzer normalisierter Iterationszeit von $t \approx 1000$ die Einbrüche im Bandlückenplateau ausgewertet (FDTD mode) sowie die Breite dieser (upper/lower width). Die starke Mode konnte zudem durch die harmonische Inversion des AKF-Signals gefunden werden. Da sich das FDTD-Bild durch diese kurze Iterationszeit nicht stabilisiert hat, was vor allem an den Bandkanten zum Tragen kommt, ist den FEM-Ergebnissen mehr zu trauen. Hexagonaler Kristall mit Luftlöchern $r/a = 0,42$ in Silizium mit $\epsilon = 11,6$. TM= E_z -Polarisation.

3. Oberflächenzustände

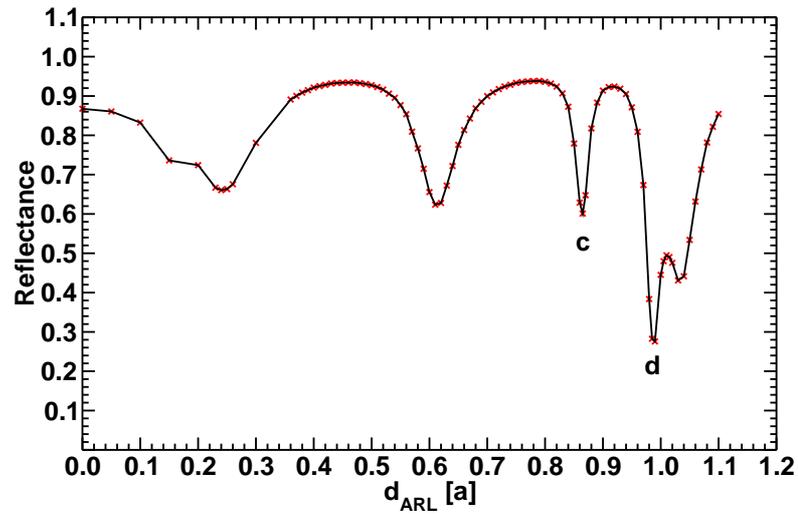


Abbildung 3.6.: Minimierung der Reflexion für ein Frequenzbündel nahe der Bandkante ($f \approx 0,389$) durch Variation der ARL-Dicke. Die Minima können Oberflächenmoden zugeordnet werden. Die Feldverteilung der Mode (c) und (d) sind in Abbildung 3.7 zu finden. FDTD-Simulation. Hexagonaler Kristall mit Luftlöchern $r/a = 0,42$ in Silizium mit $\epsilon = 11,6$. TM= E_z -Polarisation.

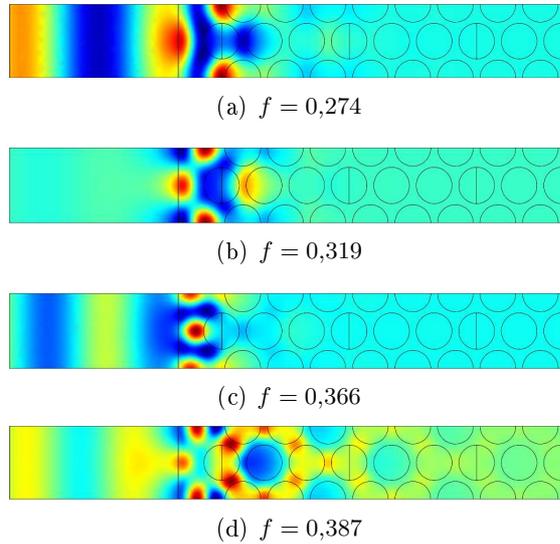


Abbildung 3.7.: Dargestellt wurden r-ED Moden des hexagonalen Kristallsystems mit Luftlöchern $r/a = 0,42$ in Silizium ($\epsilon = 11,6$), TM= E_z -Polarisation, $d_{\text{ARL}} = 1,02$. Mode (d) dient zur Ankopplung an die Bandkante.

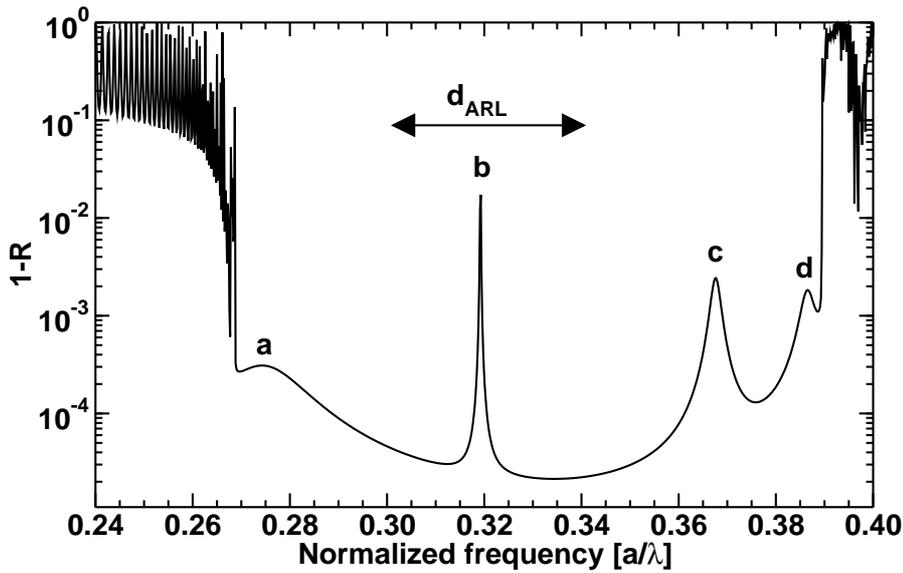


Abbildung 3.8.: Dargestellt wurden r-ED Moden des hexagonalen Kristallsystems mit Luftlöchern $r/a = 0,42$ in Silizium ($\epsilon = 11,6$), $TM=E_z$ -Polarisation, $d_{ARL} = 1,02$. Es wurde eine FEM-Reflexionssimulation mit leichter Leitfähigkeit im Silizium durchgeführt. In der Bandlücke sollte die Beziehung $1 - R = 0$ gelten. Durch die Absorption wird nicht die gesamte Energie reflektiert. Es zeigen sich besondere r-ED-Moden ab. Mode (d) dient zur Ankopplung an die Bandkante. Die zugehörige Feldverteilung ist in Abbildung (3.7) zu finden. Die ARL-Dicke bestimmt die Frequenzlage der r-ED-Moden.

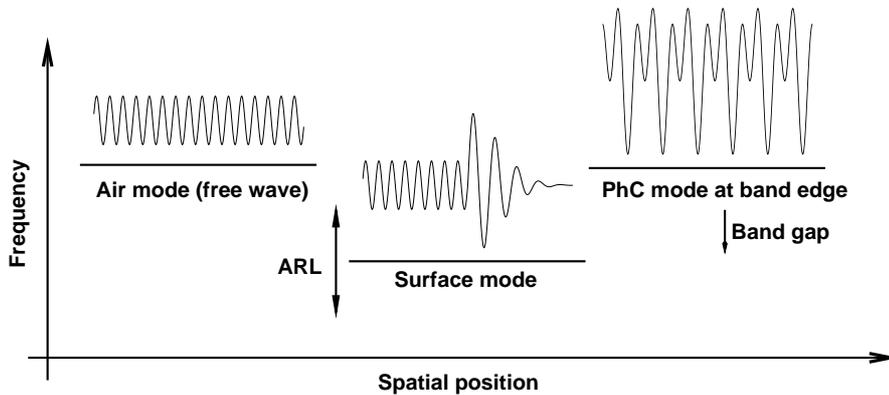


Abbildung 3.9.: Stufen-Modell über die Funktion der Oberflächenzustände. Die ARL stimmt die Lage des Defektzustandes so ab, dass dieser an die Bandkante rückt und durch den Überlapp mit der PhC-Mode schließlich an diese koppelt.

3. Oberflächenzustände

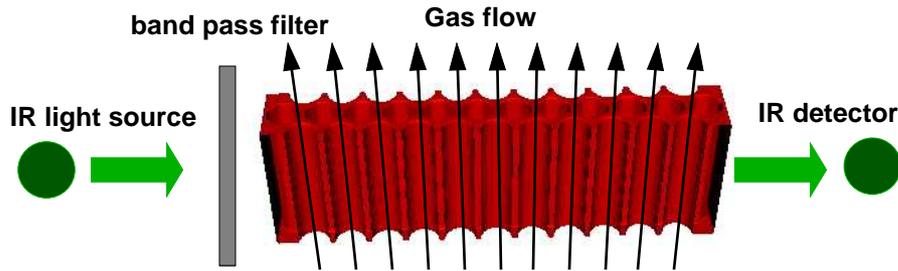


Abbildung 3.10.: Gassensorprinzip. Ein breitbandiger IR-Emitter dient als Quelle. Der Frequenzbandpassfilter selektiert die Gasabsorptionslinie heraus, auf die der PhC abgestimmt ist. Ein pyroelektrischer Detektor dient als Empfänger.

registriert.

Die PhC-Gasküvette muss verschiedenen Anforderungen genügen. Als Material wurde Silizium ausgewählt, da damit tiefe, gerade Poren mit einem sehr großen Aspektverhältnis (Abbildung <3.11> [30]) geätzt werden können. Somit steht der Aufnahme eines großen Gasvolumens nichts im Wege. Die Wechselwirkung mit dem Gas muss hoch sein, damit die Sensorlänge verringert werden kann, um einen gleichwertigen oder besseren quantitativen Nachweis des Gases im Vergleich zur konventionellen Absorptionszelle zu erreichen. Dies erfordert eine Erhöhung der Wechselwirkungszeit. Um eine hohe Wechselwirkungszeit zu erreichen, wird die Eigenschaft eines PhCs untersucht. Die Gruppengeschwindigkeit des Lichtes im PhC wird über die Steigung eines Bandes in der Bandstruktur bestimmt. Abbildung <3.12> stellt die Bandstruktur in Ausbreitungsrichtung und die Verkippung von \mathbf{k} in Richtung der Porenachse dar.

Je flacher ein Band ist, desto kleiner ist die Gruppengeschwindigkeit. Flache Bänder finden sich üblicherweise an der Brillouin-Zonen-Grenze oder am Γ -Punkt. Eine punktuell langsame Gruppengeschwindigkeit ist aber nicht ausreichend, da eine Absorptionsbande eine gewisse spektrale Bandbreite aufweist. Neben der niedrigen Gruppengeschwindigkeit muss der Anteil der dielektrischen Energie in den Poren betrachtet werden. Eine flache Steigung hat nämlich jedes Band. Da die Schwingungsbanden eines Gases nur mit der elektrischen Feldkomponente wechselwirken, muss auf einen hohen Energieanteil dieser in den Poren geachtet werden.

Um einen schnellen Überblick davon zu bekommen, ohne sich händisch jede Feldverteilung anzuschauen, wird die „Wirkung“ ξ definiert:

$$\xi = t \frac{\int_{WZ} dx dy \epsilon(x, y) |E(x, y)|^2 \delta(1, \epsilon(x, y))}{\int_{WZ} dx dy \epsilon(x, y) |E(x, y)|^2} \quad (3.2)$$

mit t als Interaktionszeit, $\delta(1, \epsilon(x, y))$ ist 0 für $\epsilon \neq 1$. Dieser Ansatz darf nach der Störungstheorie verwendet werden, wenn die Änderung einer Variablen klein ist. In die elektrische Feldverteilung gehen die Eigenvektoren, folglich die Blochmode, ein. Die Funktion $\epsilon(x, y)$ beschreibt den Aufbau des photonischen Kristalls; in diesem Fall ein 2D-

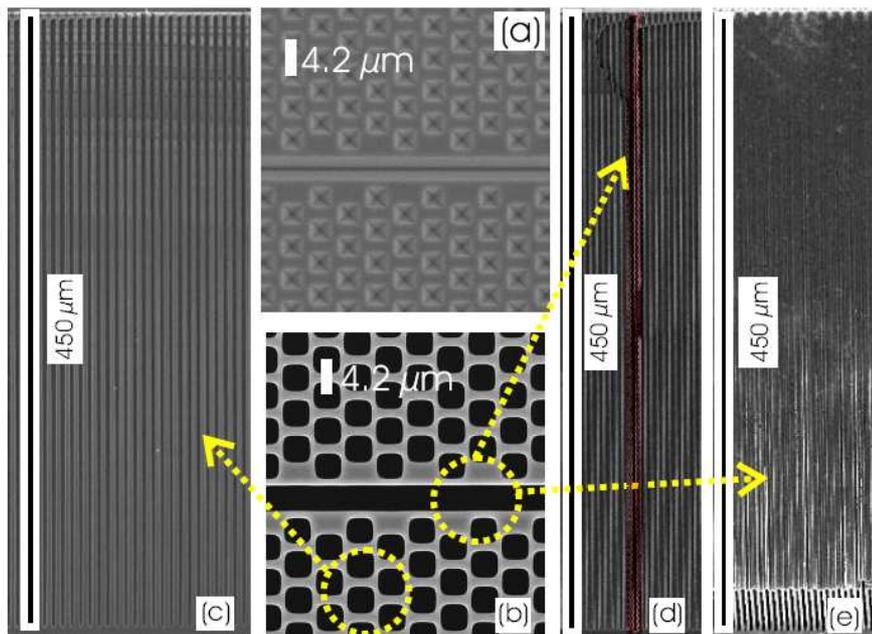
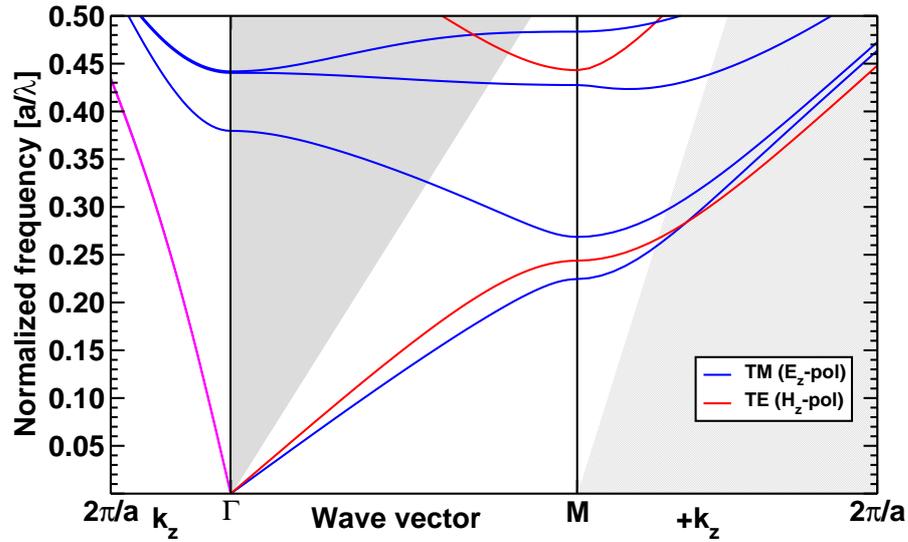
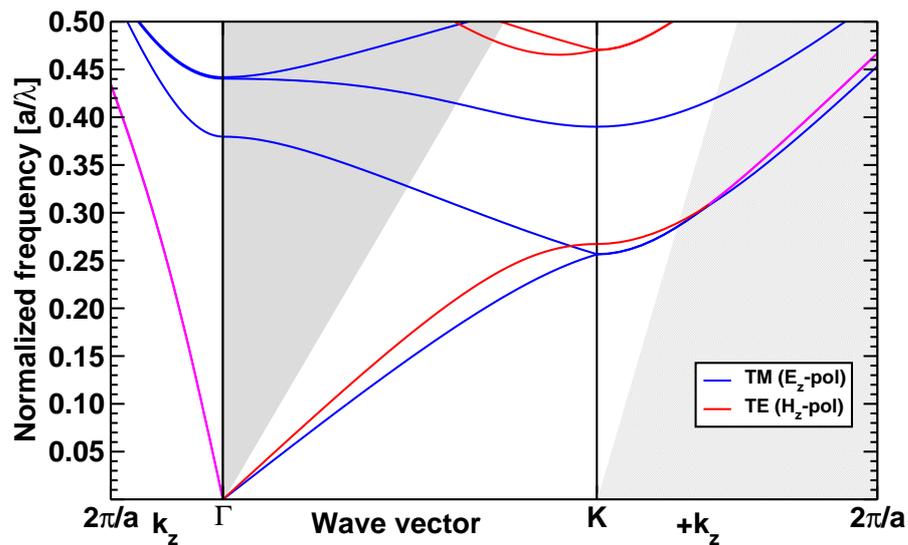


Abbildung 3.11.: Elektronenmikroskopaufnahme geätzter Proben [30]. (a) Lithographisch vorstrukturierter n-Si-wafer. (b) Ätzgraben mit umliegenden geätzten Poren. (c) Seitenansicht nach Brechen entlang einer Hochsymmetrierichtung. (d) Bild nach Brechen senkrecht zum Graben. (e) Bruch parallel zum Graben.

3. Oberflächenzustände



(a) ΓM



(b) ΓK

Abbildung 3.12.: Bandstruktur eines 2D-PhCs; hexagonales Gitter mit Luftlöchern von $r/a = 0,42$ in Silizium ($\epsilon = 11,6$). Mit k_z als Wellenvektor parallel zu der Porenachse. Der erste Abschnitt beschreibt die Ausbreitung nur entlang der Porenachse (90°), der zweite Abschnitt beschreibt die Bandstruktur in der PhC-Ebene, also senkrecht zur Porenachse. Im dritten Abschnitt wird der Kristall aus der Ebene in Richtung der Porenachse verkippt. Der hell schattierte Bereich an der rechten Seite gibt Moden an, welche nicht von außen angeregt werden können (unterhalb des Lichtkegels).

hexagonales Gitter. Die Interaktionszeit t gewinnt man aus der Steigung des betreffenden Bandes. Die Steigung gibt die Gruppengeschwindigkeit wieder, wobei das Inverse dazu die Aufenthaltszeit bzw. den Brechungsindex beschreibt. Mit normierten Einheiten kann man t ausrechnen nach:

$$t = \frac{l}{v_{\text{gr}}} = \frac{l}{\frac{d\omega}{dk}} \quad (3.3)$$

Da man die Interaktionszeit je Gitterzelle wissen will wird $l = 1$. Somit ergibt sich für ξ direkt:

$$\xi(\omega, \mathbf{k}, n) = \frac{1}{\nabla_{\mathbf{k}}\omega(\mathbf{k}) \cdot \hat{\mathbf{k}}} \eta(\omega, k, n) = n_{\text{gr}} \eta(\omega, k, n) \quad (3.4)$$

mit ω als Kreisfrequenz, \mathbf{k} als Wellenvektor der Blochmode sowie $\hat{\mathbf{k}}$ als Einheitsvektor in Ausbreitungsrichtung, η als Energieanteil in den Poren, n_{gr} als Gruppenbrechungsindex und n als Bandnummer. In Abbildung <A.1> auf Seite 114 wurde ξ für die beiden Hochsymmetrie-Richtungen $\Gamma\mathbf{M}$ und $\Gamma\mathbf{K}$ über die Frequenz aufgetragen. Der Wert $10^0 = 1$ entspricht dabei der Wirkung in Luft. In großen Bereichen ist die PhC-Wirkung schlechter oder nicht viel besser als die von Luft. An den Brillouinzonengrenzen steigt die Wirkung aufgrund langsamerer Gruppengeschwindigkeit an, wird aber oft durch den niedrigen Energieanteil in den Poren kompensiert.

Bevor mit der Auswahl der Arbeitspunkte begonnen werden kann muss noch geklärt werden, welche Bänder die richtige Symmetrie aufweisen, um an eine ebene Welle koppeln zu können. Hierzu wurde die Kopplungsstärke gegen die Frequenz aufgetragen, siehe dazu Abbildung <A.2> auf Seite 115.

Nun folgt die Auswahl der Arbeitspunkte. Aus Abbildung <A.2> erkennt man, dass folgende Bänder koppeln:

- in $\Gamma\mathbf{M}$ -Richtung für beide Polarisierungen die ersten beiden Bänder und für TE noch das dritte
- in $\Gamma\mathbf{K}$ -Richtung für TM das erste und dritte, für TE das erste und zweite Band.

Um weiter die sinnvollen Arbeitspunkte einzukreisen wird aus den Abbildungen <A.1> die Bandbreite bestimmt, in der die Wirkung größer als 10 ist. Dies ergibt Tabelle 3.1.

Sicherlich ist es noch möglich jeden einzelnen Arbeitspunkt durch Variation des Radius zu optimieren, dies wurde aber nicht als nötig erachtet.

Höhere Bänder als Arbeitspunkte bedingen feinere Fertigungstoleranzen, da diese auf Schwankungen empfindlicher reagieren. Ab der normierten Frequenz $f = 0,577$ bzw. $f = 0,667$ wird Beugung einsetzen. Die Beugung sorgt für Transmissionsverluste. Frequenzen höher als diese sollten deshalb nicht genutzt werden. Aus der Schnittmenge beider Analysen (Kopplung und Wirkung), sowie der Vorüberlegungen aus [30], ergeben sich als interessante Arbeitspunkte:

1. $\Gamma\mathbf{M}$: TE, untere Bandkante des zweiten Bandes
2. $\Gamma\mathbf{M}$: TE, Überlapp von oberer Bandkante und unterer Bandkante des zweiten und dritten Bandes

3. Oberflächenzustände

Direction	TM/TE	Band	f	Δf [$a/\lambda \cdot 10^{-4}$]
$\Gamma\mathbf{M}$	TE	1	0.227	1.8
$\Gamma\mathbf{M}$	TE	2	0.409	5.7
$\Gamma\mathbf{M}$	TE	2	0.498	2.8
$\Gamma\mathbf{M}$	TE	2 & 3	0.498	5.6
$\Gamma\mathbf{M}$	TM	1	0.212	2.6
$\Gamma\mathbf{M}$	TM	2	0.254	2.9
$\Gamma\mathbf{K}$	TE	1	0.250	1.1
$\Gamma\mathbf{K}$	TE	2	0.428	4.8
$\Gamma\mathbf{K}$	TM	3	0.363	1.2

Tabelle 3.1.: Auswahl der Bänder mit möglichst breitem Frequenzbereich für $\xi > 10$ am Beispiel eines 2D-hexagonalen Kristalls, Luftlöcher mit $r/a = 0,4$ in Silizium ($\epsilon = 11,6$).

3. $\Gamma\mathbf{K}$: TE, untere Bandkante des zweiten Bandes

4. $\Gamma\mathbf{K}$: TM, untere Bandkante des dritten Bandes

Für den Fall 2 ist keine Bandlücke für TE= H_z -Polarisation zwischen dem 2. und 3. Band vorhanden. Das Stufenmodell der ARL (Kapitel 3.1.3) kann deshalb nicht angewandt werden. Als Modellsystem soll deshalb ab jetzt nur die $\Gamma\mathbf{K}$ -Richtung dienen. Für diese gibt es ein echtes Stopgap für die TE= H_z -Polarisation (3. Fall) und ein pseudo-Stopgap in der TM= E_z -Polarisation (4. Fall) aufgrund des nichtkoppelnden Bandes.

Oberflächenzustände am Arbeitspunkt

Da der Arbeitspunkt nur in $\Gamma\mathbf{K}$ -Richtung betrieben werden soll, wird aus der Oberflächenzustandsrechnung nur der Γ -Punkt ausgewählt, also nur die Blochvektoren, die keinen Anteil parallel zur Oberfläche haben. Der Kristall selbst ist in $\Gamma\mathbf{K}$ orientiert. Eine Verkippung der Einstrahlrichtung wird nicht betrachtet. Nun wird, wie in Kapitel 3.1 beschrieben, nicht nach gebundenen DD-Zuständen gesucht, sondern nach r-ED, also resonanten Zuständen, welche in Luft erlaubt sind und im Kristall eine exponentiell abfallende Feldverteilung aufweisen. Dies sind keine reinen ED- oder EE-Zustände, da sie nur langsam im Kristall abklingen und zusätzlich in Luft erlaubt sind. In Abbildung (3.5) wurde schon der Fall für die TM= E_z -Polarisation behandelt. Eine Analyse für die TE= H_z -Polarisation ist in Abbildung (3.13) zu finden. Der r-ED-Zustand wurde an der unteren Bandkante des 2. Bandes gegenüber der ARL-Dicke aufgetragen. Mit zunehmender ARL-Dicke wird die r-ED-Frequenz tiefer in Richtung der Bandlückenmitte gedrückt. Unterhalb einer gewissen ARL-Dicke ($d = 0,56$) verschwindet dieser r-ED Zustand komplett. An der Grenze mit $d = 0,57$ ist die Feldverteilung im Kristall ausgedehnt, aber sehr langsam exponentiell abfallend. In Luft hingegen ist er ausgedehnt. Die Feldverteilung des r-ED-Zustandes deckt sich mit der Feldverteilung in $\Gamma\mathbf{K}$ -Richtung des regulären Arbeitspunktes. Somit ist ein Energieübertrag zwischen der r-ED-Mode

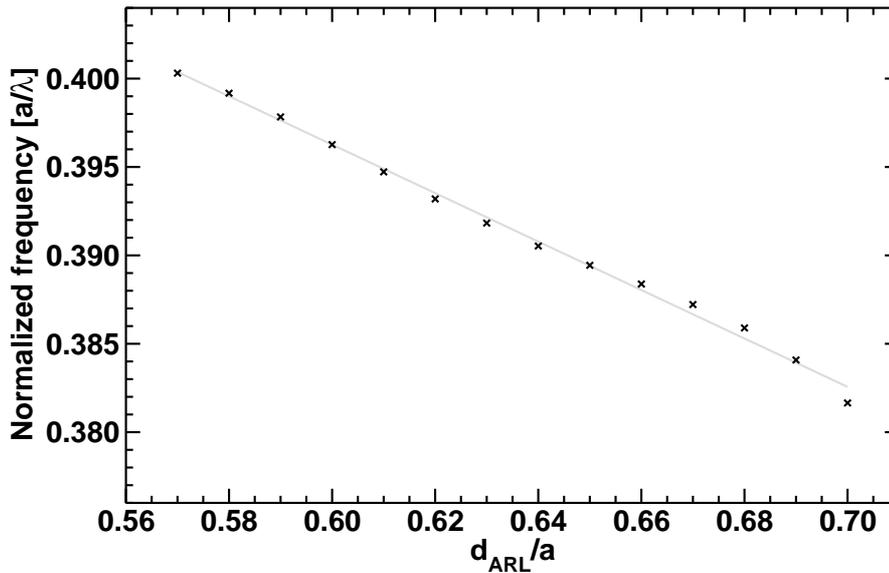


Abbildung 3.13.: Ein r-ED Zustand als Funktion der ARL-Dicke. Die graue Linie dient nur zur Führung des Auges. 2D-hexagonaler Kristall, Luftlöcher mit $r/a = 0,385$ in Silizium mit $\epsilon = 11,6$, TE= H_z -Polarisation, $\Gamma\mathbf{K}$ -Richtung. FEM-Simulation.

und der Arbeitsmode möglich. Da die r-ED-Mode nur langsam abklingt, ist eine große Übergangswahrscheinlichkeit zu erwarten.

Für die TE= H_z -Polarisation mit $r/a = 0,385$ ergibt sich somit eine ARL-Dicke von $d_{\text{ARL}} = 0,57$. Eine ähnliche Rechnung für die TM= E_z -Mode für $r/a = 0,42$ findet $d_{\text{ARL}} = 0,99$ als Optimum (Abbildung 3.6). Für die TM= E_z -Polarisation wurde eine FDTD-Transmissionsimulation in Abbildung 3.14 dargestellt. Im Frequenzbereich von $f = 0,3895$ bis $f = 0,3915$ steigt die Transmission durchschnittlich um den Faktor 12 von ca. 3,5% auf 42,4%.

Die r/a -Verhältnisse beider Polarisationen wurden so angepasst, dass sie bei gleicher Gitterkonstante die Arbeitsfrequenz des Gassensors treffen.

3.2.1. Absorption

In den vorigen Kapiteln wurden die interessanten ARL-Dicken und Oberflächenmoden bestimmt, sowie die Arbeitspunkte im Banddiagramm festgelegt. Daraus soll berechnet werden, wie groß der Effekt der erhöhten Absorption ist. Zu diesem Zwecke wird ein Kristall mit ca. $101a$ Länge für die TE= H_z - bzw. TM= E_z -Polarisation aufgesetzt und die Transmission im Frequenzfenster von $f = [0,1,0,5]$ mit einer großen Anzahl von Frequenzpunkten mittels FEM bestimmt. Zum Vermindern von Oszillationen wird das Ergebnis mit einem Frequenzfilter korreliert. Anschließend wird in den Poren eine leichte Leitfähigkeit angenommen, um Absorption zu simulieren. Der Absorptionseffekt wird

3. Oberflächenzustände

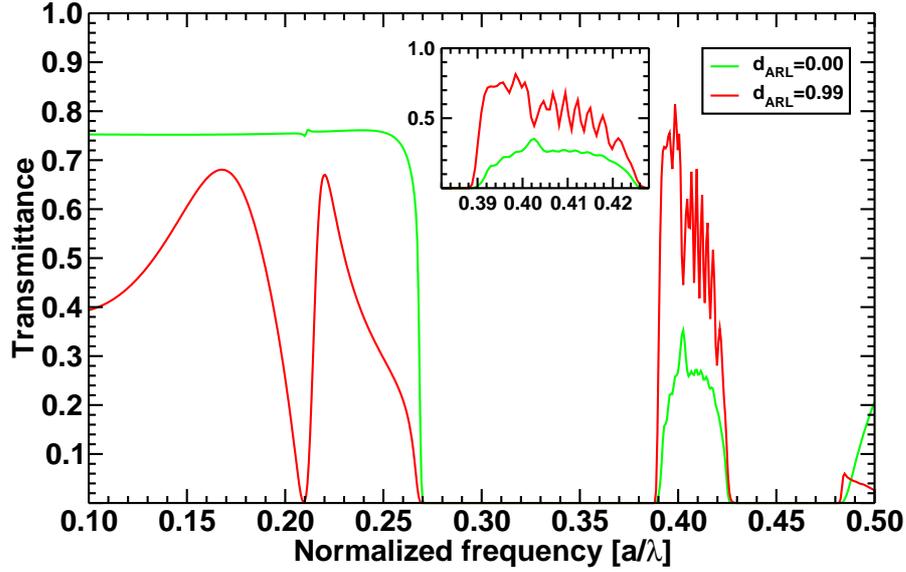


Abbildung 3.14.: Transmissionseinfluss der ARL für die $TM=E_z$ -Polarisation nach ca. $t = 22100a/c_0$ bei einer Kristallgröße von ca. $241a$. Luftlöcher $r/a = 0,42$ in Silizium ($\epsilon = 11,6$), 2D-hexagonaler Kristall. FDTD-Simulation. Im Inset ist die erhöhte Transmission aufgrund der richtigen Wahl der ARL-Dicke zu erkennen.

noch gegen eine vergleichbare Luftstrecke normiert:

$$\ln(T_{\text{Luft}}) = -\alpha d \quad (3.5)$$

$$\xi = \frac{\ln(T_{\text{PhC}})}{\ln(T_{\text{Luft}})} = -\frac{\ln(T_{\text{PhC}})}{\alpha d} \quad (3.6)$$

Da die Absorptionsstrecke d für Luft und PhC gleich ist und die Gaskonzentration konstant bleibt, erhält man damit den Verbesserungsfaktor ξ_d . Das ist der Faktor, um den die Absorptionsstrecke verkleinert werden kann, um auf die gleiche Nachweisempfindlichkeit zu kommen wie ohne PhC. Ist die absolute Stoffmenge konstant, so muss ξ_d mit dem Faktor 2 multipliziert werden, da nur ca. 50% des Volumens Gas aufnehmen kann.

In Abbildung (3.15) sind die Simulationsergebnisse zu finden. Da für sehr kleine Transmissionen, wie sie auch in der Bandlücke auftreten, ein Verbesserungsfaktor berechnet werden kann, wird nur der Effekt für $T > 0,1$ dargestellt. Eine enorme Verbesserung mit mehr als einem Faktor von 30 wird für beide Polarisationen gefunden. Der Spektralfilter für die $TM=E_z$ -Polarisation wurde etwas kleiner gewählt als für die $TE=H_z$ -Polarisation um dem kleineren Effekt entgegen zu kommen.

Der Einfallswinkel betrug bisher immer 0° . Um den Einfluss einer Verkipfung abzuschätzen, werden im folgenden Kapitel die Äquifrequenzflächen an den Arbeitspunkten bestimmt.

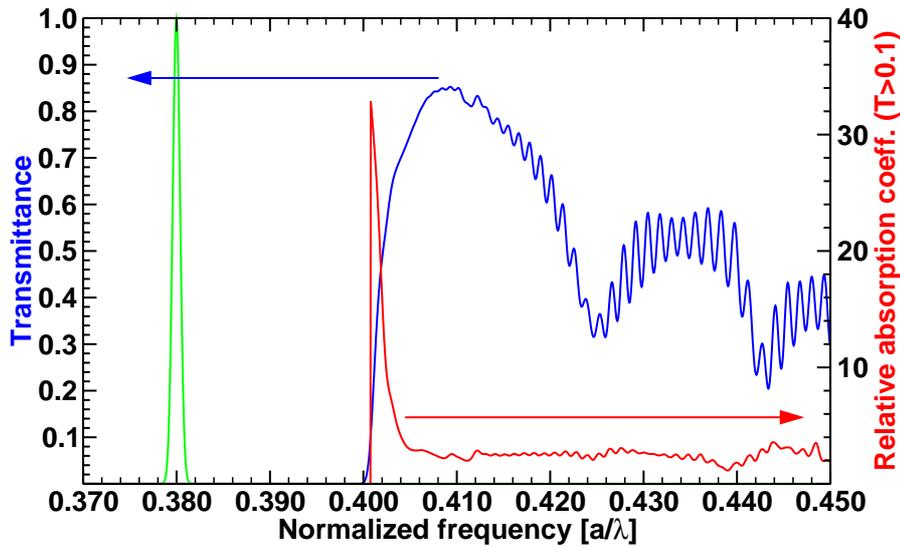
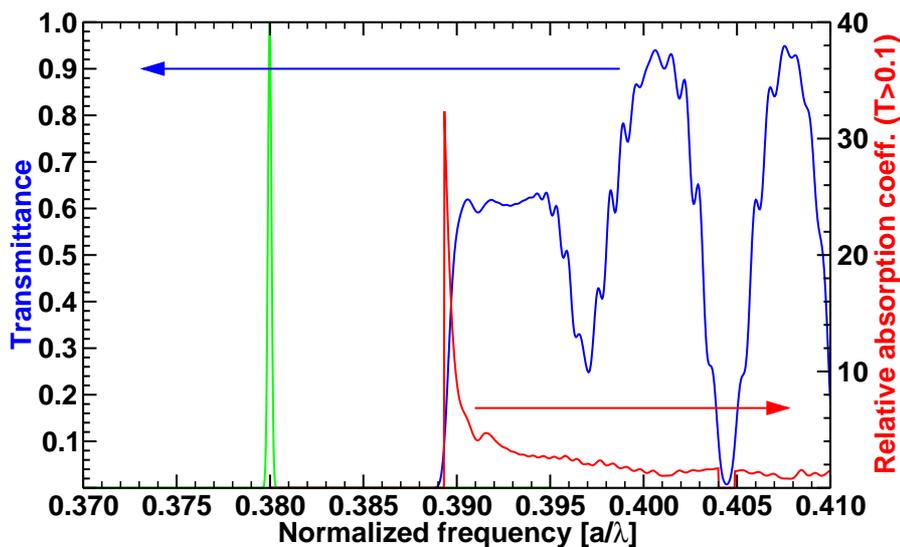
(a) $r/a=0,385$, $d_{ARL} = 0,57$ (b) $r/a=0,42$, $d_{ARL} = 0,99$

Abbildung 3.15.: Hexagonaler Kristall mit Luftlöchern in Silizium ($\epsilon = 11,6$), $l = 101a$ in $\Gamma\mathbf{K}$ Richtung. Leichte Absorption in Luft eingesetzt. Absorption relativiert gegen T_0 und Effekt in Luft. Die grüne Kurve zeigt die Frequenzfilterfunktion mit der die Transmission gewichtet wurde. Es wird nur der Effekt für $T > 0,1$ dargestellt. FEM-Simulation. Wird die absolute Stoffmenge betrachtet, so ist der Verbesserungsfaktor um den Faktor 2 größer. Dies wird in der Graphik nicht berücksichtigt.

3. Oberflächenzustände

3.2.2. Winkelabhängigkeit, Äquifrequenzflächen am Arbeitspunkt

Um eine Aussage über die Winkelabhängigkeit der Transmission zu treffen, muss man sich die Äquifrequenzflächen an den Arbeitspunkten anschauen. Dabei ist die $TE=H_z$ -Polarisations-Mode entartet, d.h. es gibt für eine Frequenz zwei Zustände, an denen die Energie von außen ankoppeln kann. Auffällig bleibt aber die Form der Fläche. Diese sagt ein stark winkeldispersives Verhalten voraus. Die $TM=E_z$ -Polarisations-Mode hingegen zeigt theoretisch eine Fokussierung in den Kristall. Beiden Polarisationen gemein ist der kleine Winkelbereich, in dem das Licht auf den Kristall treffen darf. Im TE -Falle wird das Licht stark abgelenkt und im TM -Falle aufgrund des Stopbandes bei schrägem Einfall reflektiert. Als allgemeine Regel gilt, dass runde Äquifrequenzflächen normales Brechungsverhalten besitzen. Spitze Flächen bedingen eine stark winkelabhängige Brechung, also hohe Winkeldispersion. Trotz des besseren Absorptionseffekts, der in Kapitel 3.2.1 für die $TE=H_z$ - gegenüber der $TM=E_z$ -Polarisation gefunden wurde, hat die $TM=E_z$ -Polarisations-Mode eine günstigere Winkeldispersion und wäre deshalb zu bevorzugen.

3.2.3. Dispersion des Gassensors

Wie im Abschnitt über die Effektiv-Medium-Theorie (Anhang B) beschrieben wird, existieren in einem PhC viele verschiedene Gruppengeschwindigkeiten. Diese werden an den Bandkanten sehr klein. Beobachtet man die Transmission eines Frequenzbündels als Funktion der Zeit (Abbildung 3.17), so kann man daraus die Gruppengeschwindigkeit v_{gr} ablesen. Die Transmission ist am Anfang der Simulation bei $t = 0$ klein. Nachdem der Puls durch den Kristall gewandert ist, steigt die Transmission signifikant an. Aus dem Zeitpunkt für den Anstieg und der Kristalllänge kann nun die Gruppengeschwindigkeit berechnet werden. Besitzt das beobachtete Frequenzbündel für alle Frequenzanteile eine konstante Geschwindigkeit, so muss ein steiler Anstieg der Transmission stattfinden. Dies findet man für niedrige Frequenzen (bei $f = 0,1$). Aus der Steigung des Transmissionsanstieges kann die Gruppengeschwindigkeitsdispersion in diesem Frequenzbündel abgelesen werden. Die Gerade wird mit steigender Frequenz flacher. Für den Arbeitspunkt bei $f = 0,401$ ist sie nur am Anfang linear. Die Transmission steigt für $f = 0,401$ beim normierten Zeitindex $t = 3000$ und stabilisiert sich erst bei $t = 5000$. Bei einer PhC-Länge von $241a$ entspricht dies einem Gruppengeschwindigkeitsindex von ca. $n_{gr} = 12$ bis 20 . Nun stellt sich die Frage, ob die Gruppengeschwindigkeit von der Kristalllänge abhängig ist. Dieser Sachverhalt soll abgeschätzt werden. In Kapitel 3.1.2 wurde die Kopplung von Oberflächenmoden durch ein Stopgap hindurch als Funktion der Kristalllänge untersucht. Ab ca. $10a$ findet praktisch keine Kopplung mehr statt. Somit ist der Kristall ausreichend groß um ein echtes Stopgap auszubilden und somit der Bandstruktur zu entsprechen. Ab $10a$ Länge sollte man die Gruppengeschwindigkeit aus der Bandstruktur in FDTD-Simulationen wiederfinden können. Bei so kurzen PhCs sind Fabry-Perots sehr ausgeprägt, es sei denn man wählt eine extrem geringe Frequenzauflösung. Eine Laufzeituntersuchung ist daher nicht durchführbar. Über die Differenz zwischen zwei Maxima Δf und der Differenz der zugehörigen k -Vektoren Δk aus dem Banddiagramm darf eine

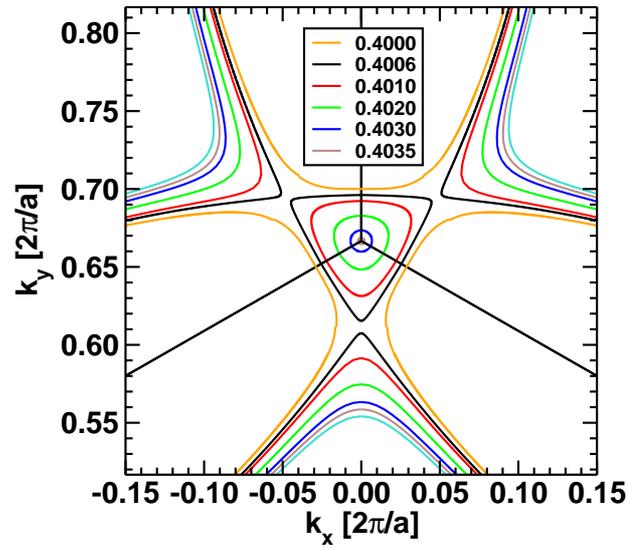
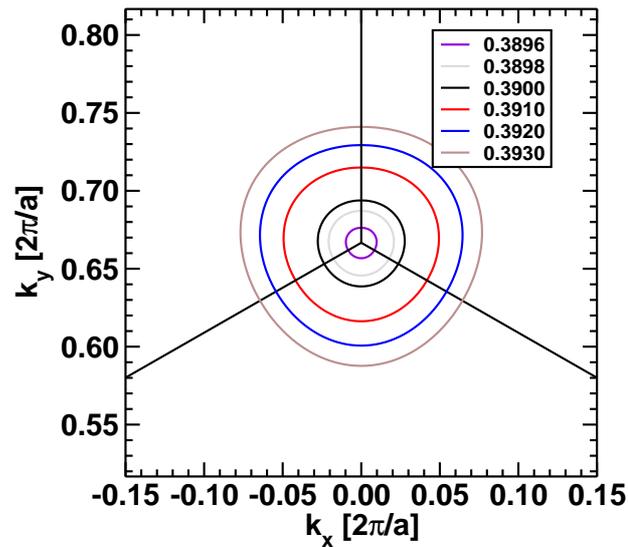
(a) TE= H_z -Polarisation, $r/a = 0,385$, K-Punkt(b) TM= E_z -Polarisation, $r/a = 0,420$, K-Punkt

Abbildung 3.16.: Äquifrequenzflächen am Arbeitspunkt für verschiedene Frequenzen. Spitze Kurven führen zu einer starken Winkeldispersion und runde zu einem normalen Brechungsverhalten. 2D-hexagonaler Kristall mit Luftlöchern in Silizium ($\epsilon = 11,6$). Die Kurven unterscheiden sich in der Frequenz. Die Äquifrequenzkurven der verschiedenen Frequenzen wurden farblich kodiert.

3. Oberflächenzustände

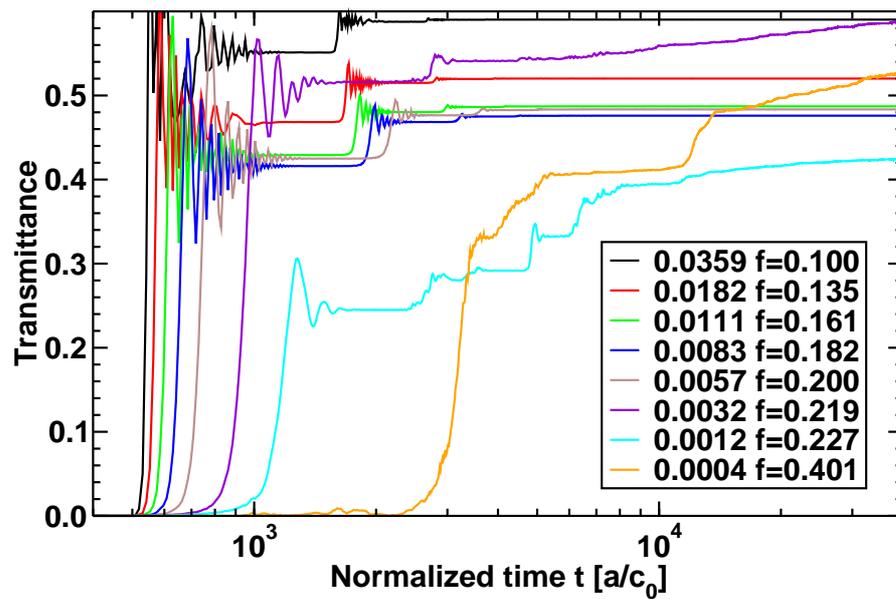


Abbildung 3.17.: Hexagonaler PhC, Luftlöcher ($r/a = 0,385$) in Silizium ($\epsilon = 11,6$), $d_{ARL} = 0,57$, TE= H_z -Polarisation. Zeitverhalten der Transmission für verschiedene Frequenzpunkte. In der Legende ist die Steigung des ersten Umlaufs angegeben. Für $f = 0,401$ ist die Steigung schwer zu bestimmen. Es ist ein Frequenzbündel mit vielen verschiedenen Gruppengeschwindigkeiten.

mittlere Geschwindigkeit

$$v_{\text{gr}} = 2\pi\Delta f/\Delta k \quad (3.7)$$

bestimmt werden. Die Berechnung von Δk hat seine Gültigkeit, da eine ausgeprägte Bandlücke vorhanden ist und mögliche Fehler durch einen zu kurzen Kristall vernachlässigbar sind.

3.2.4. 3D-Simulation des Gassensors

Um den Einfluss der dritten Dimension auf die Transmission zu untersuchen, wurde ein kleines Kristallsystem mit unterschiedlicher Länge (Porenanzahl) aufgesetzt. Das Rechengebiet hat eine Höhe z von $8a$ und eine Breite y von $\sqrt{3}a$. Der Kristall selbst ist $4a$ hoch. An den y -Grenzen wurden periodische Grenzbedingungen und an die übrigen eine PML gesetzt. Die einfallende Welle propagiert damit in x -Richtung. Mittels FEM war es nicht möglich ein adäquates Simulationsgebiet aufzusetzen, da die 3D-Simulation einen sehr hohen Rechenaufwand benötigt. Zum Simulieren wurde deshalb ein freier 3D-FDTD-Code¹ genutzt. Die Kristalllänge wurde variiert von $11a$ über $21a$ bis $41a$. Die Iterationszeit wurde für $n_{\text{gr}} = 30$ so gewählt, dass ein Frequenzbündel mit dieser Geschwindigkeit dreimal durch den Kristall wandern konnte. Anders als bei den 2D-Rechnungen wurde hier eine Auflösung von 30 gewählt, um dem enormen Bedarf an Rechenzeit und Speichermenge einer 3D-Simulation entgegenzukommen. Bei dem längsten Kristall dauerte die Simulation etwa eine Woche. Dazu wurden die vier Prozessoren der Workstation und nahezu der gesamte Speicher von 16GB benötigt.

In Abbildung (3.18) wurde die Transmission in Abhängigkeit der normierten Frequenz mit der Kristallgröße als Parameter dargestellt. Die Kristallgröße beeinflusst die Kurven kaum. Dies ist für die Transmission in den Bändern auch zu erwarten. Auffällig sind die Maxima in dem verbotenen (grauen) Bandbereich. Aus 2D-Simulationen in Abbildung (3.2) ist eine starke Kristalllängenabhängigkeit der koppelnden Oberflächenmoden zu erkennen. Die 3D-Simulation zeigt dagegen, dass die Höhe der Transmission in der Bandlücke nahezu unabhängig von der Kristalllänge ist. Man kann das Verhalten wie folgt erklären: Die Maxima werden 2D-Oberflächenmoden zugeordnet, welche man in 2D-FDTD-Simulationen finden kann. Schwache Moden zeichnen sich durch einen breiten Verlauf aus, wohingegen stärkere Moden spektral schmaler sind. Die Oberflächenmoden sind nicht auf 2D beschränkt. Sie besitzen auch eine 3D-Bandstruktur, wobei sie sehr flache Bänder aufweisen. Als Lichtquelle diente ein kleines Rechteck mit den gleichen Dimensionen wie der PhC, das ein paar Gitterkonstanten von diesem entfernt positioniert ist. Folglich kommt es zur Beugung in die z -Richtung (Porenachse). Demnach treffen viele verschiedene ebene Wellen unter verschiedenen Offaxis-Einfallswinkeln auf den Kristall. In der Ebene tritt keine Beugung auf, da in dieser die Welle durch die periodischen Randbedingungen unendlich ausgedehnt ist. Die steileren Einfallswinkel können nun 3D-Oberflächenmoden anregen, die ihre Energie an PhC-Moden unterhalb des Lichtkegels abgeben, wo sie auf Grund der Totalreflexion geführt werden und erst wieder auf der Austrittsseite auskoppeln. Diesen Sachverhalt kann man aus Abbildung (3.12) ableiten.

¹<http://ab-initio.mit.edu/wiki/index.php/Meep>

3. Oberflächenzustände

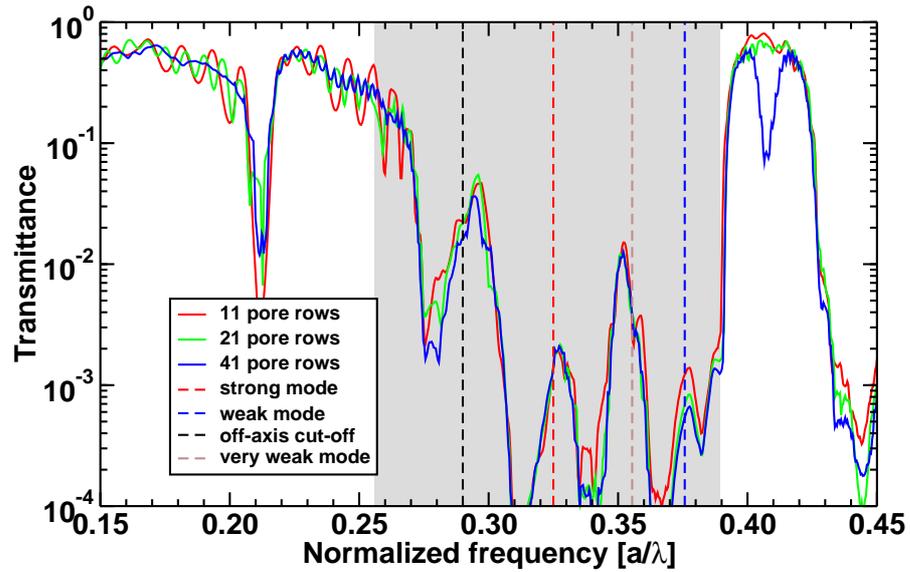


Abbildung 3.18.: 3D-FDTD-Transmissionssimulation. TM= E_z -Polarisation, 2D hexagonaler Kristall mit einer Höhe von $4a$, $\Gamma\mathbf{K}$ -Richtung mit Luftlöchern ($r/a = 0,42$) in Silizium ($\epsilon = 11,6$), $d_{\text{ARL}} = 0,99$. Der grauschattierte Bereich kennzeichnet die Frequenzlage des 2D-Stopgaps und 2D-Pseudostopgaps. Die Transmission im verbotenen Bereich ist nahezu unabhängig von der Kristalllänge. Transmissionsmaxima in der Bandlücke sind gekennzeichnet durch eine Zuordnung zur Oberflächenmode und 90° Linie (Totalreflexion, off-axis-cut-off).

Der grauschattierte Bereich im rechten Teil der Abbildung gibt die Moden an, welche unter Totalreflexion im PhC geführt werden. Eine Oberflächenmode ist spektral eng und würde als horizontale Linie im Diagramm eingezeichnet werden.

3.2.5. Experimentelle Ergebnisse

Nach den Vorgaben der Simulationsergebnisse wurde eine Lithographiemaske mit einer Gitterkonstante von $a = 2\mu\text{m}$ und eine für $a = 4,2\mu\text{m}$ erstellt. Auf der $2\mu\text{m}$ -Maske sind PhCs in verschiedener Kristalllänge aufgebracht. Es wurden verschiedene Ätzgräben [29, 30] vorgesehen, welche das Einstellen der ARL-Dicke ermöglichen. Durch die Festlegung des Porendurchmessers können somit PhCs mit einem breiten Parameterraum abgesucht werden. Die Proben wurden von T. Geppert [30], welcher auch die experimentelle Umsetzung der Ätzgräben entwickelte, am Max-Planck-Institut in Halle (MPI-Halle) hergestellt. Eine Vereinzelnung der Proben geschieht über eine *in-situ* Membranablösung: Nach $450\mu\text{m}$ Tiefe des Ätzprozesses wird der Soll-Radius sehr groß eingestellt, wodurch der PhC den Halt zum Rest des Siliziumsubstrates verliert und eine freistehende Membran entsteht.

Die Vermessung und Vorcharakterisierung der so hergestellten PhC-Gassensoren mit Hilfe eines FTIR-Spektrometers mit angeschlossenem IR-Mikroskop wurden von mir an der Universität Paderborn durchgeführt.

Im Anschluß wurden ausgewählte Proben im Fraunhofer-Institut für physikalische Messtechnik in Freiburg (IPM-Freiburg) in einem Gassensorprototypen von S.L. Schweizer vermessen und die Messdaten von mir an der Universität Paderborn ausgewertet.

Durch die optischen Vorgaben des FTIR-Mikroskops kann kein senkrechter Einfall vermessen werden. Die 0° Komponenten werden aufgrund der Cassé-Grain-Optik ausgeblendet. Die Transmissionswerte sind deshalb niedrig. Etwas höhere Werte bekommt man für die ΓM -Richtung in $\text{TM}=E_z$ -Polarisation im zweiten Band. Diese begründet sich in der negativen Brechungsindexeigenschaft (siehe hierzu auch Kapitel 4). Ein Bild vor dem Kristall wird genauso auf die gegenüberliegende Seite projiziert.

In Abbildung (3.19) wurde eine unpolarisierte Transmissionsmessung einer Bandstruktursimulation gegenüber gestellt. Der Kristall war relativ dünn. Moden überhalb des Lichtkegels wurden ausgeblendet, da diese nicht geführt werden. Es ist eine hohe Transmission durch das erste Band zu erkennen. Im Bereich der Bandlücke und des nicht-koppelnden Bandes bricht die Transmission ein. Weitere Minima und Maxima für höhere Frequenzen können den Bändern zugeordnet werden. In Abbildung (3.20) ist eine Messung für die ΓM -Richtung zu finden. Sie zeigt eine relativ hohe Transmission im ersten Band bis ca. $f = 0,20$. Ein Stopgap verbietet die Transmission zwischen $f = 0,20$ und $f = 0,25$. Das zweite Band hat eine selbstführende Eigenschaft, weshalb relativ viel Leistung von $f = 0,25$ bis $f = 0,35$ in Transmission detektiert wird. Für die $\text{TE}=H_z$ -Polarisation ist in diesem Frequenzbereich nur ein Stopgap vorhanden, weshalb die Transmission niedrig bleibt. In Abbildung (3.21) ist eine Reflexionsmessung zu sehen. Das erste Band besitzt eine relativ geringe Reflexion (bis ca. $\nu = 1200\text{cm}^{-1}$). In der Bandlücke (nicht-koppelndes Band) steigt die Reflexion auf fast 1 (zwischen ca. $\nu = 1200\text{cm}^{-1}$ und ca. $\nu = 2000\text{cm}^{-1}$). In diesem Reflexionsplateau sind kleine Einbrüche zu sehen. Diese

3. Oberflächenzustände

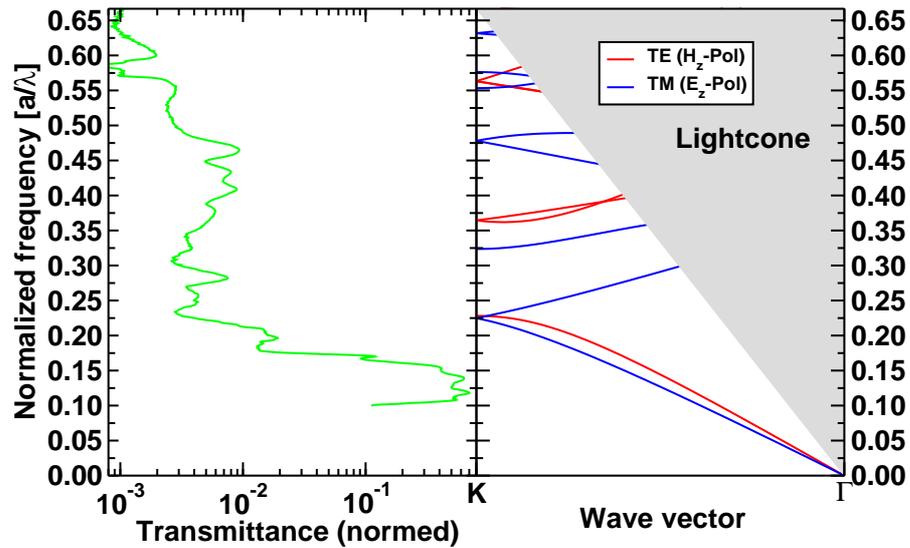


Abbildung 3.19.: Gegenüberstellung einer unpolarisierten Transmissionsmessung und zugehöriger Bandstruktur. Parameter: $r/a = 0,36$, hexagonaler Kristall mit Luftlöchern in Silizium ($\epsilon = 11,6$). Probe PB 293, $a = 2\mu m$, $l = 125\mu m$.

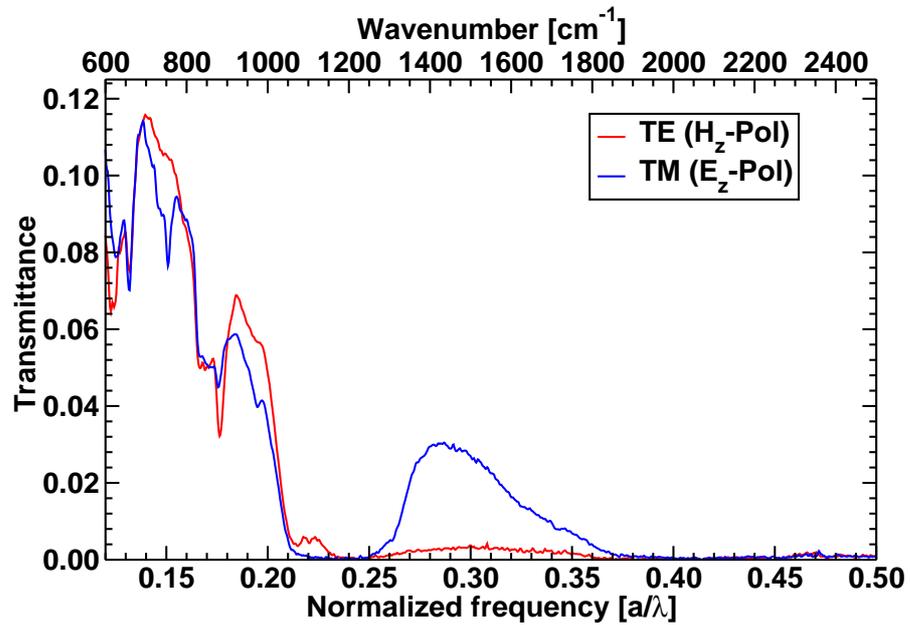


Abbildung 3.20.: Transmissionsmessung durch einen ca. $0,5mm$ (entspricht $250a$) dicken 2D-hexagonalen PhC mit Luftlöchern in Silizium ($\epsilon = 11,6$) in ΓM -Richtung. Probe: PB 285.

erklären sich durch Oberflächenmoden und wurden mit Pfeilen gekennzeichnet.

In Tabelle (3.2) sind Messergebnisse aus einer IR-Messkampagne am IPM-Freiburg zu finden. Eine Reflexionsmessung der Proben ergab, dass sich der Arbeitspunkt für die Gase CO_2 und Propan am zweiten Stopgap befand. Für Ethanol lag der Arbeitspunkt dagegen am Rande des ersten Bandes. Die Transmissionen sind absolut zu lesen. Kopplungsverluste sowie verminderte Transmission aufgrund von Polarisationsfilterung durch den PhC wurden nicht mit eingerechnet. Aus Abbildung (A.2) kann gelesen werden, dass bei $f = 0,588$ ein nicht-koppelndes Band für die $\text{TM}=E_z$ -Polarisation vorlag. Die gemessenen Transmissionswerte für Propan sollten deshalb um den Faktor zwei größer sein. Die theoretischen Verbesserungswerte wurden aus Abbildung (A.5) auf Seite 117 entnommen. Für den Ethanolwert wurde ein anderes r/a angenommen und anhand des Transmissionswertes die Wirkung entsprechend interpoliert.

Die Gasabsorptionsmessungen aus Tabelle (3.2) zeigen eine gute Übereinstimmung mit den theoretischen Werten. Es gibt aber auch eine starke Abweichung, welche bei der Propanmessung bei $f = 0,588$ deutlich wird. Die Theorie sagt eine Verbesserung um den Faktor 20 voraus für die $\text{TE}=H_z$ -Polarisation. In diesem Frequenzbereich dient der PhC als Polarisationsfilter. Die $\text{TM}=E_z$ -Polarisation wird nicht durchgelassen. Zudem ist die genaue Porenradiusgröße sowie die Dicke der ARL unbekannt. Es sind somit nur Schätzungen. Da die ARL einen starken Einfluss auf die Transmission besitzt und die Radien die Bänder verschieben, ist es möglich, dass die Parameter für die theoretischen Voraussagen nicht exakt passen.

Die Messungen in diesem Kapitel zeigten niedrige Transmission vor allem in den höheren Bändern. Nur im ersten Band sind akzeptable Transmissionswerte zu beobachten. Diese Probleme liegen an der großen numerischen Apertur des FTIR-Objektives. Am Gassensorprototypen wurde dagegen erhöhte Transmissionen verglichen mit dem FTIR-Mikroskop gemessen. Sie lagen bei etwa 15%. Dies lässt sich auf die sehr geringe numerische Apertur des Gassensorprototypen zurückführen. Allerdings sind sie immer noch niedriger als die theoretischen Werte. Sie werden zum Einen einem Kopplungsproblem und zum Anderen einer Unordnung im PhC zugeschrieben. Auf die Unordnung soll in den folgenden Kapitel 3.2.6 und Kapitel 3.2.7 eingegangen werden.

3. Oberflächenzustände

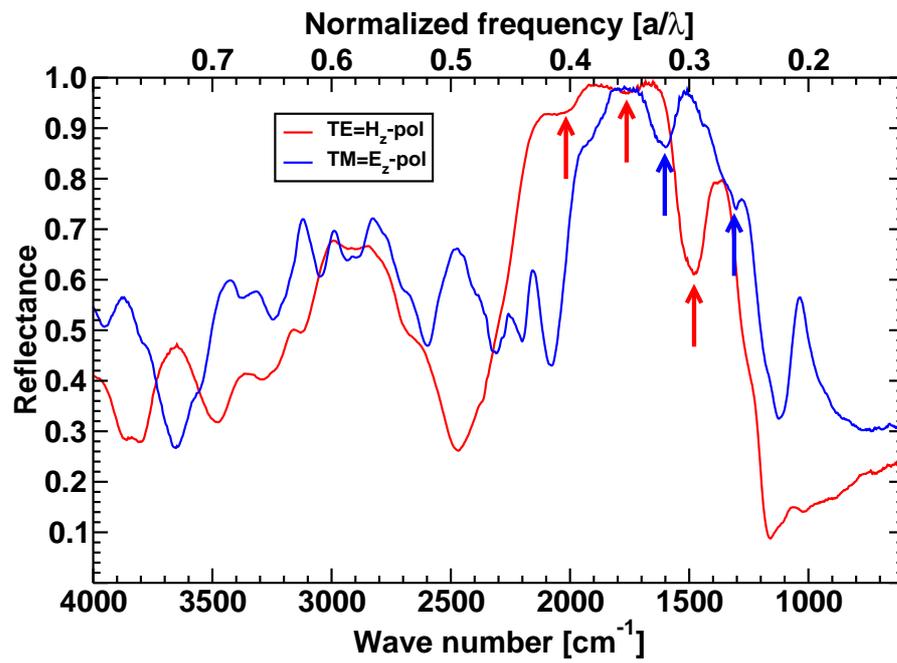


Abbildung 3.21.: Reflexionsmessung an einem Steg PhC mit ca. 500 Porenreihen. Es zeigt sich eine Bandlücke im Bereich $(1200 - 2000)cm^{-1}$. Die Pfeile kennzeichnen Oberflächenmoden der beiden Polarisierungen. $r/a \approx 0,39$.

Sample	Length [mm]	Gas	Filter [μm]/[a/λ]	T	Effect _{exp}	Effect _{t,theory}	TM	Effect _{t,theory}	TE
PB 401	1	Propan	3.4/0.588	0.13 ± 0.02	3.36 ± 0.08	3.36 ± 0.08	N.N.	N.N.	20
PB 401	1	CO ₂	4.24/0.472	0.11 ± 0.04	3.54 ± 0.08	3.54 ± 0.08	3.67	3.67	2.85
PB 401	0.5	Propan	3.4/0.588	0.16 ± 0.02	3.04 ± 0.07	3.04 ± 0.07	N.N.	N.N.	20
PB 401	0.5	CO ₂	4.24/0.472	0.17 ± 0.02	2.63 ± 0.06	2.63 ± 0.06	3.67	3.67	2.85
PB 384	0.25	Ethanol	9.48/0.211	0.174 ± 0.004	3.00 ± 0.15	3.00 ± 0.15	≈ 1	≈ 1	5

Tabelle 3.2.: Ergebnisse einer IR-Messkampagne am IPM-Freiburg. Es wurde die Probennummer- und länge angegeben. Die Frequenzfilter korrespondieren mit den Gasabsorptionslinien. Die Transmission in ΓK -Richtung normiert gegenüber einer vergleichbaren Luftstrecke sowie die effektive Wegverlängerung wurden berechnet. Gitterkonstante $2\mu\text{m}$, $r/a \approx 0,39$. Der erste theoretische Effektwert bezeichnet das Ergebnis der $\text{TM}=E_z$ - und der zweite die $\text{TE}=H_z$ -Polarisations-Rechnung.

3. Oberflächenzustände

3.2.6. Einfluss von Unordnung im PhC auf Propagation von Licht

In diesem Abschnitt wird auf den Einfluss von Unordnung [33, 34, 35] auf die Transmissionseigenschaften des Gassensors eingegangen. Die Unordnung kann für relativ niedrige Transmissionswerte aufgrund von Streuung verantwortlich gemacht werden.

Neben diesem gibt es einen weiteren Einfluss auf die Transmission, der sich auf materialbedingte Effekte zurückführen lässt². Die Unordnung wird durch zwei Parameter beschrieben: Der Radius der Poren kann in der Tiefe und in der Ebene variieren und die Lage des Zentrums der Poren weist ebenso eine gewisse Streuung auf. Weitere Herstellungsfehler, wie z.B. unförmige Poren (elliptische, rechteckige, sternförmige usw.), sollen nicht betrachtet werden, da diese gut in der Praxis vermieden werden können.

Es wird für einen Kristall bestehend aus ca. 200 Poren (ca. $8a$ lang und entsprechend breit) die Transmission oberhalb von $f = 0,35$ bis $f = 0,5$ bestimmt und darüber integriert. Nun werden auf diese 200 Poren Störungsoperatoren angewandt. Der erste Störungsoperator σ_r sorgt für eine gaußverteilte Porenradius-Variation und der zweite Operator σ_p variiert die Position der Poren. In Abbildung (3.22) wurden mehrere Kombinationen beider Operatoren für beide Polarisierungen aufgetragen. Es ist zu erkennen, dass eine kleine Porenpositionsstreuung einen sehr negativen Einfluss auf die Transmission besitzt, wohingegen eine gleich große Radiusstreuung noch gute Werte liefert. Anzustreben sind demnach ein $\sigma_p < 0,003a$ und ein $\sigma_r < 0,005a$. Dies stellt eine hohe Herausforderung an die Herstellung. Für eine Gitterkonstante von $a = 2,0\mu m$ ($a = 4,2\mu m$) werden die Bedingungen zu $\sigma_p < 6,00nm$ und $\sigma_r < 3,85nm$ ($\sigma_r < 12,60nm$ und $\sigma_p < 8,09nm$). Somit ist leicht ersichtlich, dass die größere Gitterkonstante eine bessere absolute Toleranz gegenüber Herstellungsungenauigkeiten besitzt. In Abbildung (3.22) wurde zudem der Versuch gewagt, aus der relativen Transmission über das Lambertsche Gesetz eine freie Weglänge zu extrapolieren. Für einen hexagonalen Kristall mit Luftlöchern in Silizium leiten Koenderink et. al. [36] eine freie Weglänge bei einem $\Delta r = 0,5\%$ von etwa $17a$ ab. Dies entspricht einem $\sigma_r = 1,5\%$ in Abbildung (3.22). Die Abschätzung von Koenderink basiert auf analytischen Überlegungen für eine Frequenz im Bereich des ersten Stopgaps. Die hier präsentierten Werte wurden dagegen für ein Frequenzintervall ermittelt, was den Unterschied zwischen den Werten erklärt. In Abbildung (A.3) auf Seite 116 wurde für ein festes $\sigma_r = 0,01$ ohne Porenpositionsvariation die Transmission in Abhängigkeit der Länge bestimmt. Es scheint sich ab ca. $50a$ ein Sockel in der Transmission von ca. 15% auszubilden. Die Transmissionssimulationen sind allerdings reine 2D-Simulationen. Ein Streueffekt in die dritte Dimension wurde nicht betrachtet. Es ist somit möglich, dass Imperfektionen das Licht aus der Ebene herausstreuen. Um ein solch großes Gebiet in 3D numerisch direkt zu simulieren, wäre ein sehr großes Rechen-Cluster-System notwendig, welches mir nicht zur Verfügung stand.

Die obige Untersuchung basiert auf der Annahme, dass die Porengröße statistisch verteilt im Kristall vorliegt. Wie sich im folgenden Kapitel herausstellt ist die Größenmodulation in der Praxis ringförmig mit dem Zentrum in der Mitte des Wafers. Die Lage

²Silizium weist im niedrigen Frequenzbereich Phononenabsorption auf. Für PhCs mit $a = 2\mu m$ liegen diese Frequenzen im ersten Band und haben keinen Einfluss auf den Arbeitspunkt in den höheren Bändern.

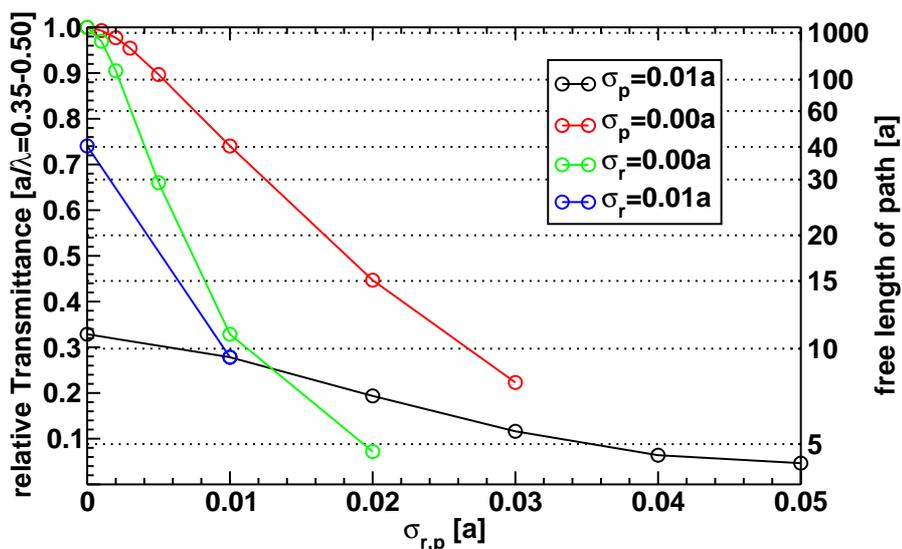
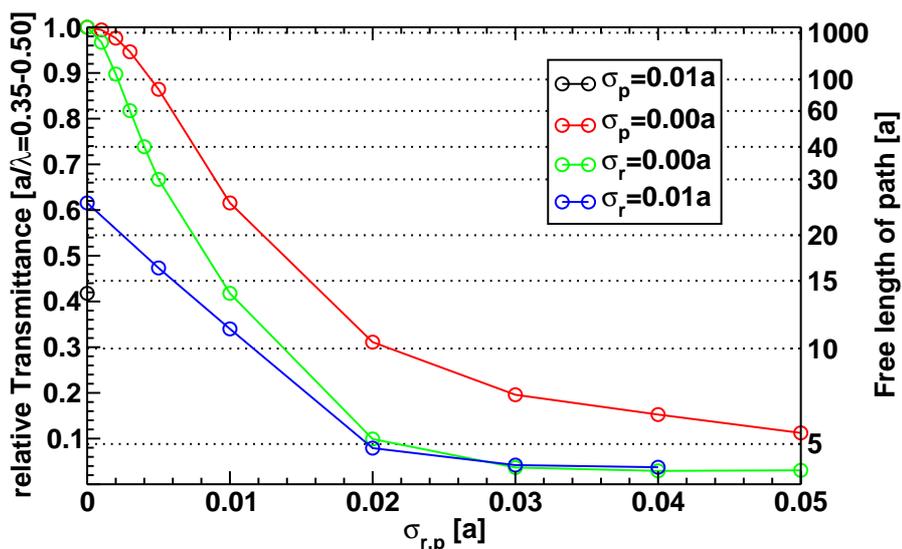
(a) TE= H_z -Polarisation, $r/a=0,385$ (b) TM= E_z -Polarisation, $r/a=0,42$

Abbildung 3.22.: Porenpositions- und Radius-Streuung in einem PhC. Hexagonaler Kristall, Luftlöcher in Silizium ($\epsilon = 11,6$). Der Kristall besteht aus ca. 200 Poren. Auf diese wurden zwei Störungsoperatoren angewandt: σ_p (Positionsstreuung) und σ_r (Radiusstreuung). Die Streuung entspricht einer Gauß-Normal-Verteilung. Eine Positionsstreuung ist kritischer als eine Radiusstreuung.

3. Oberflächenzustände

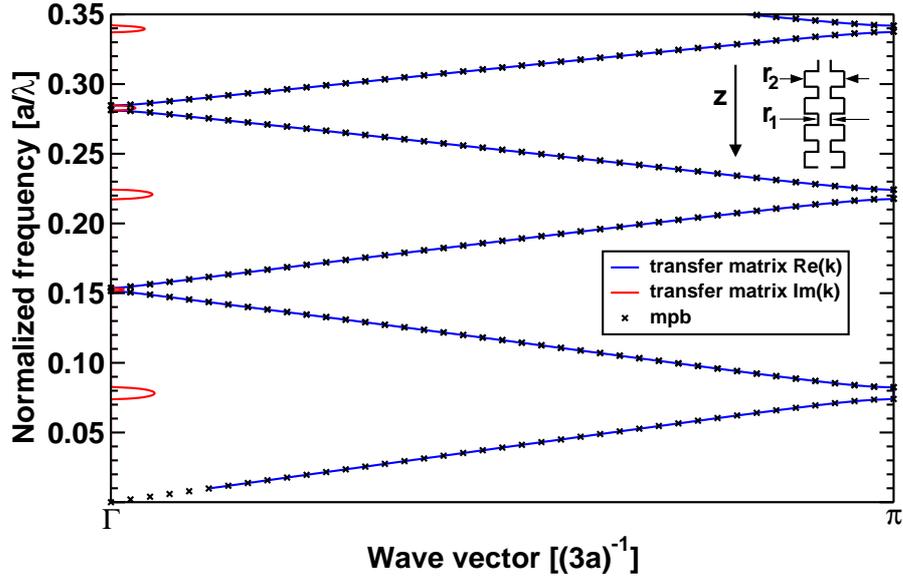


Abbildung 3.23.: Banddiagrammvergleich von Transfermatrixmethode und 3D-PWE-Rechnung. Beide Lösungen stimmen sehr gut überein.

der Ringe zu der Kristallachse ist Zufall. Somit sollen diese Simulationen als Minimalabschätzung und zur Orientierung dienen.

3.2.7. Feststellung der Unordnung

Um die lokale Unordnung im hergestellten PhC festzustellen, werden die Transmissions- bzw. Reflexionseigenschaften parallel zu den Poren ausgenutzt [37]. Es wird eine tiefenabhängige, rechteckige Porenmodulation mit $r_1 = 0,35a$ und $r_2 = 0,41a$ hergestellt. Die jeweilige Schicht besitzt eine Dicke von $d_{z,1} = d_{z,2} = 1,5a$, d.h. die Gesamtdicke einer Periode beträgt $d_z = 3a$. Um abzuschätzen, in welchem Frequenzbereich sich interessante Maxima und Minima ergeben, wird eine Bandstrukturrechnung durchgeführt. Die PWE-Methode liefert im 3D-Modell das Banddiagramm. Um auf die Reflexions- und Transmissionseigenschaften zu schließen, bedient man sich der Transfermatrixmethode. Mit Hilfe der PWE-Methode wird der Propagationsvektor jeweils für beide r/a -Verhältnisse senkrecht zur Kristallebene bestimmt (aus Abbildung (3.12)). Diese werden der Transfermatrix übergeben und daraus wiederum ein Banddiagramm berechnet. Aus dem Vergleich mit dem Ergebnis der vollen 3D-PWE-Methode, Abbildung (3.23), erkennt man eine hohe Übereinstimmung. Da beide Lösungen identisch sind, kann nun die Transfermatrixmethode hergenommen werden, um das Reflexionsbild zu bestimmen (Abbildung (3.24)).

In Abbildung (3.25) ist eine Transmissionsmessung durch einen PhC zu finden, welche nach diesen Modulationsvorgaben hergestellt wurde. Die Lagen der Stopgaps wurden mit Pfeilen markiert. Sie stimmen in der Frequenzlage nicht exakt mit der Simulation überein. Dies begründet sich in der leichten Unsicherheit beim Herstellungsprozess, wodurch

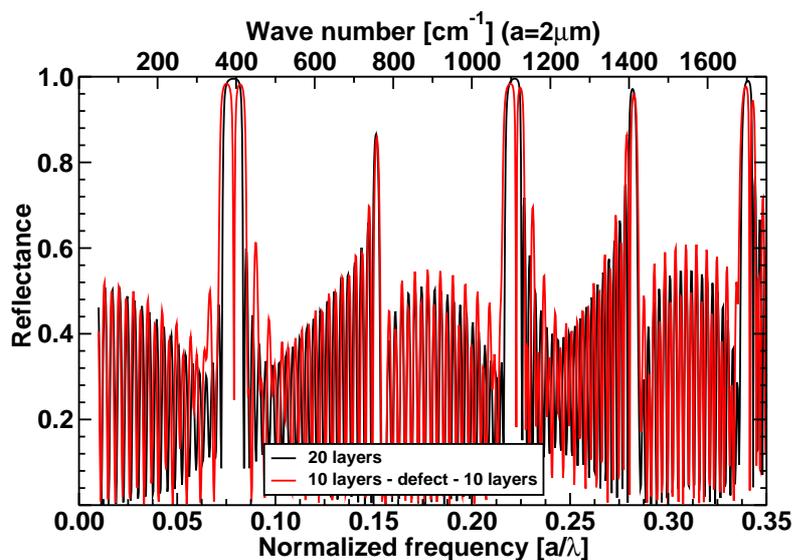


Abbildung 3.24.: Reflexionssimulation für einen 20-Schicht-PhC $d_{z,1} = d_{z,2} = 1,5a$ mit $r_1 = 0,35a$ und $r_2 = 0,41a$, sowie für einen mit eingebautem Defekt (eine Schicht doppelt so groß). Hexagonales Kristallsystem mit Luftlöchern in Silizium ($\epsilon_r = 11,6$).

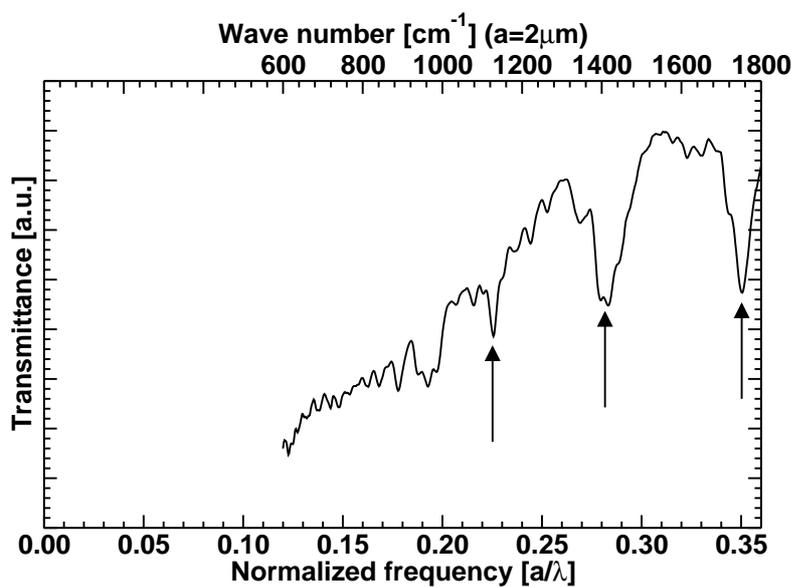


Abbildung 3.25.: Transmissionsmessung für einen PhC parallel zur Porenachse mit den Parametern aus Abbildung (3.24). Die Pfeile geben die Lagen der Stop-gaps an.

3. Oberflächenzustände

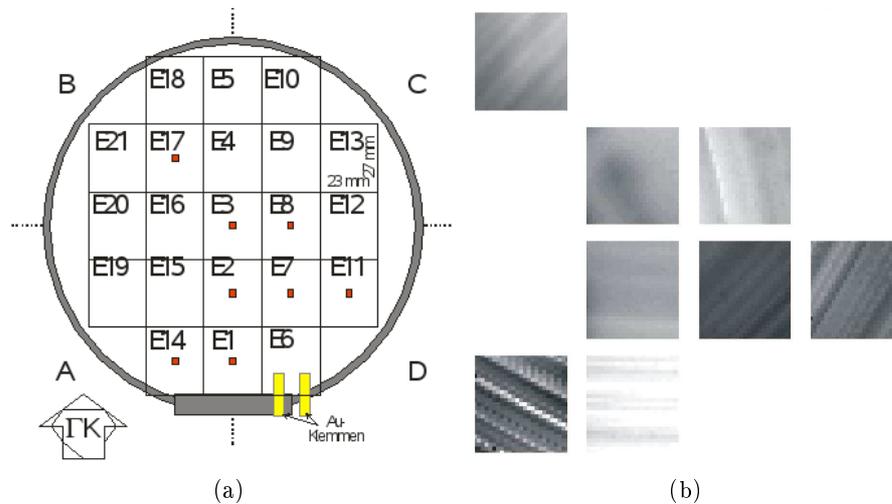


Abbildung 3.26.: Ausmessung von Radiusvariationen. (a) Waferpositionsschema. Vermessene Proben wurden mit roten Punkten gekennzeichnet. (b) Es wurden mehrere Positionen auf dem Wafer vermessen und die Hauptfrequenzposition farblich kodiert. Deutlich zeichnen sich Ringe, so genannte Striations, ab. Diese beruhen auf Dotierschwankungen. Die 2D-Reflexionsaufnahmen wurden so angeordnet, dass sie den Bruchpositionen aus dem Wafer entsprechen. $a = 4,2\mu\text{m}$, $\nu \approx 1030\text{cm}^{-1}$. Streuung ca. 1%. Messungen durch T. Geppert, MPI Halle.

das exakte r/a -Verhältnis unbekannt ist. Durch die Vorgabe des Detektors können keine Wellenzahlen kleiner als 600cm^{-1} bestimmt werden.

Eine Porenpositionsmodulation ist wegen der Lithographievorgabe und des Ätzverfahrens nicht zu erwarten: Die Ätzkeime zeigen eine ausreichend gute Positionstreuung. Eine Analyse von SEM-Aufnahmen zeigte zwar eine gewisse Streuung, die Einflüsse von der Messmethode und der Bildauswertung auf den Fehler könnten jedoch größer sein, als die Streuung der Porenposition selbst. Die Analyse wurde für eine Probe mit $2\mu\text{m}$ Gitterabstand durchgeführt. Für die Zielgitterkonstante von $4,2\mu\text{m}$ dürfte sich der Fehler mindestens halbieren. Eine Porengrößenmodulation ist dagegen auf Grund von Dotierschwankungen zu erwarten. Die Dotierschwankungen besitzen eine Ringstruktur mit dem Zentrum in der Mitte des Wafers. Die Porenradiusvariation schlägt sich in der Lage der Bandlücken und damit der Reflexionsmaxima nieder. Aus 3D-PWE-Bandstrukturrechnungen lässt sich schließen, dass eine Radius-Skalierung von -5% bis +5% sich linear in der Lage der Bandlücke ausdrückt.

In Abbildung <3.26> sind mehrere Reflexionsmessungen zu finden. Hierbei wurden in einem xy-Raster verschiedene Positionen auf einer hergestellten Probe angefahren und lokal die Spektren bestimmt. Anschließend wurde ein charakteristisches Maximum herausgesucht, und die Frequenzänderung (Δf) zu jedem vermessenen Spektrum bestimmt

und aufgetragen. Proben von verschiedenen Stellen des Wafers wurden hergestellt und so vermessen. In der Abbildung wurden diese dann der ungefähren Lage auf dem Wafer zugeordnet. Es lassen sich schön die Striations, also die konzentrischen Dotierschwankungen, erkennen. Die Schwankung je Probe betrug etwa 1%. Somit ist die Radiusvariation etwa 1% (siehe Betrachtung weiter oben). Trägt man die Radiusvariation in Abbildung (3.22) ein, so erhält man eine freie Weglänge für Photonen von etwa $40a$. Aus dem Transmissionsexperimenten am IPM in Freiburg (Tabelle (3.2)) lässt sich ebenfalls eine freie Weglänge ableiten, welche bei $> 100a$ liegt. Wie schon oben erwähnt wurde, sind die Simulationen eine Minimalabschätzung. Die Oberflächenabtastbilder aus Abbildung (3.26) wurden über eine große Probenfläche erstellt. Die vermessen PhCs am IPM-Freiburg waren deutlich kleiner. Die lokale Streuung kann geringer ausgefallen sein, was die hohe gemessene freie Weglänge erklärt. Matthias [38] hatte sich ebenfalls mit der lokalen und globalen Unordnung in makroporösem Silizium-PhCs beschäftigt. Seine FTIR-Messungen ergaben ebenfalls konzentrische Ringe aufgrund von Dotierschwankungen, welche in der gleichen Größenordnung waren wie die hier vorgestellten. Seine lokale Unordnung erfasste er durch SEM-Aufnahmen und Nächstnachbar-Abstandsbestimmungen. Sie betrug etwa 7% (Halbwertsbreite). Die in dieser Arbeit über die gleiche Methode bestimmte lokale Unordnung war dagegen mit 3% etwas geringer. Der Einfluss der Messmethode (Anschleifen, SEM, Bildauswertung) auf die Streuung wird als zu hoch eingeschätzt, als dass man dieses Verfahren anwenden dürfte. Dies soll anhand einer Abschätzung begründet werden: Ein SEM-Bild bestehend aus 30 auf 30 Poren mit jeweils $2\mu\text{m}$ Porenabstand hat eine Kantenlänge von 1280 Pixel. Demnach entspricht ein Pixel im Bild $30 \cdot 2\mu\text{m}/1280 = 46\text{nm}$. Die Fehlpositionierung um ein Pixel wirkt sich somit auf eine Variation um 2,3% aus. Die SEM-Aufnahmen liefern keine Schwarz-Weiss-Bilder mit scharf abgegrenzten Porenrändern. Auf den Porenwänden befindet sich Oxid, welches die Ränder leicht überstrahlen lässt. Die Probe muss im SEM fixiert werden. Eine leichte Verkipfung stellt sich immer ein. Diese Verkipfung wird auch durch das vorige Anschleifen verstärkt. Eine anschließende Schwarz-Weiss-Filterung muss den Umschlagpunkt der Grauskala richtig wählen. Dies kann von Pore zu Pore unterschiedlich sein, wird aber einheitlich für das gesamte Bild durchgeführt. Um die Schwierigkeiten zu verdeutlichen wird ein künstlicher SEM-Kristall-Bild mit über 13000 Poren generiert. Ein $\sigma_p = 0,01$ wurde gewählt. Die gleichen Bildauswertungsalgorithmen wie für die echten SEM-Bilder wurden auf das künstliche angewandt. Statts der eingestellten 1% Standardabweichung wurde eine von 1,5% bei einer künstlichen Auflösung von etwa 30nm pro Pixel gefunden. Die künstliche Auflösung entspricht genau den 1,5% aus der Bildanalyse. Wird eine Abweichung von 5% eingesetzt so erhält man nach der Analyse 6,7%.

3.3. Zusammenfassung

Mit dem ARL-Konzept der Oberflächenmoden lässt sich die Transmission an den Bandkanten entscheidend verbessern. Das Verfahren bietet zudem die Möglichkeit direkt auf einer Lithographiemaske integriert zu werden. Bei der Herstellung und Vereinzelung von PhC-Membranen ist damit ein Durchbruch erreicht worden.

3. Oberflächenzustände

3D-Simulationen des PhCs mit ARL zeigen eine Transmission in der Bandlücke, welche auch im Experiment wieder gefunden wurde. Die vorhergesagten Oberflächenmoden konnten ebenfalls in Reflexionsmessungen bestätigt werden.

Aufgrund von Unordnungssimulationen konnte die nötige Fertigungstoleranz für PhCs abgeschätzt werden. Ein Unordnungsbestimmungsverfahren durch Porentiefenmodulationen wurde angewandt. Als Hauptursache für die Porendurchmesservariation wurden Dotierungsschwankungen festgestellt. Eine mittlere freie Weglänge der Photonen von $> 100a$ konnte gemessen werden.

4. Negative Brechung

Seit der bahnbrechenden Veröffentlichung von Pendry [39] im Jahre 2000 wird negative Brechung in unterschiedlichen Systemen extensiv in der Literatur diskutiert. Veselago [40] hatte in den 60ern das Thema erstmals aufgegriffen. Um seinen Vorschlag zu diskutieren wird ein kartesisches Koordinatensystem erstellt. Auf die x -Achse wird die Permittivität und auf die y -Achse die Permeabilität aufgetragen. Daraus resultieren vier Quadranten (Abbildung (4.1)):

- I. $\mu > 0, \epsilon > 0$, normales Medium
- II. $\mu > 0, \epsilon < 0$, absorbierendes Medium
- III. $\mu < 0, \epsilon < 0$, negativ brechendes Medium
- IV. $\mu < 0, \epsilon > 0$, absorbierendes Medium

Die physikalisch anerkannten Bereiche sind die Quadranten I, II und IV. Der Brechungsindex wird nach:

$$n = \sqrt{\frac{1}{\epsilon_r \mu_r}} \quad (4.1)$$

berechnet. Sind beide Komponenten positiv, so erhält man einen positiven Brechungsindex und ein normales Reflexions- und Brechungsverhalten. Ist nur eine Komponente negativ, so wird das Ergebnis imaginär. Die Welle darf nicht in das Medium eindringen. Die Intensität fällt exponentiell ab.

Ein Sonderfall nimmt nun der III. Quadrant ein (Abbildung (4.1)(c)). Die Wurzel liefert formal zwei Lösungen. Die negative wird klassisch betrachtet nicht verwendet, da sie unphysikalisch ist. Sie wurde in der Natur noch nicht beobachtet, da ein solches natürliches Material mit $\mu < 0$ und $\epsilon < 0$ nicht existiert bzw. gefunden wurde. Künstlich lassen sich solche Materialien durch Verwendung von Split-Ring-Resonatoren [41] oder ihre Derivate herstellen. Diese Metamaterialien haben zwei Resonanzen, von denen eine auf die elektrische und die andere auf die magnetische Feldkomponente wirkt. Werden beide Resonanzfrequenzen überlagert und spektral dicht zueinander gebracht, so erhofft man sich gleichzeitig ein negatives effektives μ und ϵ .

Wird die negative Lösung der Wurzel nun als die richtige ausgewählt, so kann man ungewöhnliche Eigenschaften vorhersagen. Man beobachtet in FDTD- und FEM-Simulationen, welche die Maxwell-Gleichungen direkt lösen ohne den Brechungsindex zu benutzen, eine negative Brechung. Trotz dieses positiven, ermutigenden Simulationsergebnisses gibt es Bedenken, denn die Energiedichte wird klassisch wie folgt ausgerechnet:

$$U = \frac{1}{2} (\mathbf{E}\mathbf{D}^* + \mathbf{H}\mathbf{B}^*) \quad (4.2)$$

4. Negative Brechung

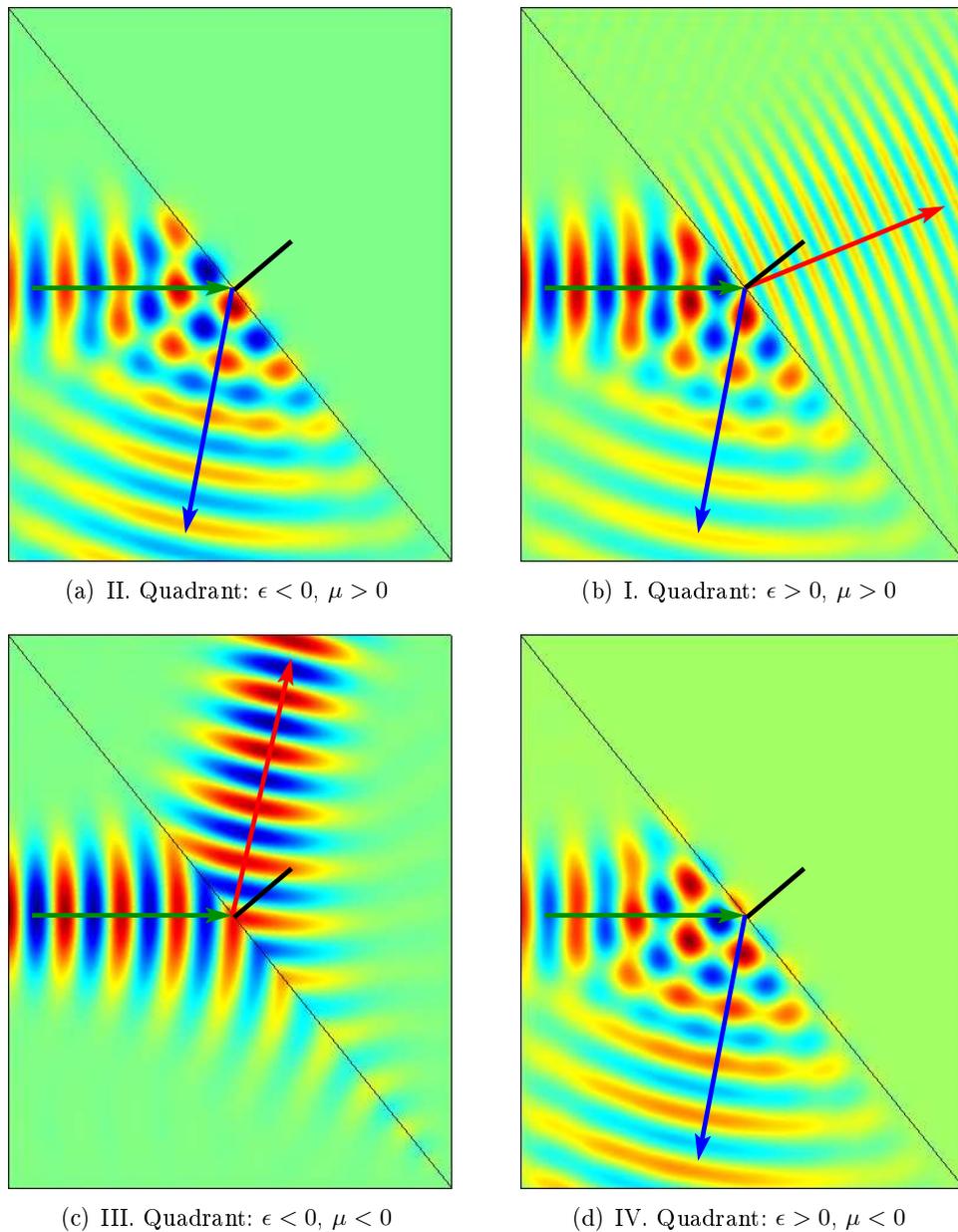


Abbildung 4.1.: Brechungs- und Reflexionsverhalten für die verschiedenen Kombinationsmöglichkeiten von ϵ und μ . Der grüne Pfeil beschreibt die Einfallsrichtung, der blaue den reflektierten Strahl und der rote den gebrochenen. Der schwarze Strich kennzeichnet das Lot. In (c) tritt negative Brechung auf.

Daraus ergibt sich ein Konflikt: Man stelle sich jetzt jeweils einen halbumendlichen Raum aus positiv brechendem Material (PIM=Positive Imaging Material) und negativ brechendem Material (NIM=Negativ Imaging Material) vor. Eine ebene Welle soll durch beide Medien propagieren. Es kommt zu keiner Reflexion, da kein Impedanzsprung vorliegt. Möchte man den Energieinhalt des gesamten Raumes errechnen, so muss man über die Energiedichte integrieren. Eine ebene Welle hat formal eine unendliche hohe Energie. Mit einem Gaußschen Strahl mit der Taille an der Grenze zwischen beiden Medien kann man dieses Problem umgehen. Der PIM-Halbraum liefert einen endlichen positiven und der NIM einen gleich großen negativen Wert. Folglich verschwindet in Summe die Energie. Dies steht im Widerspruch zu den thermodynamischen Grundgesetzen. Schon eine stationäre negative Energiedichte ist sehr schwer vorstellbar.

Landau und Lifshitz [42] haben schon in den 50er Jahren Überlegungen zur Energiedichte angestellt, für den Fall, dass sich die Polarisation stark ändert. Dies passiert zum Beispiel in der Nähe von Resonanzfrequenzen. Sie gehen von einer modulierten harmonischen Welle aus. Die Modulationsfrequenz ist dabei sehr viel kleiner als die Frequenz der harmonischen Welle. Sie erhalten folgende Lösung:

$$U = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial(\epsilon(\omega)\omega)}{\partial\omega} \epsilon_0 |\mathbf{E}|^2 + \frac{\partial(\mu(\omega)\omega)}{\partial\omega} \mu_0 |\mathbf{H}|^2 \right) \quad (4.3)$$

Aus thermodynamischen Gründen leiten sie folgende Nebenbedingungen her:

$$\frac{\partial(\epsilon(\omega)\omega)}{\partial\omega} > 0 \quad (4.4)$$

$$\frac{\partial(\mu(\omega)\omega)}{\partial\omega} > 0 \quad (4.5)$$

Für ein Medium fordern sie somit eine stetig steigende Materialfunktion, wobei die Funktion selbst negativ sein kann.

Die Simulationen in Abbildung <4.1> wurden mittels der FE-Methode berechnet. Quadrant III kann nicht einfach durch Setzen der Materialfunktionen auf $\epsilon = \mu = -1$ erhalten werden. In diesem Fall explodiert das Rechenergebnis. Durch Addition einer kleinen imaginären Zahl zu ϵ und μ lässt sich jedoch ein stabiles Ergebnis erzielen. Da sich die FEM bisher als sehr robust erwiesen hat, kann dieses Verhalten nicht auf ein numerisches Problem zurückgeführt werden. Viel mehr kann man es auch bildlich erklären: Im harmonischen Fall wird nur eine Frequenz betrachtet. Diese besitzt aber ein unendlich großes Energiereservoir. Es wird nun soviel Energie in das System gepumpt bis ein stabiler Zustand erreicht wurde. Da aber der NIM-Bereich die Energie genauso schnell wieder vernichtet (Energiebilanz= 0) findet der Solver keine Lösung. Durch die Einführung der imaginären Anteile wird Energieabsorption erlaubt und die Landau-Lifshitz-Nebenbedingungen werden eingehalten. Somit bleibt ein endlicher positiver Energiewert. Dies korrespondiert auch mit der Überlegung, dass jedes dispersive Verhalten einen imaginären Anteil der Materialfunktionen erzwingt (Kramers-Kronig-Relation). NIM-Bereiche absorbieren somit immer.

4. Negative Brechung

4.1. Negative Brechung mit photonischen Kristallen

Die negative Brechung oder das anormale Brechungsverhalten kann bei Materialien im I. Quadranten mit positivem ϵ und μ gefunden werden. Dieses wurde schon sehr früh von Zengelre [43] und Russell [44] in gekoppelten Wellenleitern beobachtet. Zur Vorhersage und Beschreibung bedient man sich der Äquifrequenzflächen (Kapitel 2.3). Man stelle sich einen 1D-PhC bestehend aus zwei unterschiedlichen Komponenten vor. Dieser hat in seiner Hauptausbreitungsrichtung eine Bandstruktur (Abbildung (2.11)). Wird der Einfallsvektor verkippt so erfahren die Bandlücken eine Blau-Verschiebung. Generiert man nun aus allen Verkippungsrichtungen eine Äquifrequenzfläche, so kann man das Brechungsverhalten vorhersagen. Im ersten Band bei niedrigen Frequenzen sind die Flächen noch kreisförmig und normale Brechung wird beobachtet. Mit steigender Frequenz verformen sich die Flächen und öffnen sich an Bandlücken in bestimmten Richtungen. An diesen Öffnungen kann nun anormales Brechungsverhalten gefunden werden, da die Ausbreitungsvektoren immer senkrecht auf den Flächen stehen. Ein Strahlenbündel wird z.B. stark divergierend oder fokussierend abgelenkt. Auch in doppelbrechenden Medien ist für bestimmte Einfallswinkel negative Brechung möglich. Im Unterschied zu einer optischen Linse bleibt die Grenzfläche zwischen Luft und PhC flach und wird nicht gekrümmt.

Neben dem Konzept der anormalen Brechung bei geöffneten Äquifrequenzflächen wird diese auch bei runden, geschlossenen und fast kreisförmigen Flächen in 2D PhCs unter bestimmten Bedingungen vorhergesagt [45]. Man leitet für diese einen negativen Phasen-Brechungsindex her, da die Flächen mit steigender Frequenz kleiner werden. Durch den negativen Brechungsindex zeigen die Oberflächennormalen der Äquifrequenzflächen nach innen. Diese Beschreibungsmethode wird in diesem Kapitel reflektiert, Probleme aufgezeigt und ein neues Modell vorgeschlagen.

Zuerst soll ein kleiner Überblick über veröffentlichte Artikel gegeben werden.

Aktuelle Arbeiten zur anormalen Brechung aus der Literatur

Es gibt verschiedene Frequenzbereiche in verschiedenen Kristalltypen und Polarisationen bei denen negative Brechung auftreten soll. Ein spezieller Bereich im quadratischen Gitter mit Stäben in Luft wird „All Angle Negative Refraction“ (AANR) genannt [46]. Dieses Konzept basiert auf geöffneten, konvexen EFS. Folglich ist ein Stopgap in andere Kristallrichtungen enthalten. Dies wurde auch in [47] als eine konträre Erklärung zum negativen Brechungsindexmodell gefunden. Konvexe AANR sollen ab hier mit c-AANR (convex-AANR) bezeichnet werden. Ein Stopgap erzwingt somit das beobachtete negative Brechungsverhalten. Lou et. al. [48] haben eine c-AANR Konfiguration beschrieben, welche eine Abbildung viel kleiner als die verwendete Wellenlänge verspricht und somit das Beugungslimit unterschreitet. Oberflächenmoden zeichnen sich dafür verantwortlich.

Notomi [45] schlug ein anderes Konzept der negativen Brechung vor. Auch runde geschlossene EFS scheinen unter bestimmten Bedingungen negative Brechungseigenschaften aufzuweisen. Dieses Konzept soll ab jetzt mit o-AANR bezeichnet werden. Der Buchstabe o soll die geschlossene EFS symbolisieren im Gegensatz zu dem Buchstaben c der für eine offene steht.

4.1. Negative Brechung mit photonischen Kristallen

Von Berrier et. al. [49] wurde der fokussierende Effekt der anormalen Brechung im Infrarotbereich an einem hexagonalen Kristall mit Luftlöchern in hochbrechendem Material experimentell nachgewiesen (o-AANR). Es wurde keine spezielle Oberflächenterminierung verwendet. Der Kristall war komplett von hochbrechendem Material umgeben. De Leon und Roux [50] haben den gleichen Kristalltyp mit Hilfe der FDTD-Methode und der räumlichen Fouriertransformation untersucht. Der Kristall war auch in diesem Fall umgeben von hochbrechendem Hintergrundmaterial. Dies schränkt den verwendbaren Winkelbereich ein, für den negative Brechung auftritt.

Zang [51] hat ein hexagonales Kristallsystem bestehend aus dielektrischen Stäben mit Kupferkern auf negatives Brechungsverhalten untersucht (o-AANR). Weiterhin hat Zang [52] die Auflösungsabhängigkeit der negativ-brechenden Schicht von der PhC-Dicke und des Abstandes der Quelle untersucht. He et. al. [53] haben die Fokussierungseigenschaften in einer c-AANR-Konfiguration mit Hilfe der Layer-KKR-Methode einer PhC-Schicht näher untersucht. Die Layer-KKR-Methode erzwingt perfekte Endungen. So werden spezielle Oberflächenmoden unterbunden. Chien et. al. [54] kommen zu dem Schluss, dass negative Brechung auf gerichtete Beugung in einer c-AANR-Konfiguration zurückzuführen ist. Wang und Kempa [55] haben den Einfluss von Unordnung auf den negativen Brechungsindex-Effekt analysiert (o-AANR).

Yang et. al. [56] haben die Fourier-Imaging-Technique (FIT) auf negative Brechung im 2D quadratischen Kristall angewandt ($r/a = 0,35$, Luftlöcher in Silizium, $TE=H_z$ -Polarisation, $a/\lambda = 0,3$, o-AANR). Die FIT geht einen indirekten Weg zur Bestimmung der Feldverteilung, im Gegensatz zu den vorgestellten Verfahren FEM (Kapitel 2.2.3) und FDTD (Kapitel 2.2.5). Bei der FIT wird zuerst die Dispersionsrelation, also das Banddiagramm bestimmt. Aus diesem werden für eine Frequenz die Phasen-Brechungsindizes für verschiedene Kristallrichtungen gewonnen. Eine Lichtquelle wird zerlegt nach ihren räumlichen Frequenzkomponenten. Für die verschiedenen Ausbreitungswinkel sind nun die Brechungsindizes aus der Bandstruktur bekannt. Für jede k-Komponente wird jetzt die analytische Lösung im Raum angegeben und anschließend zurücktransformiert. Hierbei wird angenommen, dass der PhC als effektives Medium beschrieben werden kann. Jegliche Kopplungseffekte und insbesondere nicht-koppelnde Bänder werden vernachlässigt. Der Einfluss von Oberflächenmoden bleibt ebenso außen vor. Martinez und Marti [57] haben den Einfluss der Oberflächenorientierung für dieses quadratische Gitter untersucht (o-AANR).

Im Folgenden wird nur das hexagonale Kristallsystem mit Luftlöchern im hochbrechenden Material in $TM=E_z$ -Polarisation betrachtet (o-AANR). Auf andere Kristallsysteme oder Polarisationen wird bei gegebener Stelle hingewiesen und die Resultate genannt.

4.1.1. Numerische Simulation der negativen Brechung

Um die Bandstruktur eines photonischen Kristalls und seine negative-Brechungsindex-Eigenschaft zu berechnen, wird eine PWE-Methode (Kapitel 2.2.2) benutzt. Für Transmissionsrechnungen und Streusimulationen an einem endlichen PhC wird in dieser Arbeit FEM (Kapitel 2.2.3) eingesetzt. Eine PML grenzt bei Streusimulationen an das FEM-Rechengebiet an, um Reflexionen zurück ins Innere zu minimieren.

4. Negative Brechung

Um erste grundlegende Informationen über die negative Brechung zu bekommen, genügt es das Banddiagramm zu bestimmen. Dieses beinhaltet laut Literatur alle nötigen Informationen um negative Brechung vorauszusagen (Abbildung (4.1.1)(a)). Von Notomi [45] wurde vorhergesagt, dass das zweite Band des zweidimensionalen hexagonalen PhCs die Bedingungen für negative Brechung erfüllt. Die Parameter Luftzylinder mit $r/a = 0,4$ in hexagonaler Symmetrie mit Silizium oder GaAs als Umgebungsmaterial wurden gewählt.

Abbildung (4.1.1)(b) zeigt die zugehörigen Äquifrequenzflächen. Mit steigender Frequenz werden die Radien der Kreise kleiner. Dies korrespondiert mit der negativen Steigung des zweiten Bandes. Für die Arbeitsfrequenz von $f = 0,3$ erhält man ein fast kreisförmiges Verhalten. Der durchschnittliche Brechungsindex berechnet aus der Gruppengeschwindigkeit beträgt ca. $n_{\text{gr}} \approx -4,2$. Diese Zahl erhält man, wenn man die Steigung für jede Raumrichtung berechnet und mittelt. Es ist ein auf den ersten Blick verblüffendes Ergebnis, da das Entfalten des zweiten Bandes eine positive Steigung ergibt [58]. Den Grund für das Entfalten des Banddiagramms findet man im Leer-Gitter-Test. Wenn der Brechungsindexunterschied sehr klein wird, sollte kein negativer Brechungsindexeffekt mehr auftreten, da nur noch ein homogenes Medium vorliegt. Ein homogenes Material mit einem beliebigen Brechungsindex n hat per Definition keinen negativen Brechungsindex. Notomi [45] hat sowohl dieses Verhalten als auch Schwierigkeiten bei der Berechnung des Phasenbrechungsindex eines leeren Gitters folgendermaßen beschrieben: Der \mathbf{k} -Vektor wird am Γ -Punkt zu null, folglich auch der Phasen-Brechungsindex. Hinzu kommt, dass keine einfache ebene Welle vorliegt, sondern eine Summe vieler ebener Wellen [58]. Die k_{\parallel} -Erhaltung gilt für diesen Fall nicht. Deshalb kann man die negative Brechung nicht allein durch die Dispersionsrelation und Äquifrequenzflächen erklären. Nichtsdestotrotz zeigen FDTD- und FEM-Simulationen eine negative Brechung. In Abbildung (4.3) fällt ein Strahl mit $f = 0,3$ unter 45° von unten rechts kommend auf den PhC ein. Ein Teil des Strahls wird unter normalem Reflexionsverhalten nach unten links reflektiert. Aber ein Großteil der Energie tritt in den Kristall ein, wird unter negativer Brechung transmittiert und kommt auf der gegenüberliegenden Kristallseite wieder aus.

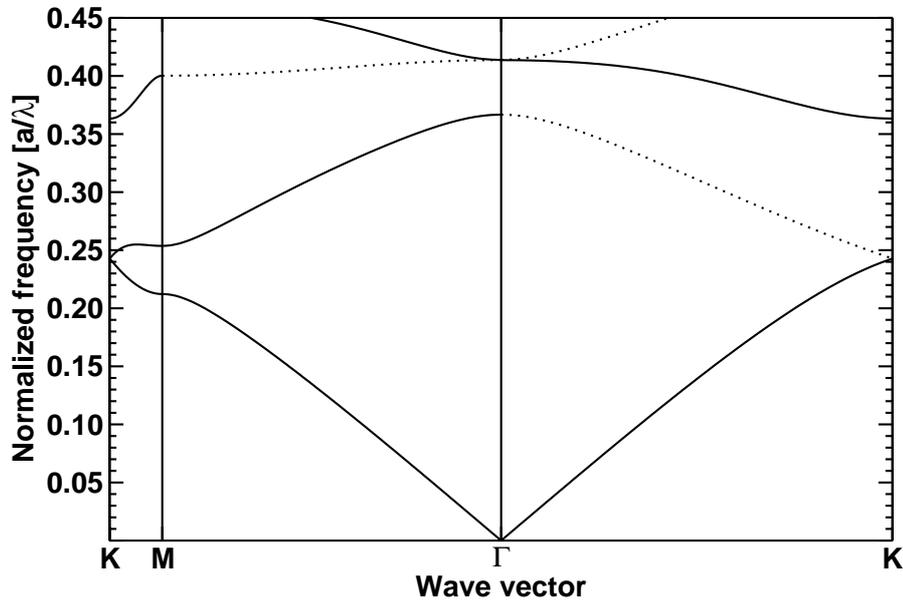
Im Folgenden soll ein Modell entwickelt werden, welches das negative Brechungsverhalten erklärt, ohne einen effektiven negativen Brechungsindex zu bemühen.

4.2. Das Negative-Brechungs-Modell

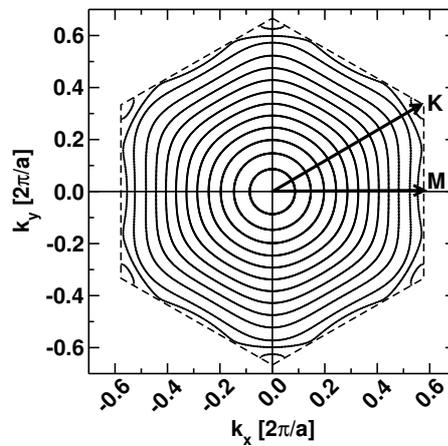
Die Gruppentheorie sagt voraus, dass die $\Gamma\mathbf{K}$ -Richtung des zweiten Bandes eine antisymmetrische Blochmode aufweist und deshalb eine ebene Welle nicht an diese koppeln kann. Dieses Verhalten soll über die Berechnung der Kopplungsstärke verdeutlicht werden:

$$\xi = \int_{WS} E_{\text{PhC}}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}_{\text{extern}}\mathbf{r}} d\mathbf{r} \quad (4.6)$$

mit $\mathbf{k}_{\text{extern}}$ als externen Wellenvektor des Umgebungsmaterials und E_{PhC} als die E-Feldverteilung innerhalb des Kristalls. Die Kopplungsstärke ist in diesem Fall nichts anderes als die nullte Fourierkomponente.



(a) PhC-Bandstruktur. Die gestrichelten Kurven kennzeichnen für ebene Wellen nicht koppelnde Bänder.



(b) Äquifrequenzflächen des zweiten Bandes, Kurven von außen nach innen: $f = 0,25; 0,255; 0,26; 0,27; \dots; 0,35; 0,36$. Sie sind nahezu kreisförmig.

Abbildung 4.2.: Banddiagramm (a) und Äquifrequenzfläche (b) eines hexagonalen Kristalls. ($\epsilon = 11,6$, $r/a = 0,40$, TM= E_z -Polarisation). Luftlöcher in Silizium.

4. Negative Brechung

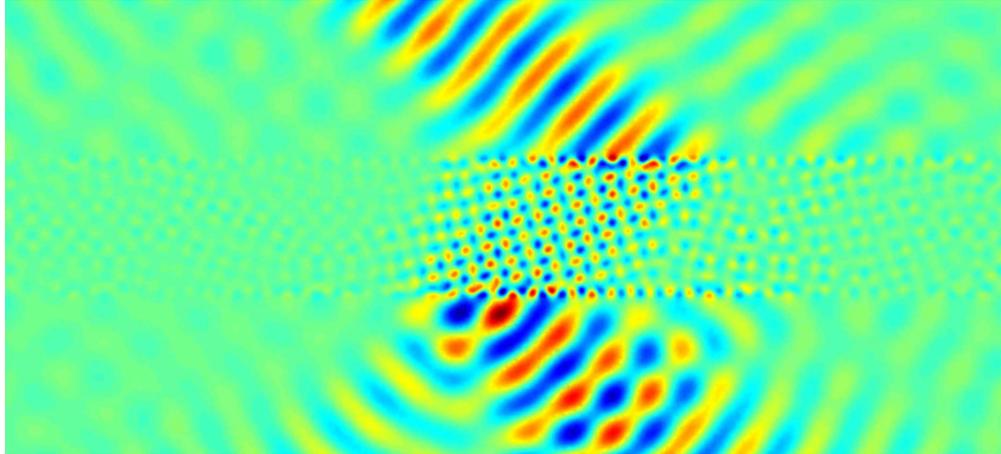


Abbildung 4.3.: PhC mit anscheinend negativem Brechungsindex. Ein Strahl $f = 0,3$ fällt von unten rechts (Einfallswinkel = 45°) auf den PhC. Es wird ca. 80% der Energie transmittiert. Die Oberflächennormale ist parallel zur $\Gamma\mathbf{M}$ -Richtung. Hexagonaler PhC, Luftlöcher $r/a = 0,4$, TM= E_z -Polarisation, $d_{\text{ARL}} = 0,85$.

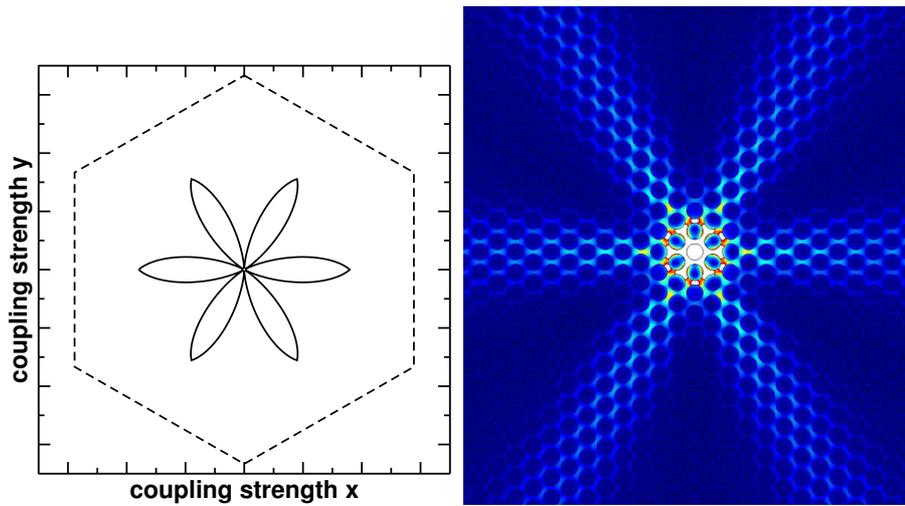
Das Ergebnis wurde in Abbildung $\langle 4.4(a) \rangle$ für alle Raumrichtungen berechnet. Aus diesem semi-analytischen Ergebnis ist leicht zu ersehen, dass eine Kopplung in $\Gamma\mathbf{M}$ -Richtung bevorzugt wird. Eine Kopplung in $\Gamma\mathbf{K}$ -Richtung findet wie erwartet nicht statt.

Der halbe Öffnungswinkel eines Blattes aus Abbildung $\langle 4.4(b) \rangle$ beträgt ca. 10° . Um diese Hypothese zu überprüfen, wurde eine FEM-Simulation durchgeführt. Eine Quelle wurde in die Mitte des gleichen hexagonalen PhC-Typs gesetzt. An den Rändern grenzt eine kreisförmige PML an. Abbildung $\langle 4.4(b) \rangle$ zeigt ein ähnliches Verhalten wie das semi-analytische Ergebnis in Abbildung $\langle 4.4(a) \rangle$. Die Feldsymmetrie des zweiten Bandes verbietet die Kopplung an eine ebene Welle in $\Gamma\mathbf{K}$ -Richtung. Also kann nur in einem kleinen Öffnungswinkel zwischen $\Gamma\mathbf{M}$ und $\Gamma(\mathbf{MK})$ ein Energietransport stattfinden. Der Leistungsfluss ist gaußförmig. Aus der Halbwertsbreite von Abbildung $\langle 4.4(b) \rangle$ kann man den halben Öffnungswinkel ausrechnen. Dieser beträgt, wie schon bei der Bestimmung der Kopplungsstärke gefunden wurde, ca. 10° .

4.2.1. Diskussion

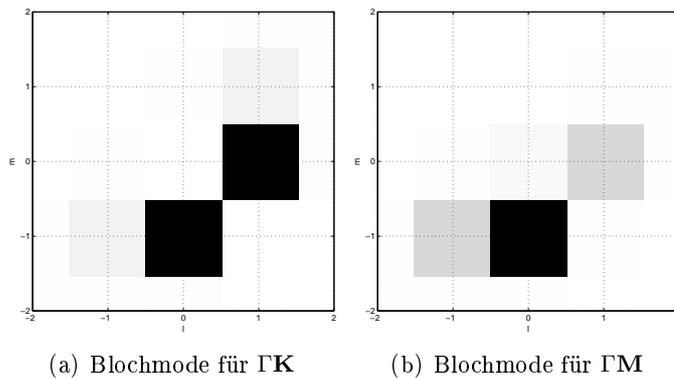
Die semi-analytischen und numerischen Simulationen zeigen, dass die negative Brechung nicht eindeutig durch die negative Steigung des zweiten Bandes erklärt werden kann. Es besitzt nämlich keine kreisförmige Äquifrequenzflächen für ebene Wellen, wie so oft in der Literatur behauptet, wegen nicht koppelnder Symmetrien. Ähnliches haben Ruan et al. [59] gefunden. Die FIT-Methode darf deswegen nicht angewandt werden.

In $\Gamma\mathbf{K}$ -Richtung wird die Blochmode hauptsächlich durch zwei ebene Wellen charak-



(a) Kopplungsstärke zwischen einer PhC-Mode und einer ebenen Welle. Eine gute Kopplung findet nur entlang $\Gamma\mathbf{M}$ statt. Der halbe Öffnungswinkel eines Blattes beträgt ca. 10° .
 (b) Emission in einem PhC. Der zeitgemittelte Leistungsfluss wurde aufgetragen. Dunkelblau bis hellblau zeigen niedrigen und rot bis weiß zeigen hohen Leistungsfluss. Energie wird nur entlang $\Gamma\mathbf{M}$ transportiert. Propagation in $\Gamma\mathbf{K}$ -Richtung ist wie erwartet verboten. Der Leistungsfluss ist gaußförmig. Der halbe Öffnungswinkel berechnet über die Halbwertsbreite ergibt ca. 10° .

Abbildung 4.4.: Kopplungsverhalten einer PhC-Mode an eine ebene Welle. Hexagonaler PhC, $r/a = 0,4$ Luftlöcher in Silizium ($\epsilon = 11,6$). Frequenz $a/\lambda = 0,3$.



(a) Blochmode für $\Gamma\mathbf{K}$ (b) Blochmode für $\Gamma\mathbf{M}$

Abbildung 4.5.: Zerlegung der Blochfunktion für das negative Brechungsindex-Band in der $\text{TM}=E_z$ -Polarisation in ebene Wellenkomponenten, hexagonaler Kristall mit Luftlöchern $r/a = 0,4$ in Silizium ($\epsilon = 11,6$), normierte Frequenz $f = 0,3$.

4. Negative Brechung

terisiert (Abbildung 4.5). Die PhC-Mode

$$E_z = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \sum_{l,m} b_{l,m} e^{i\mathbf{r}(l\mathbf{G}_1+m\mathbf{G}_2)} \quad (4.7)$$

vereinfacht sich zu:

$$E_z \approx e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} [b_{0,-1} e^{-i\mathbf{r}\mathbf{G}_2} + b_{1,0} e^{i\mathbf{r}\mathbf{G}_1}] \quad (4.8)$$

Die Gewichtungen der Wellen sind mit $b_{0,-1} = -b_{1,0}$ verknüpft. Es folgt schließlich für die Feldverteilung parallel zur Oberfläche:

$$E \sim \sin \frac{2\pi}{\sqrt{3}} r_{\parallel} \quad (4.9)$$

Somit ist $k_{\text{surface}} = \frac{2\pi}{\sqrt{3}} \approx 2\pi 0,577$. Dieses Ergebnis bestätigt die Gruppentheorieanalyse, sowie die numerischen Resultate des vorigen Kapitels. Eine Wellenfront in ΓK -Richtung hat einen sinusförmigen Verlauf. Das Überlappintegral muss folglich null werden.

Schwieriger wird die Deutung des Feldverhaltens an der Oberfläche, wenn der Kristall in ΓM -Richtung orientiert ist. Zeigt der Blochvektor in ΓK_+ -Richtung, so trägt die meiste Energie ein $k_{\parallel} = -2\pi$. Für den Fall ΓK_- entprechend $k_{\parallel} = +2\pi$. In Kontrast dazu ist die Wahl des richtigen Oberflächenabschlusses mit z.B. $d = 0,85$ ¹ wichtig. Damit kann eine Oberflächenmode (Kapitel 3) angeregt werden. Die Auswahl dieser ARL-Dicke erfolgt anhand Abbildung (A.6) auf Seite 118. In ΓM -Richtung ist reguläre Transmission erlaubt, weshalb das Oberflächenmodenmodell erst bei Verkippung in ΓK -Richtung zum Tragen kommt. Wegen der nichtkoppelnden Symmetrie liegt hier ein Pseudostopgap vor.

Oberflächenmoden durch geschickte Terminierung wurden von Xiao et. al. [60] für den negativen Brechungsindex genutzt. In deren Notation entspricht $d = 0,85$ $x = -0,35$, da sie x von dem Mittelpunkt zwischen zwei Poren hin zum PhC definieren und einen Bruch durch die Poren bevorzugen. Die Oberflächenmode erhöht die Transmission in Richtung ΓM für kleine Einfallswinkel. Dies ist auf resonante Effekte eines dünnen Steges zurück zu führen. Wenn der Einfallswinkel steigt, dann sorgt die Oberflächenmode für eine Kopplung in $\Gamma K_{\pm 1}$. Aber nur die ΓK_{-1} -Mode wird angeregt, da die andere eine verbotene Symmetrie aufweist.

Der negative Brechungseffekt in einer o-AANR-Konfiguration wird somit erklärt durch ein Pseudostopgap aufgrund von nichtkoppelnder Symmetrie und ist somit dem Erklärungsmodell von Kuo und Ye [47] ähnlich, welche ein echtes Stopgap am ersten Band als Ursache des c-AANR-Bereichs feststellen.

4.3. Experimentelle Verifikation der negativen Brechung im Mikrowellenbereich

Die in diesem Kapitel vorgestellten Simulationen und Messungen zeichnen sich im Vergleich zur Literatur [61] durch eine Besonderheit aus. Der Brechungsindex und damit

¹ $d = 0$ entspricht Bruch entlang des Porenmittelpunktes

4.3. Experimentelle Verifikation der negativen Brechung im Mikrowellenbereich

natürlich auch die dielektrische Konstante des verwendeten Materiales sind klein. In einen PMMA-Block wurden Löcher gebohrt, um damit einen 2D hexagonalen PhC nachzubilden. PMMA hat bei ca. 11GHz einen Wert von ca. $\epsilon = 2,60 \pm 0,03$ [62]. Dieser Wert kann als konstant zwischen 5GHz und 20GHz angesehen werden.

In Abbildung <4.6> sind Bandstruktur und EFS des PMMA-PhCs zu finden. Eine negative Brechung sollte im grün schattierten Bereich auftreten.

Negative Brechung für eine dielektrische Konstante von $\epsilon = 5$ wurde in [63] simuliert und vorher gesagt, wohingegen gleichzeitig für $\epsilon = [1, 2]$ kein Effekt in ΓM beobachtet wurde. Ein anormales Brechungsverhalten aufgrund des nichtkoppelnden Bandes wurde aber in ΓK -Richtung simuliert. Dies kann als ein intrinsisches und vom Brechungsindexkontrast unabhängiges Verhalten des Kristallsystems aufgefasst werden.

Der hier hergestellte Kristall ($8 \times 3 \times 41\text{cm}^3$, hexagonaler Kristall mit Luftlöchern von $r = 4\text{mm}$ in PMMA) wird mittels eines Transmissionsexperimentes untersucht. Als Quelle und Empfänger dienen Hornantennen. Die Quelle sitzt etwa 16cm vor dem Kristall und der Empfänger 30cm dahinter. Es wurde die $\text{TE}=\text{H}_z$ -Polarisation ausgewählt, da sie selbst bei kleinem Indexkontrast noch ein deutliches Stopgap aufweist. In Abbildung <4.7> sind Messung (schwarze Kurve) und Rechnung (rote Kurve) gegenüber der Frequenz aufgetragen. Die Messung ist ein Resultat aller beteiligten Übertragungsfunktionen (z.B. durch Koaxialleiter und Impedanzsprüngen an den Bauteilübergängen). Mittels einer Freiluftmessung, also ohne Kristall, bei identischen Parametern wurde eine I_0 -Messung durchgeführt. Die grüne Kurve in Abbildung <4.7> entspricht der schwarzen Ursprungsmessung normiert auf die I_0 -Messung.

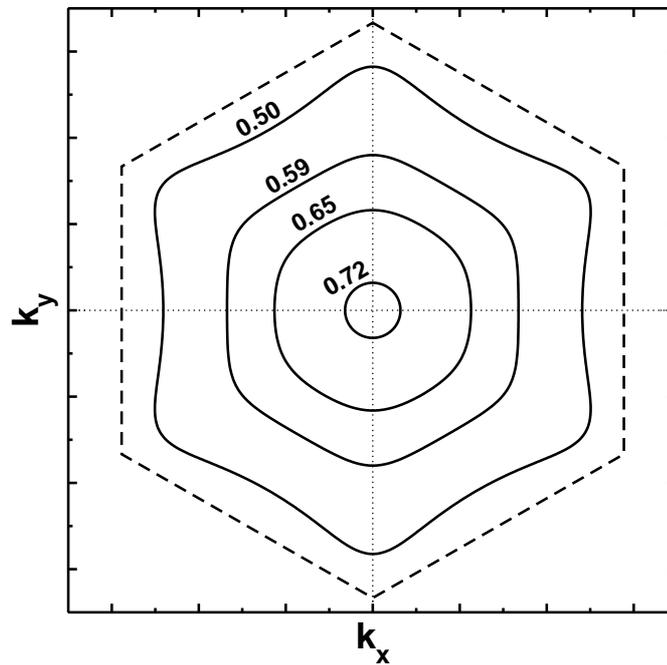
Es ist eine gute Übereinstimmung zwischen Theorie und Experiment zu beobachten. Ab 18GHz fällt die Empfindlichkeit des Detektors ab. Somit sind die Ergebnisse größer 19GHz nicht repräsentativ.

Im Folgenden soll das elektromagnetische Feld, das durch den Kristall gestreut wird, untersucht werden. Ein rechteckiger Hohlwellenleiter für das X-Band wird direkt vor den Kristall gesetzt. Das Feld hinter dem PhC wird mittels Sonde vermessen.

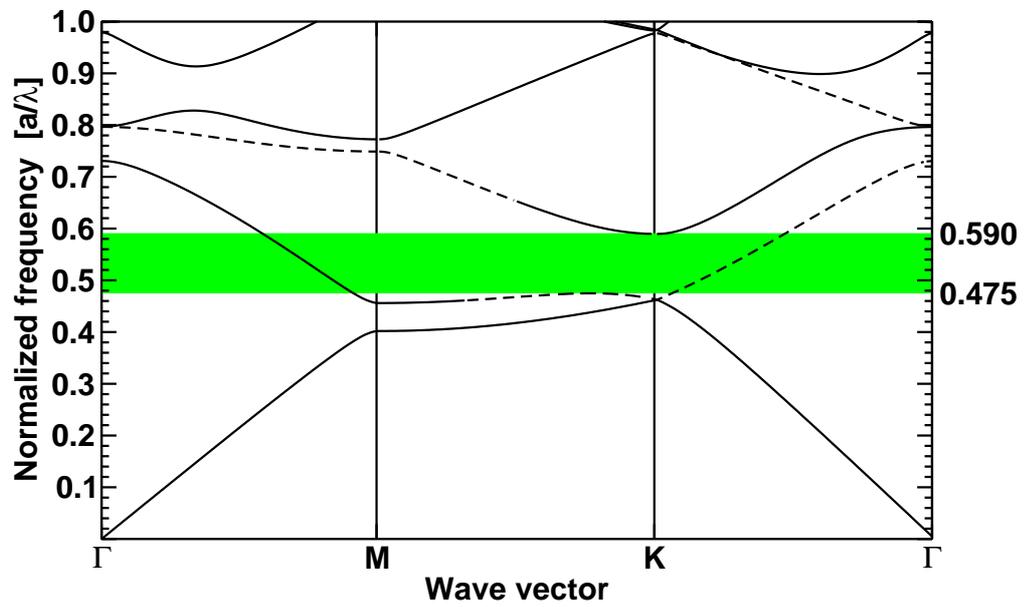
4.3.1. Nahfeldvermessung

Der negative Brechungsindex sollte ungewöhnliche Abstrahlungseigenschaften besitzen. Abbildung <4.8> gibt den Messaufbau wieder. Über einen rechnergesteuerten Mikrowellengenerator werden verschiedene Frequenzen eingestellt und mittels eines X-Band-Hohlleiters in den PhC eingekoppelt. Das dahinter liegende Nahfeld wird mit einer Hornantenne oder Punktantenne aufgefangen und die Leistung detektiert. Die Antenne mit angeschlossenem Powermeter detektiert die lokale elektrische Energiedichte. Das Messsignal korrespondiert mit dem Quadrat des Realteiles des E-Feldes. Die Maxima haben deshalb den Abstand einer halben Wellenlänge. Da die Energie noch in die z-Richtung verschwindet, müssen die Messungen mit \sqrt{y} skaliert werden. In Abbildung <4.9> ist eine Auswahl der Messergebnisse zu finden. Es bildet sich nach dem Kristall ein Strahl aus. Für eine X-Band-Apertur hätte man eine radiale Feldverteilung erwartet. Dieser fokussierende Effekt ist eine Eigenschaft von negativ brechenden PhCs. Die 17GHz -Messung zeigt eine kurze Fokussierung bis ca. $y = 6\text{cm}$ mit einer Strahlbreite von etwa $\Delta x = 2\text{cm}$.

4. Negative Brechung



(a) Äquifrequenzflächen



(b) Banddiagramm

Abbildung 4.6.: Hexagonaler 2D-Kristall, Luftlöcher in PMMA mit $\epsilon = 2,6$, $r/a = 0,4$.

4.3. Experimentelle Verifikation der negativen Brechung im Mikrowellenbereich

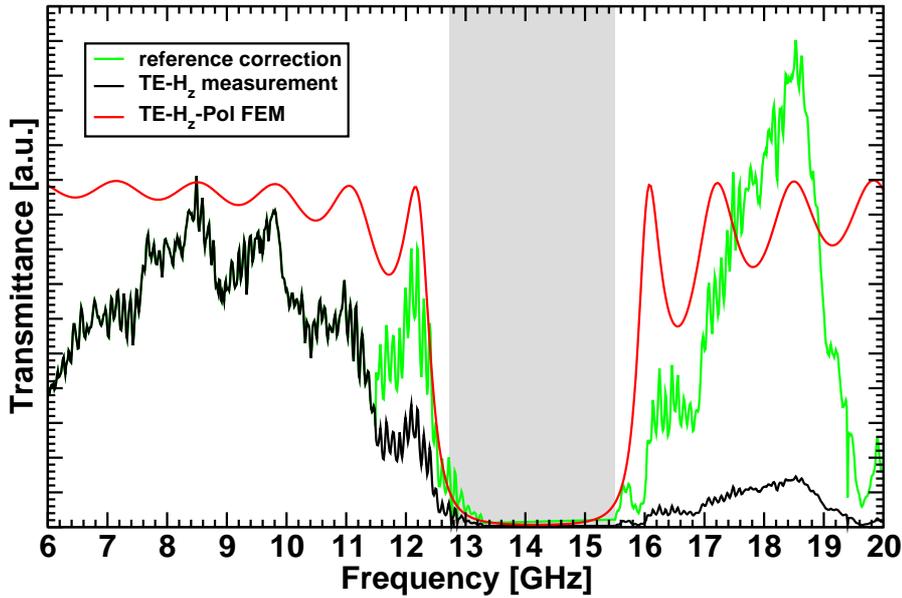


Abbildung 4.7.: Transmissionsvergleich zwischen Simulation und Messung, $\epsilon = 2,6$, Luftlöcher $r/a = 0,4$, hexagonaler Kristall, $TE = H_z$ -Polarisation, ΓM , Kristallgröße ca. $8 \times 3 \times 41 \text{ cm}^3$, $a = 10 \text{ mm}$. Aus einer Freiluftreferenzmessung wurde versucht den Verlauf zu korrigieren (grüne Kurve).

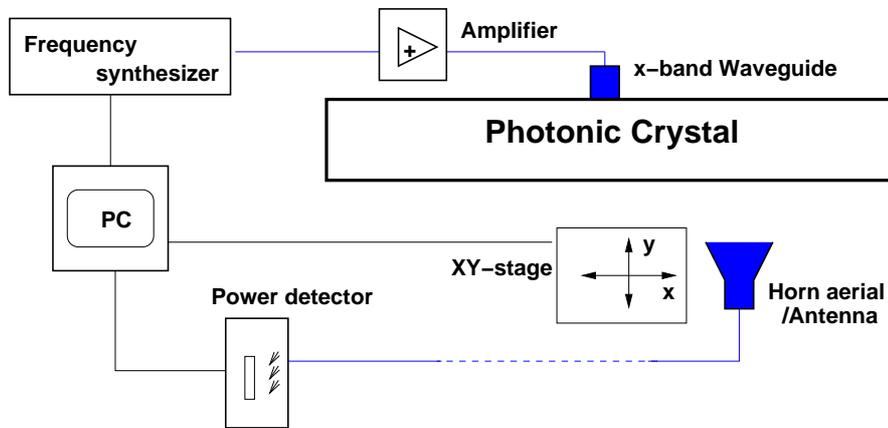
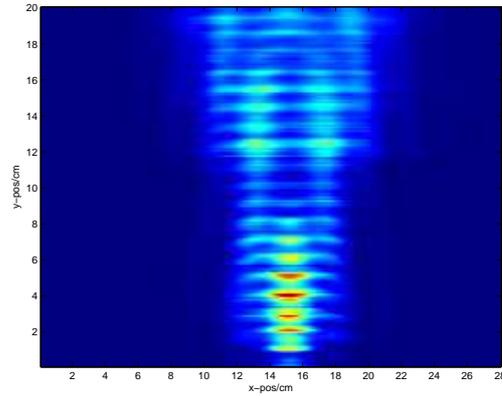
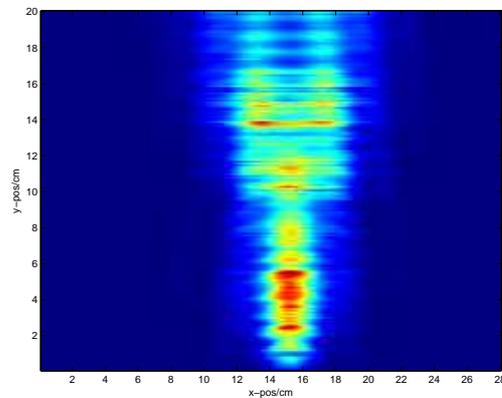


Abbildung 4.8.: Schema des Mikrowellenmessplatzes. Ein Rechner dient als Steuerzentrale. Mittels eines Mikrowellenfrequenzgenerators wird die eingestellte Frequenz erzeugt. Ein zwischengeschalteter Verstärker sorgt, falls es nötig wird, für genügend Ausgangsleistung. Ein X-Band-Hohlleiter koppelt das Signal an den PhC an. Das Feld dahinter wird mit einem xy-Motor und einer entsprechenden Antenne abgefahren. Die Leistung der detektierten Strahlung wird gemessen und mit dem PC aufgezeichnet.

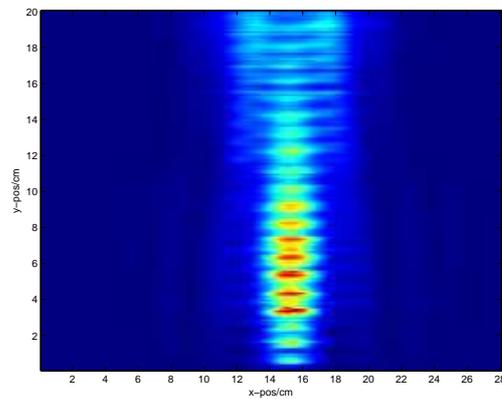
4. Negative Brechung



(a) $f = 17,0GHz$



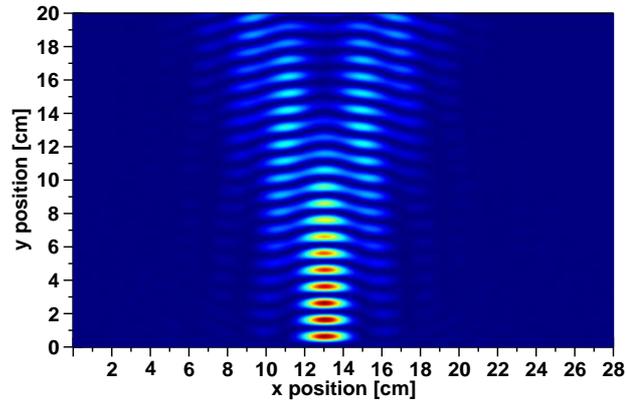
(b) $f = 17,5GHz$



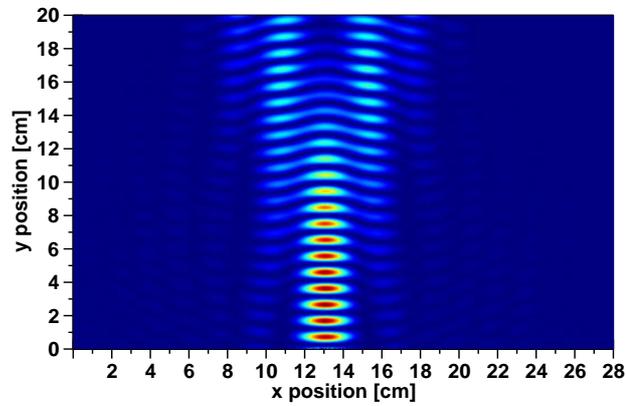
(c) $f = 18,0GHz$

Abbildung 4.9.: Streufeldvermessung eines hexagonalen PhCs $a = 10mm$ mit Luftlöchern ($r = 4mm$) in PMMA ($\epsilon = 2,6$), Messsignal entspricht $|\Re(E_z)|^2 \cdot \sqrt{x}$.

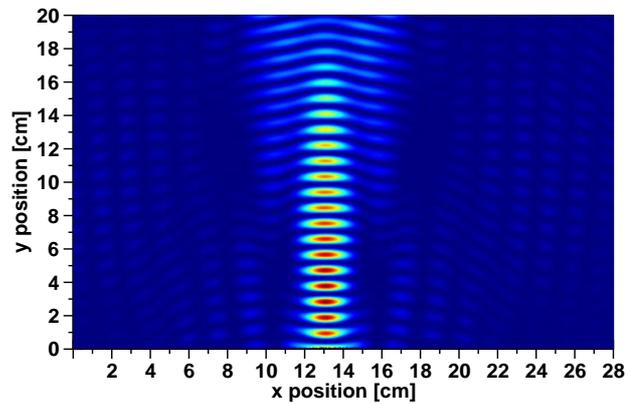
4.3. Experimentelle Verifikation der negativen Brechung im Mikrowellenbereich



(a) $f = 17,0GHz$, Transmission $T \approx 0,8$



(b) $f = 17,5GHz$, Transmission $T \approx 0,6$



(c) $f = 18,0GHz$, Transmission $T \approx 0,8$

Abbildung 4.10.: Streufeldsimulation eines hexagonalen PhCs, $a = 10mm$ mit Luftlöchern ($r = 4mm$) in PMMA ($\epsilon = 2,6$), $|\Re(E_z)|^2$.

4. Negative Brechung

Im weiteren Verlauf treten Seitenbanden auf und das Signal verbreitert sich. Bei größerer Frequenz (18GHz) bleibt die Fokussierung länger (bis $y = 12\text{cm}$) erhalten bis Seitenbanden entstehen und sich das Signal verbreitert. Diese Sachverhalte werden auch in den korrespondierenden Simulationen gefunden (Abbildung 4.10).

4.3.2. Numerische Analyse des negativen Brechungseffektes im Mikrowellenbereich

In Abbildung (4.10)(a)-(c) sind die FEM-Transmissionsstreuungssimulationen für die im Experiment benutzten Frequenzen zu finden. Es scheint sich ebenso ein gaußförmiger Strahl nach dem Kristall bilden zu wollen. Diese Eigenschaft geht aber relativ schnell wieder verloren. Für den Hohlleiterausgang hätte man eine komplett andere Feldverteilung erwartet (radial). Die berechneten Verteilungen decken sich sehr schön mit den gemessenen, Abbildung (4.9).

Ein weiterer Nachweis der negativen Brechung wird über ein Strahlenoptik-Experiment geführt.

4.3.3. Strahlenoptik

Für das Strahlenoptik-Experiment wurde eine Messung mit zwei Hornstrahlern durchgeführt. Der erste Hornstrahler dient als Quelle und der zweite wiederum als Empfänger. Der PhC wird dazwischen fixiert. Es wird nur die x -Achse bei fester y -Achse abgefahren. In [64] wurde ein ähnliches Experiment durchgeführt. Dabei wurde nicht das gestreute Feld hinter der Probe vermessen, sondern nur entlang der Oberfläche. Das Kristallsystem waren hochbrechende rechteckige Barren in der Einheitszelle in hexagonaler Anordnung. Im Vergleich dazu besitzt der in dieser Arbeit verwendete 2D-hexagonale PhC einen sehr geringen Indexkontrast.

In der ersten Messung wird die Transmission in $\text{TM}=E_z$ -Polarisation abhängig von der Position parallel zur Oberfläche mit senkrechtem Einfallswinkel bestimmt. Danach wird der PhC um 11° gedreht und wiederum die Transmission in Abhängigkeit der Position gemessen. Diese Messung ist in Abbildung (4.11) zu finden. Für ein normal brechendes Medium läge das Maximum der Transmission zwischen den Punkten a und b . Der Punkt a markiert dabei den Fall, dass der Brechungsindex des PMMA-PhC-Blockes dem des Umgebungsmediums entspricht; in diesem Falle Luft, also $n = 1$. Mit steigendem Brechungsindex wird der Strahl immer weiter zum Lot hin gebrochen. Mit $n \rightarrow \infty$ verläuft der Strahl parallel zum Lot. Dies wird durch Punkt b gekennzeichnet. Tritt negative Brechung auf, darf das Maximum nicht zwischen a und b liegen, sondern muss an Punkt c , also unterhalb von b auftreten. Dieser Sachverhalt wurde gemessen. Siehe hierzu Abbildung (4.11).

4.4. Zusammenfassung

Es wurde das allgemeine Konzept der negativen Brechung mit negativem Brechungsindex für Metamaterialien eingeleitet. Das Konzept, dass man auch mit normalen Materialien

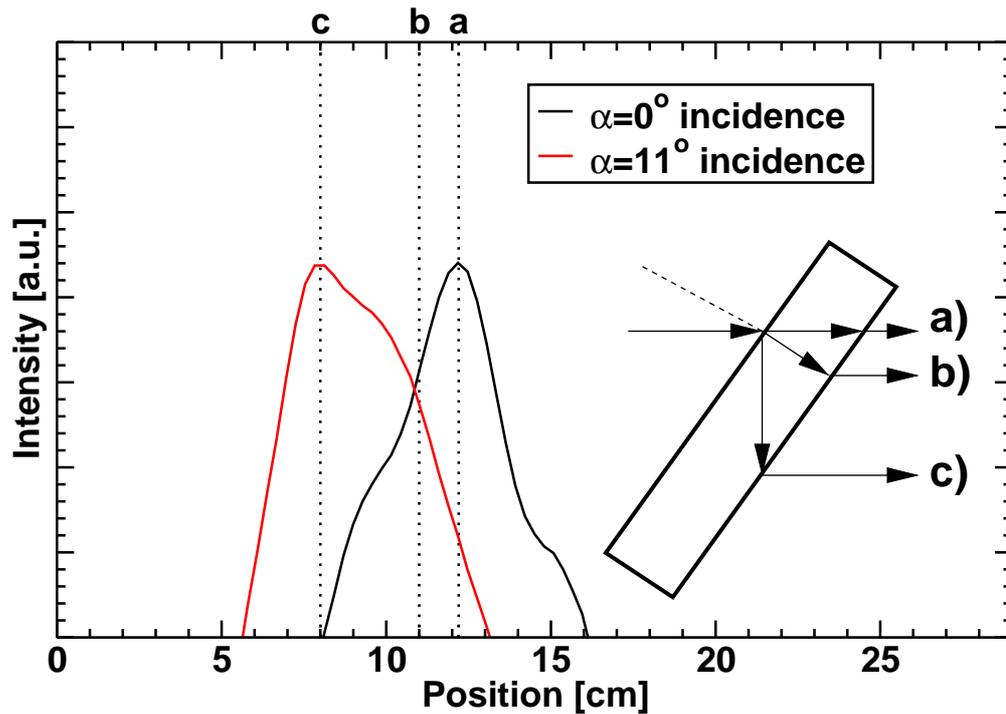


Abbildung 4.11.: Nachweise der negativen Brechung durch Strahlenoptik bei $f = 18GHz$. Zuerst fällt ein Strahl senkrecht auf den Kristall und wird auf der Austrittseite detektiert. Sein Maximum ist mit a) gekennzeichnet. Danach wird der PhC um 11° gedreht und der Versuch wiederholt. Für einen positiven Brechungsindex zwischen 1 und ∞ , würde man ein Signal zwischen den Positionen a) und b) erwarten. Das Strahl wird aber bei c) detektiert. Dies ist ein negativer Brechungsindexeffekt.

4. Negative Brechung

und unter Verwendung eines photonischen Kristalls negative Brechung findet, wurden aufgegriffen und ein konträres Erklärungsmodell zum Literaturmodell gefunden. Hier wurde der Effekt bei PhCs auf nichtkoppelnde Bänder reduziert. Ein effektiver negativer Brechungsindex braucht nicht bemüht zu werden. Zum Abschluss wurde noch experimentell gezeigt sowie numerisch simuliert, dass der negative Brechungsindexeffekt bei PhCs kein hochbrechendes Material voraussetzt. Es wurde ein hexagonaler Kristall bestehend aus Luftlöchern in PMMA hergestellt und in einem Mikrowellenexperiment untersucht. Eine Nahfeldvermessung der durch den Kristall getreuten Mikrowelle wurde durchgeführt und eine Strahlfokussierung festgestellt. Ebenso konnte bei einem Strahlenoptikexperiment eine negative Brechung beobachtet werden. Aus diesen Ergebnissen ist ersichtlich, dass die negative Brechung kein hochbrechendes Material benötigt. PhCs bestehend aus niedrigbrechenden Substraten werden somit die Anwendung der negativen Brechung eröffnet.

5. Zusammenfassung und Ausblick

5.1. Zusammenfassung

In Kapitel 2 wurden numerische Techniken gezeigt, wie man PhC Strukturen berechnen kann. Dazu wurden vier grundlegende Verfahren angesprochen, mit denen solche Simulationen durchgeführt werden können. Man unterscheidet zwischen Zeit- (FDTD) und Frequenzbereichsmethoden (PWEM, FEM, Transfermatrix). Die Frequenzbereichsmethoden unterscheiden sich in ihren verschiedenen Vorgehensweisen (Fourierraum bzw. Realraum)

Die PWEM erlaubt es Bandstrukturen beliebiger Objekte zu erstellen. Sie liefert nicht nur Eigenfrequenzen, sondern auch die Feldverteilung der Moden. Sie sucht die Lösungen aber im k -Raum. Dies erzwingt die Einbeziehung von vielen Fourierkomponenten. Eine Transmissions-/Reflexions-Simulation ist damit nicht möglich. Bandstrukturen von Materialien mit frequenzabhängigen ϵ lassen sich grundsätzlich berechnen. Kompliziertere Dispersionsrelation sind aber nicht handhabbar. Der Vorteil der Transfermatrix liegt in der Möglichkeit, diese komplizierten Dispersionsrelationen als Materialfunktionen vorzugeben. Aber auch hier transferiert man das Rechengebiet in den k -Raum. In Kapitel 5.3.1 wird eine Methode vorgeschlagen mit deren Hilfe man den verwendeten FEM-Solver nutzt. Er wird in die Transfermatrixmethode eingebettet.

Die FEM ist das allgemeinste der hier vorgestellten Verfahren. Ihr relativer Fehler bei Eigenfrequenzrechnungen ist sehr klein. Dafür steigt ihr Speicherbedarf verglichen mit den anderen Methoden stark an. Streu-, Transmissions- und Reflexions-Simulationen sind ohne weiteres durchführbar. Neben einer Permittivität kann auch eine Permeabilität in das Rechengebiet eingesetzt werden. Verschiedene Randbedingungen lassen sich realisieren (PML, Ports, perfekt magnetisch bzw. elektrisch, usw.).

Das zeitabhängige FDTD-Verfahren zeichnet sich durch seine Universalität in Bezug auf die Maxwell-Gleichungen aus. Sie ist in ihrer Implementation einfach zu handhaben und skaliert gut in einem Rechencluster. Langsame Gruppengeschwindigkeiten bereiten ihr jedoch Probleme. Man erhält dafür in einer Rechnung die Antwortfunktion für viele Frequenzen.

Im Kapitel 3 und Kapitel 4 konnten die beschriebenen Methoden auf Anwendungen bezogen werden, die in aktuellen Projekten bearbeitet werden. Es wurden resonante Oberflächenzustände gefunden, diese charakterisiert und auf ein Gassensorkonzept angewandt. Die Kopplung zwischen einer langsamen Gruppengeschwindigkeitsmode an der Bandkante und der Luft wurde enorm verbessert. Durch die langsame Gruppengeschwindigkeit erhöht sich die Interaktionszeit des Lichtes mit dem Gas. Die Absorption gegenüber Luft wird enorm verbessert. Der theoretische Verbesserungsfaktor sollte bei 30

5. Zusammenfassung und Ausblick

liegen. Experimentell wurde ein Faktor von ≈ 3 an verschiedenen Gasen nachgewiesen. Für einen ca. 1mm langen PhC konnte eine Transmission von 10% in den höheren Bändern festgestellt werden. Dies wurde zuvor in der Literatur noch nicht gezeigt. Meist begnügte man sich mit Reflexionsmessungen. Diese Reflexionsmessungen fragen aber nur die Kristalleigenschaften der ersten zehn Porenreihen ab. Eine theoretische und experimentelle Radiusvariationsanalyse erlaubte Rückschlüsse auf die Ursachen der niedrigen Transmission. Dotierschwankungen im Si-Wafer sind für eine Radiusstreuung von ca. 1% verantwortlich.

Im anschließenden Kapitel 4 wurde ein neues Erklärungsmodell des negativen Brechungsindex-Effektes, welches auf nicht-koppelnden Bändern basiert, entwickelt. Der Effekt wurde im Experiment nachgewiesen. Ein hochbrechendes Material ist dabei nicht zwingend notwendig. Ein Mikrowellenexperiment zeigte sowohl eine Strahlfokussierung als auch die negative Brechung im Strahlexperiment für einen PhC mit kleinem Indexkontrast.

5.2. Ausblick

Erste Gasmessungen im IR-Bereich zeigten eine optische Wegverlängerung um den Faktor 3. Diese lagen noch nicht im Bereich dessen, was die Simulationen vorausgesagt hatten. Für den Abgleich zwischen Theorie und Experiment müssen viele Proben mit verschiedenen r/a -Verhältnissen hergestellt werden. Für jede Probe muss eine exakte Charakterisierung der Kristallstruktur (r/a , d_{ARL} , σ_r) durch IR-Messungen und SEM-Analysen durchgeführt werden. Mit Hilfe dieser Daten kann das PhC-Gassensormodell angepasst werden: Poren an den ARL-Grenzen sind z.B. etwas größer als im dahinterliegenden PhC. Ersten numerischen Analysen des Effektes nach können diese Abweichungen durch eine veränderte ARL-Dicke abgefangen werden. Desweiteren ist es möglich den Arbeitspunkt durch Drehung durchzustimmen.

NTD-Silizium

Die Radius-Streuung (σ_r) und damit die Transmission muss experimentell verbessert werden. Hierfür ist NTD-Silizium geeignet. Die Dotierungsdichte von NTD-Silizium¹ wird über thermische Neutronen eingestellt. Hierbei fangen Si-Atome die Neutronen ein und wandeln sich über einen β -Zerfall in Phosphor-Atome um. Dadurch lassen sich sehr homogene Dotierungsdichten über den gesamten Wafer herstellen. Die verringerte Schwankung sollte sich in einer kleineren Radiusvariation äußern. NTD-PhCs müssten demnach eine höhere Transmission gegenüber normalen Si-PhCs besitzen.

Quasikristalle

PhCs basieren auf dem Prinzip der kohärenten Streuung. Dieses setzt eine perfekte Ordnung der Kristallstruktur voraus. Für die Anwendung als Gassensor ergibt sich daraus

¹Neutronen transmittiertes dotiertes Silizium

die benötigte niedrige Gruppengeschwindigkeiten. Es könnten aber auch andere Konzepte entwickelt werden, um eine niedrige Gruppengeschwindigkeit zu erreichen, welche gerade die Inkohärenz des Systems ausnutzen. Quasikristalle [65, 66, 67, 68] besitzen z.B. nur eine geringe Nahordnung und in gewissen Grenzen eine Fernordnung. Trotzdem haben sie Kristalleigenschaften, wie z.B. eine 5fache oder 12fache Symmetrie, und bilden auch eine Bandlücke aus. Folglich muss es auch bei Quasikristallen Frequenzbereiche mit niedriger Gruppengeschwindigkeit geben. Eine Radiusschwankung aufgrund von Dotierschwankungen ist lokal klein. Somit bieten die Quasikristalle einen konzeptionell anderen Weg einen PhC-Gassensor zu bauen und könnten unempfindlicher gegenüber Herstellungsfehlern sein.

Elektronen-Paramagnetische-Resonanz

Bisher wurde die Wechselwirkung eines Gases mit dem elektrischen Feld zur Konstruktion eines Sensors verwendet. Mit Hilfe des gleichen Prinzipes lässt sich auch ein Sensor aufbauen, worin ein Gas mit dem magnetischen Feld interagiert. Meist muss dafür ein äußeres statisches Magnetfeld angelegt werden, um Übergangsniveaus zu schaffen (Zeeman-Effekt). Die Arbeitsfrequenz läge dabei im Mikrowellenbereich.

In Anhang C wird für die Elektronen-Paramagnetische-Resonanz-Spektroskopie (EPR-Spektroskopie) ein Resonator auf Basis photonischer Kristalle konstruiert. Im Gegensatz zu dem eben vorgeschlagenen Konzept muss die zu untersuchende Probe lokalisiert sein, z.B. ein Festkörper. Gase lassen sich damit schlecht detektieren.

Strahlführung

Der negative Brechungsindexeffekt bei PhCs ist nicht nur eine akademische Spielerei. Er besitzt auch Anwendungen. Da optische Wege im allgemeinen umkehrbar sind, kann seine Strahlfokussierungseigenschaft auch verwendet werden um umgekehrt in einen Wellenleiter einzukoppeln. Die Strahlführungseigenschaft [69] im PhC des negativ brechenden Bandes kann zur Wellenführung dienen, ohne einen PhC-Wellenleiter zu benutzen.

5.3. Weiterführende numerische Methode

Am Ende der Zusammenfassung sollen zwei weitere Entwicklungen skizziert werden, die in möglichen zukünftigen Arbeiten umgesetzt werden können.

5.3.1. Streumatrix-Methode

Um Transmission und Reflexion von 3D-PhCs zu bestimmen wird gerne die Streumatrixmethode genutzt [70, 71, 72]. Dieses Verfahren basiert auf der Transfermatrixmethode. Üblicherweise werden die Moden der Schichten mit Hilfe des Ebenen-Wellen-Ansatzes gefunden. Die Fouriertransformation der Materialfunktion birgt numerische Artefakte,

5. Zusammenfassung und Ausblick

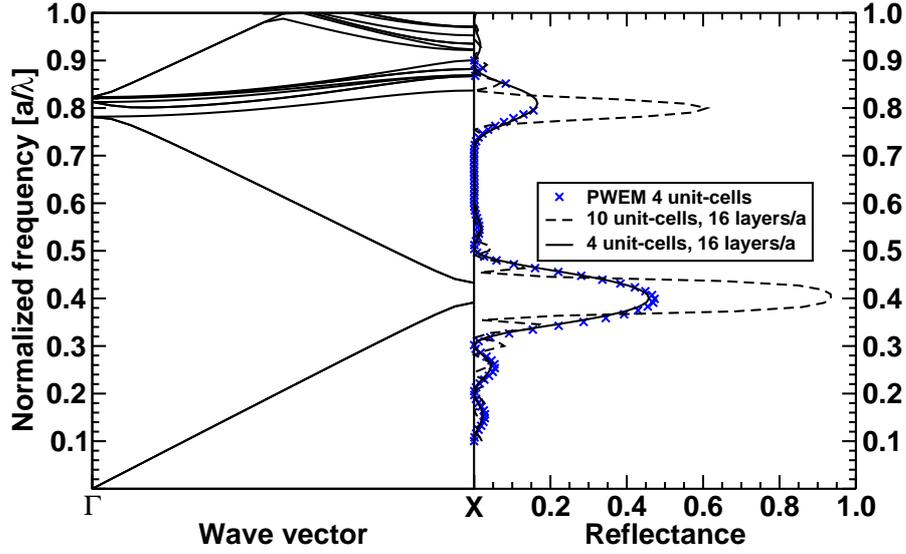


Abbildung 5.1.: Streumatrix-Methode für einen sc-Kristall mit Kugeln von $r/a = 0,5$ und einer dielektrischen Konstante von $\epsilon = 2$. Links ist die Bandstruktur in der Einstrahlrichtung und rechts die Reflexion aus der Streumatrixmethode zu sehen. Es wurden 2 Moden für die FEM-Streumatrixmethode eingesetzt. Die FEM-Lösung stimmt gut mit einer PWE-Streumatrixmethoden-Lösung überein.

weshalb viele ebene Wellenkomponenten genutzt werden müssen. Die Streumatrixmethode ist auf Grund eines mathematischen Tricks numerisch stabiler als die Transfermatrixmethode.

Statt die Lösungen in k -Raum zu suchen, kann man auch die Moden im Realraum finden. Dazu wird der in der Arbeit vorgestellte FEM-Solver eingesetzt. Die anschließende Verknüpfung der Schichten wird nach [71] durchgeführt:

$${}^m\Phi = \begin{pmatrix} {}^mE & {}^mE \\ {}^mH & -{}^mH \end{pmatrix} \quad (5.1)$$

Die Matrix Φ beschreibt die Modenstruktur der hin- und rücklaufenden Welle in einer Schicht. Hierin liegt der Ursprung des Minuszeichens der H -Komponente. Grenzen zwei Schichten aneinander und sind die Moden beider Schichten bekannt so kann die Interaktionsmatrix M berechnet werden:

$$M = {}^m\Phi^{-1} {}^{m+1}\Phi \quad (5.2)$$

Die M -Matrix beschreibt, wie die Moden einer Schicht m in die andere $m+1$ transmittiert bzw. reflektiert werden. Aus ihr kann man die Reflexions- und Transmissionskoeffizienten ermitteln. Das S-Matrix-Verfahren verknüpft mit Hilfe von M rekursiv mehrere Schich-

ten:

$$S_{11}(0, l+1) = \left(M_{11} - \hat{f}_l S_{12}(0, l) M_{21} \right)^{-1} f_l S_{11}(0, l) \quad (5.3)$$

$$S_{12}(0, l+1) = \left(M_{11} - \hat{f}_l S_{12}(0, l) M_{21} \right)^{-1} \left(\hat{f}_l S_{12}(0, l) M_{22} - M_{12} \right) f_{l+1} \quad (5.4)$$

$$S_{21}(0, l+1) = S_{22}(0, l) M_{21} S_{11}(0, l+1) + S_{21}(0, l) \quad (5.5)$$

$$S_{22}(0, l+1) = S_{22}(0, l) M_{21} S_{12}(0, l) + S_{22}(0, l) M_{22} \hat{f}_{l+1} \quad (5.6)$$

\hat{f} ist eine Diagonalmatrix mit $f_{nn} = e^{ik_n \Delta d}$, k_n als Ausbreitungsvektor der zugehörigen Mode und Δd als Dicke der Schicht. Dieses rekursive Verfahren kann für alle N Schichten eines PhCs durchgeführt werden. Wird über alle Schichten des Simulationsgebietes integriert, so erhält man am Ende die totale Streumatrix $S(0, N)$, welche die Felder der Schicht $m = 0$ mit den Feldern der Schicht $m = N$ verknüpft. Die Reflexions- und Transmissionskoeffizienten setzen sich gemäß der Streumatrix wie folgt zusammen:

$$\begin{pmatrix} t_{0l} \\ r_{0l} \end{pmatrix} = S(0, N) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (5.7)$$

Abbildung <5.1> zeigt die Reflexion eines sc-Kristalls (sc, simple cubic), welche durch die Modenexpansion durch die FEM oder PWEM gefunden wurde. Es befindet sich eine Kugel mit $r/a = 0,5$ und einer dielektrischen Konstanten von $\epsilon = 2$ in der Einheitszelle. Zur Berechnung wurden zwei Moden genutzt. Für höhere Frequenzen muss die Modenzahl erhöht werden. Dies wurde hier nicht durchgeführt, da nur eine konzeptionelle Skizze gezeigt werden sollte.

5.3.2. Group Velocity Dispersion

Die Bandstruktur eines PhCs lässt erkennen, dass gewisse Bänder als Group-Velocity-Dispersion-Kompensator (GVD-Kompensator) verwendet werden können. Eine typische Glasfaser besitzt ein positives D_λ . Ein negatives D_λ könnte somit den positiven Wert kompensieren. Es gilt (SI-Einheiten):

$$D_\lambda = -\frac{2\pi c_0}{\lambda^2} \frac{\partial^2 \beta}{\partial \omega^2} \quad (5.8)$$

mit normalisierten Einheiten folgt:

$$D_\lambda = -\frac{f^2}{ac_0} \frac{\partial^2 \kappa}{\partial f^2} \quad (5.9)$$

mit $\beta = \kappa \frac{2\pi}{a}$ und $f = a/\lambda$.

Da in dieser Arbeit der Gassensor in $\Gamma\mathbf{K}$ -Richtung betrieben wird, sollen für das vorhandene System die GVD-Parameter untersucht werden. In Abbildung <5.2> wurden die GVD-Parameter des 2. Bandes eines 2D-hexagonalen PhCs mit Luftlöchern von $r/a = 0,385$ in Silizium mit $\epsilon = 11,6$ dargestellt. Das Band ist entartet, weshalb zwei

5. Zusammenfassung und Ausblick

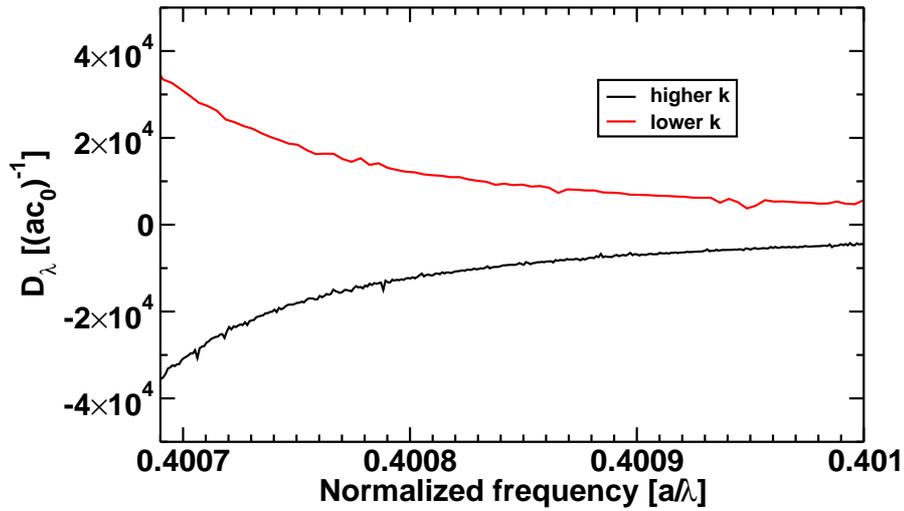


Abbildung 5.2.: GVD-Parameter, 2. Band, 2D-hexagonaler PhC, Luftlöcher $r/a = 0,385$ in Silizium $\epsilon = 11,6$. Das Band ist entartet, weshalb zwei GVD-Parameter angegeben wurden.

GVD-Parameter zur Verfügung stehen. Das dritte Band in TM= E_z -Polarisation in der Nähe der Bandkante besitzt eine selbstführende Eigenschaft. Ein Lichtbündel wird nahezu ohne Strahlaufweitung darin geführt. Zusätzlich besitzt es noch eine hohe Dispersion in diesem Bereich. In Abbildung (5.3) wurde deshalb für dieses Band der GVD-Parameter für eine Gitterkonstante von $a = 608,4nm$ berechnet, um den interessanten Frequenzbereich in die Nähe der Telekommunikationswellenlängen zu schieben. Der GVD-Parameter in Wellenleitern ist üblicherweise positiv, somit kann ein negativer Parameter das Auseinanderlaufen eines Pulses wieder kompensieren.

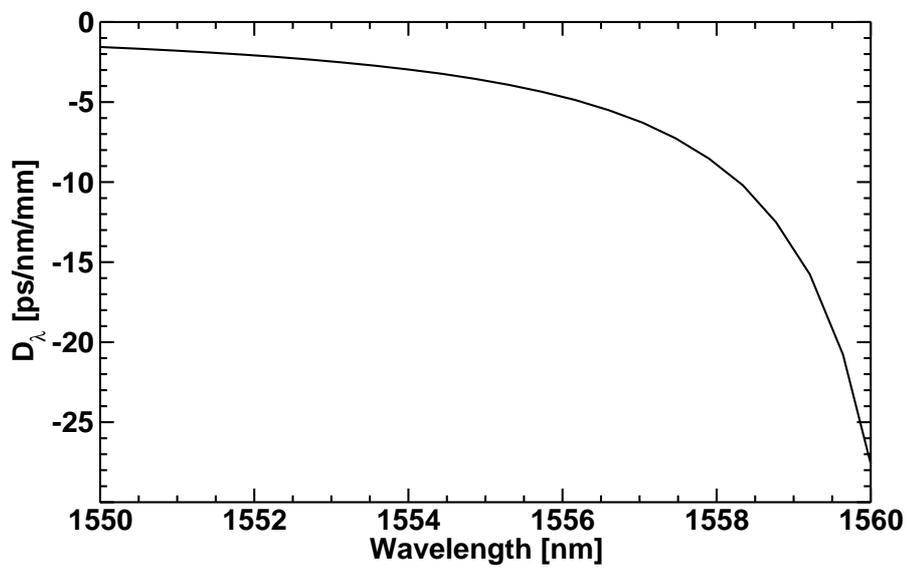
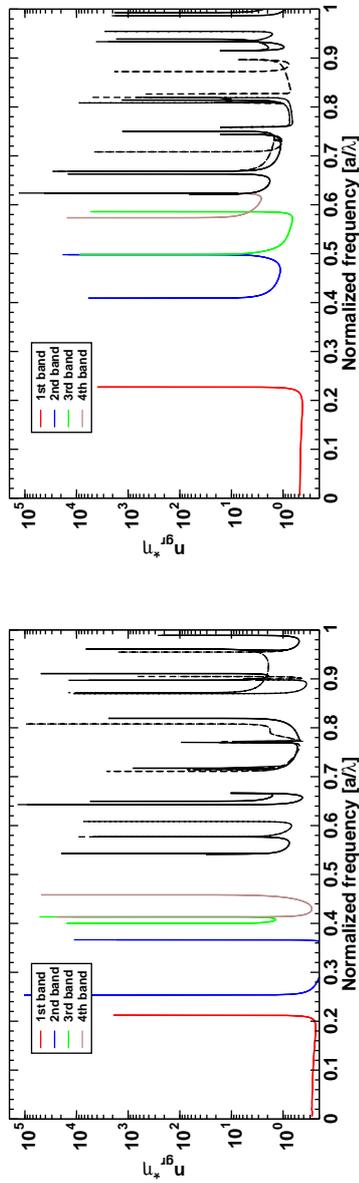


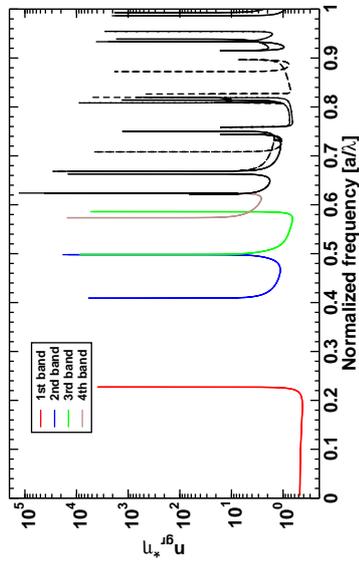
Abbildung 5.3.: Dispersionskompensator. Selbstführendes 3. TM-Band des hexagonalen Kristalls $\Gamma\mathbf{K}$ -Richtung mit Luftlöchern ($r/a = 0,42$) in Silizium ($\epsilon = 11,6$).

5. Zusammenfassung und Ausblick

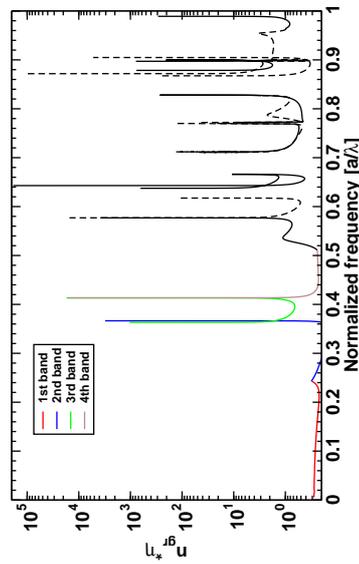
A. Ergänzende Informationen/ Atlas



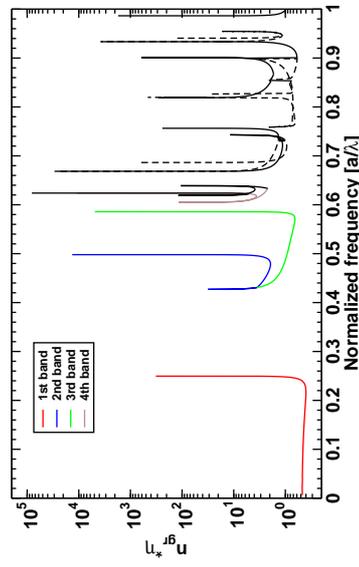
(a) ΓM , TM



(b) ΓM , TE

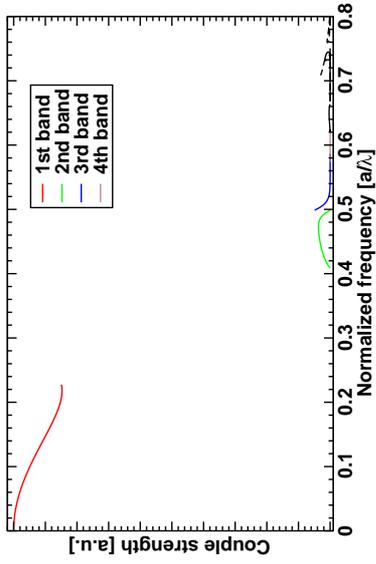


(c) ΓK , TM

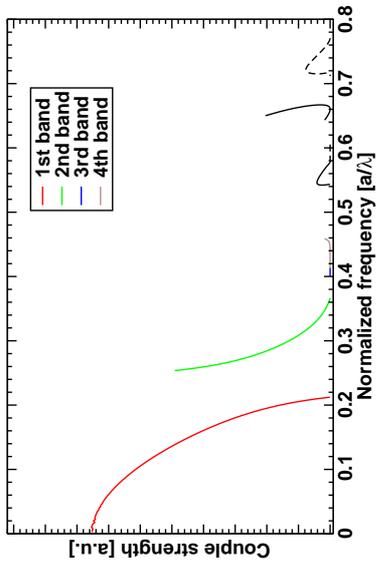


(d) ΓK , TE

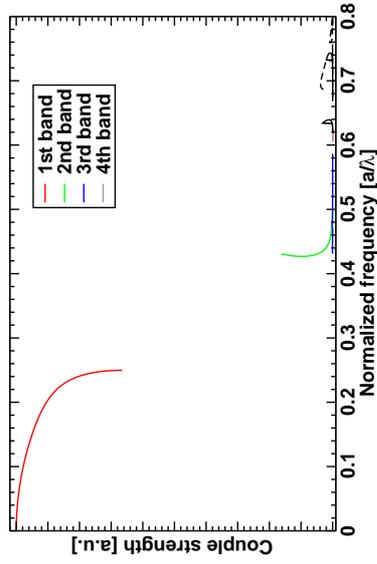
Abbildung A.1.: Wirkung entlang der Hochsymmetrierichtungen aufgetragen gegen die normierte Frequenz. Es wurden nur die ersten vier Bänder farblich kodiert. Parameter: Hexagonaler Kristall mit Luftlöchern ($r/a = 0,4$) in Silizium ($\epsilon = 11,6$).



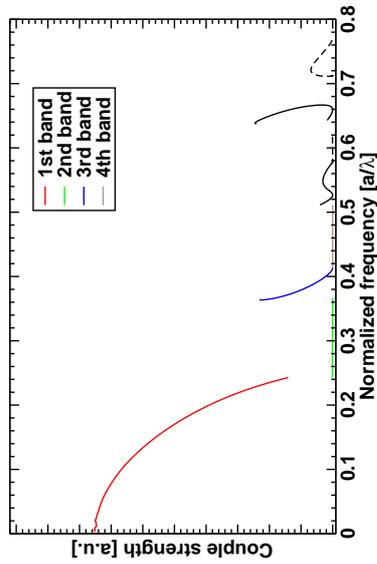
(a) ΓM , TM



(b) ΓM , TE



(c) ΓK , TM



(d) ΓK , TE

Abbildung A.2.: Kopplungsstärke entlang der Hochsymmetrierichtungen aufgetragen gegen die normierte Frequenz. Es wurden nur die ersten vier Bänder farblich kodiert. Parameter: Hexagonaler Kristall mit Luftlöchern ($r/a = 0,4$) in Silizium ($\epsilon = 11,6$).

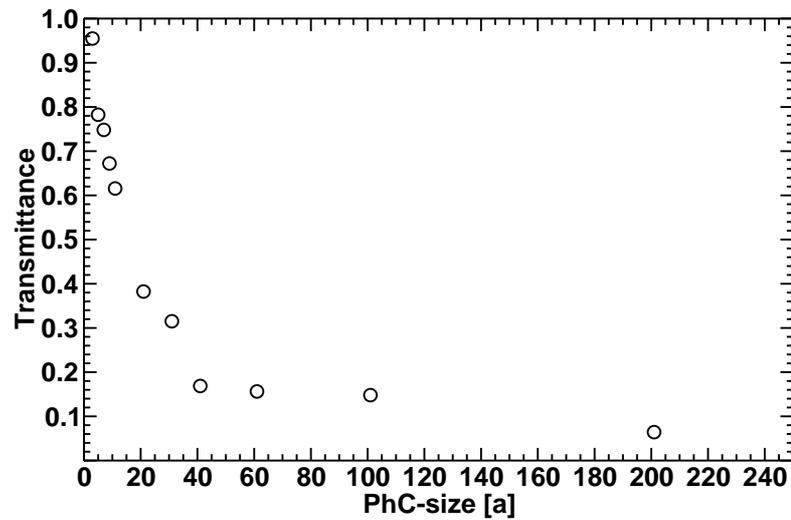


Abbildung A.3.: Längenabhängigkeit der Transmission (Integral von $f = 0,35$ bis $f = 0,5$) durch einen PhC mit einem Störungsoperator von $\sigma_r = 0,01$ (Radiusfluktuation). FDTD-Simulation. Die ersten $50a$ fällt die Transmission rapide ab. Danach scheint sich ein Grundsockel auszubilden. Hexagonaler Kristall mit Luftlöchern ($r/a = 0,42$) in Silizium ($\epsilon = 11,6$).

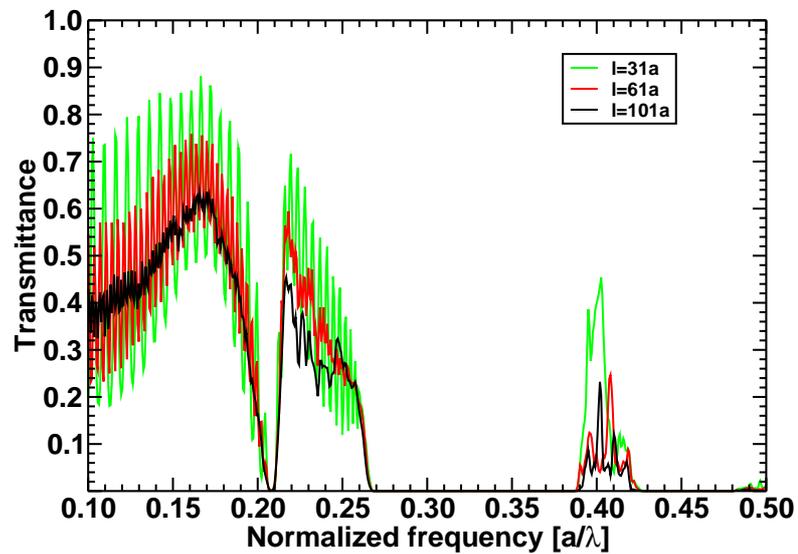
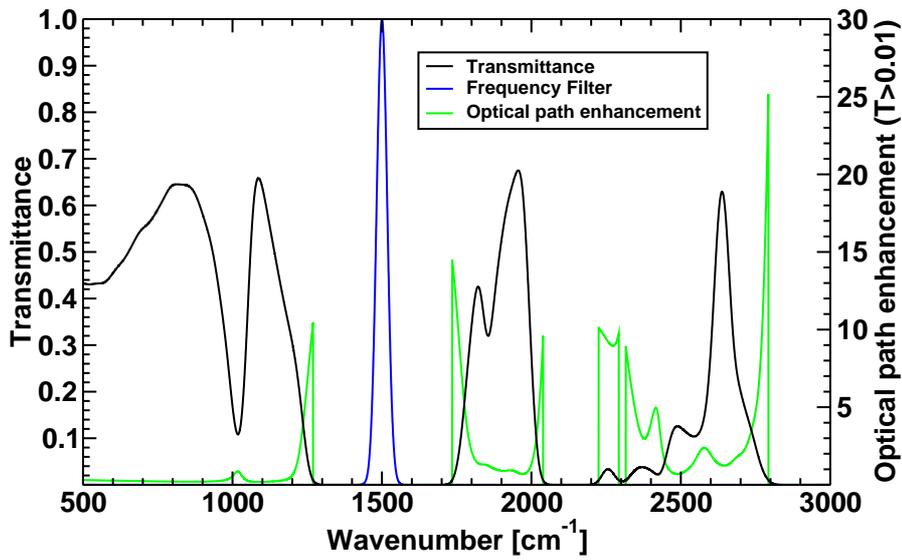
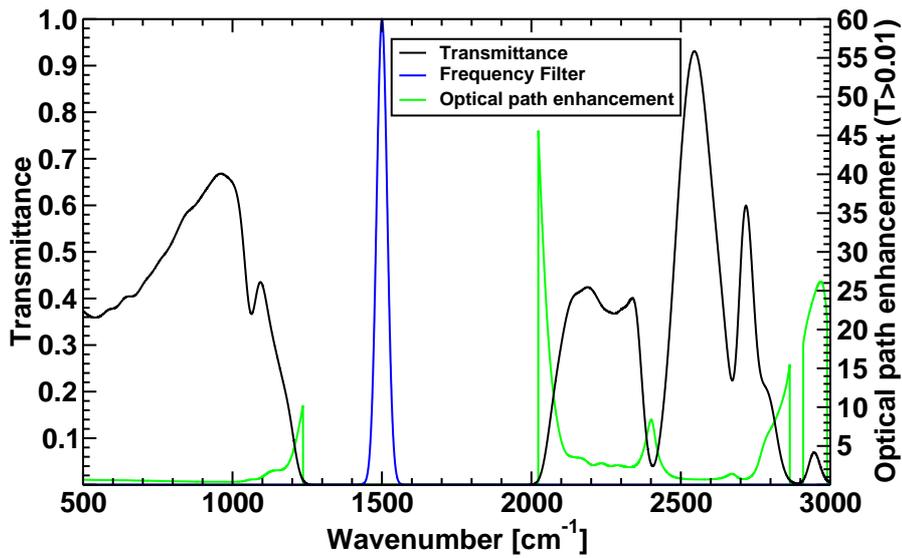


Abbildung A.4.: Längenabhängigkeit der Transmission durch einen PhC mit einem Störungsoperator von $\sigma_r = 0,01$. FDTD-Simulation. Hexagonaler Kristall mit Luftlöchern $r/a = 0,42$ in Silizium ($\epsilon = 11,6$).

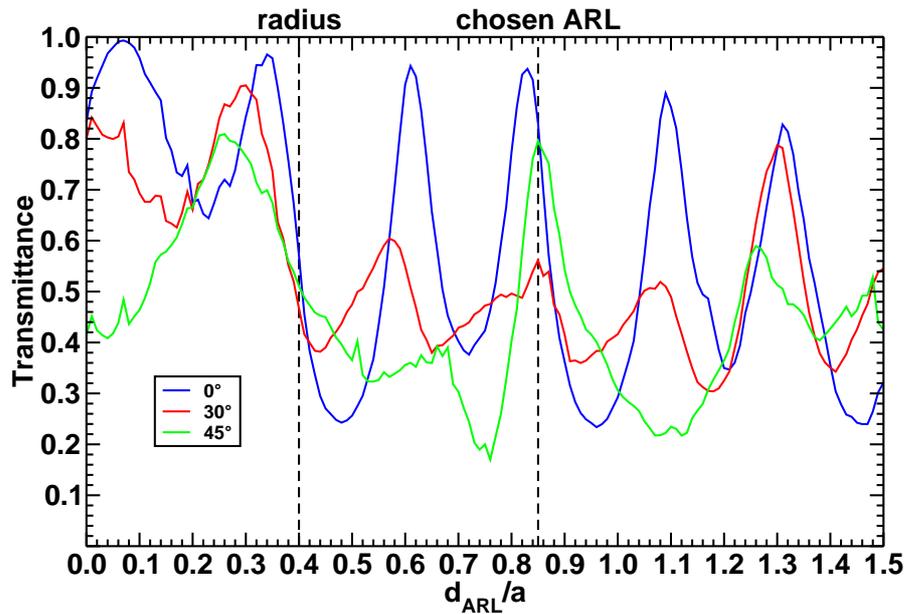


(a) $\text{TM}=E_z$ -Polarisation

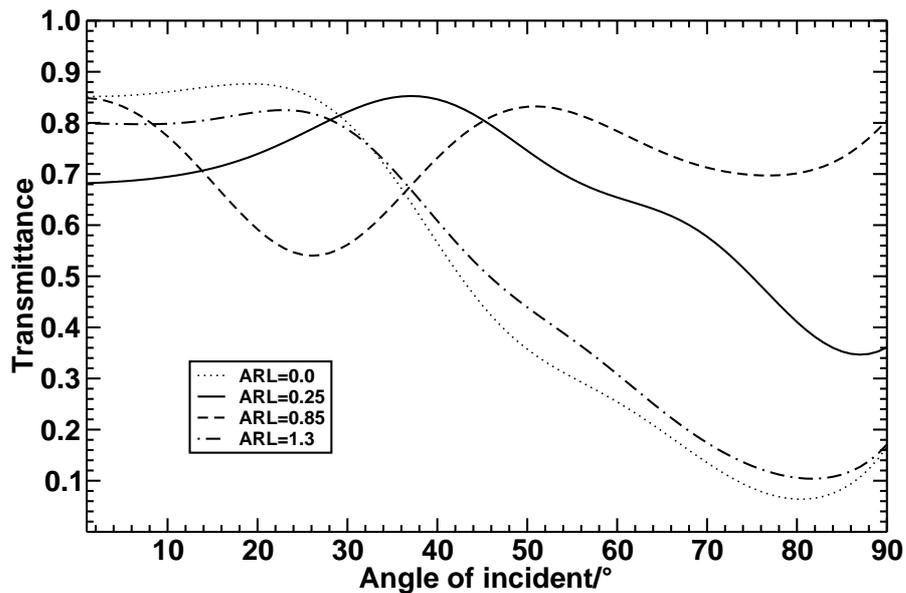


(b) $\text{TE}=H_z$ -Polarisation

Abbildung A.5.: Übersichts-Simulation zum Zwecke des Vergleichs mit hergestellten Proben. Die Transmission und die optische Wegverbesserung wurden aufgetragen. Jeder Frequenzpunkt wurde anhand der angegebenen Filterkurve gewichtet. Hexagonaler Kristall ($l = 101a$) mit Luftlöchern ($r/a = 0,39$) in Silizium ($\epsilon = 11,6$), ΓK -Richtung. (FEM-Simulation)



(a) Transmission gegenüber ARL-Dicke bei verschiedenen Winkeln. Erhöhte Werte für $d_{\text{ARL}} = 0,25$, $d_{\text{ARL}} = 0,85$ und $d_{\text{ARL}} = 1,3$.



(b) Transmission gegenüber Einfallswinkel bei verschiedenen ARL-Dicken.

Abbildung A.6.: Auswahldiagramm zur Bestimmung der optimalen d_{ARL} . Für $d_{\text{ARL}} = 0,85$ ergibt sich ein optimale Transmission für $f = 0,3$. Hexagonaler Kristall mit Luftlöchern ($r/a = 0,4$) in Silizium ($\epsilon = 11,6$), ΓM -Richtung. (FEM-Simulation)

B. Effektiv-Medium mit PhC und ARL

Auch auf photonische Kristalle kann man die Effektiv-Medium-Theorie anwenden. Sie ist nur im ersten Band physikalisch sinnvoll. Dort besteht die Kristallmode praktisch nur aus der nullten Fourierkomponente und ist damit eine ebene Welle. Es gibt nun mehrere Verfahren den effektiven Brechungsindex des Kristallsystems zu bestimmen. Die erste Methode wäre eine Annäherung mittels Wiener (Kapitel 2.4). Die Hauptgleichungen (2.13) und (2.14) können für den 2D-Fall auf Helmholtzgleichungen reduziert werden. Es wird $\mathbf{E} = \mathbf{E}_z$ und $\mathbf{H} = \mathbf{H}_z$ angenommen. Damit folgt:

$$\Delta E + \omega^2 \epsilon E = 0 \quad (\text{B.1})$$

und

$$\nabla \left(\frac{1}{\epsilon} \nabla H \right) + \omega^2 H = 0 \quad (\text{B.2})$$

Es wird $\frac{1}{\epsilon}$ durch $\hat{\epsilon}$ ersetzt. Nun sollen E und H nur durch eine Ebene-Wellen-Komponente beschrieben werden.

$$-k^2 E_0 + \omega^2 \epsilon(\mathbf{G} = 0) E_0 = 0 \quad (\text{B.3})$$

$$-k^2 \hat{\epsilon}(\mathbf{G} = 0) H_0 + \omega^2 H_0 = 0 \quad (\text{B.4})$$

Die beiden Gleichungen haben jeweils eine Lösung

$$\frac{k^2}{\omega^2} = \epsilon(\mathbf{G} = 0) \quad (\text{B.5})$$

$$\frac{\omega^2}{k^2} = \hat{\epsilon}(\mathbf{G} = 0) \quad (\text{B.6})$$

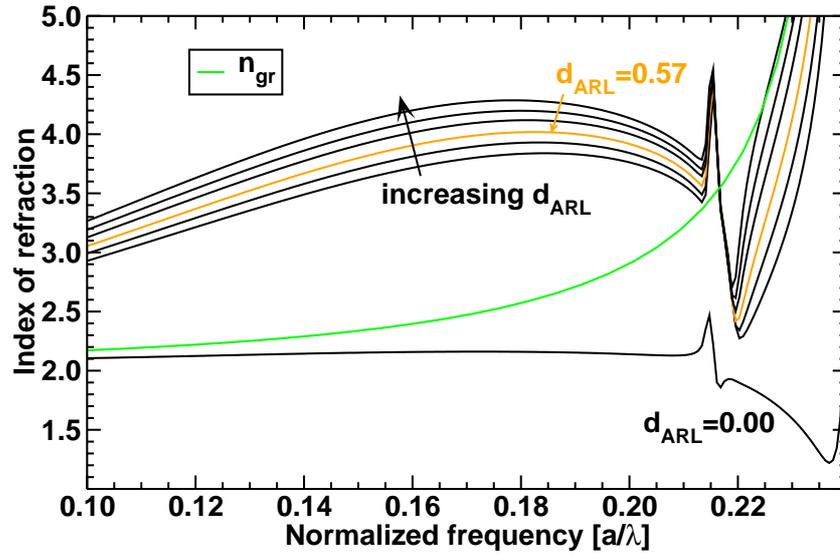
Die nullte Fourierkomponente der Materialfunktion $\epsilon(G = 0)$ und $\hat{\epsilon}(G = 0)$ entspricht ihrem Mittelwert. k^2/ω^2 entspricht der effektiven Dielektrizitätszahl ϵ_{eff} . Wird ein Füllfaktor für ein Zwei-Komponenten-System eingeführt, so folgt:

$$\epsilon_{\text{eff,TM}} = f\epsilon_1 + (1-f)\epsilon_2 \quad (\text{B.7})$$

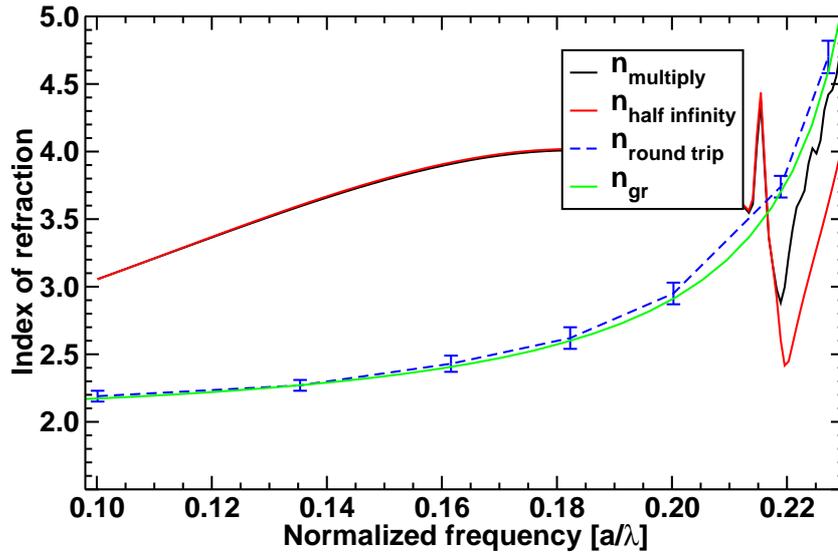
$$\epsilon_{\text{eff,TE}}^{-1} = \frac{f}{\epsilon_1} + \frac{1-f}{\epsilon_2} \quad (\text{B.8})$$

Daraus folgt $n_{\text{Wiener,TE}} = 1,32$ für Luftlöcher mit $r/a = 0,385$ in Silizium mit $\epsilon = 11,6$. Die nächst nahe liegende Methode wäre die Bestimmung einer effektiven Konstante aus

B. Effektiv-Medium mit PhC und ARL



(a) Effektiver Brechungsindex mit d_{ARL} als Parameter



(b) Vergleich der Brechungsindizes gewonnen über das Halbinfinity- und Mehrfachreflexionsmodell, bzw. Gruppengeschwindigkeitsindex gewonnen aus den Umlaufzeiten (blau).

Abbildung B.1.: Effektiver Brechungsindex als Funktion der normierten Frequenz. n_{gr} wurde über die Gruppengeschwindigkeit aus dem Banddiagramm gewonnen. Die schwarzen Linien wurden aus dem Reflexionswert aus einer FDTD-Rechnung bestimmt. 2D-hexagonaler Kristall mit Luftlöchern von $r/a = 0,385$ in Silizium mit $\epsilon = 11,6$.

der Gruppengeschwindigkeit aus dem Banddiagramm, mit

$$n_{\text{gr}} = \frac{1}{v_{\text{gr}}} = \frac{1}{\frac{d\omega}{dk}} \quad (\text{B.9})$$

Für kleine Frequenzen ist der Phasenbrechungsindex gleich dem Gruppenbrechungsindex ($n_{\text{p}} = n_{\text{gr}}$). Die beiden genannten Verfahren setzen einen unendlich großen Kristall voraus.

Mittels einer FDTD-Reflexionsrechnung kann auch auf den Brechungsindex geschlossen werden. Hierbei gibt es auch mehrere Möglichkeiten. Da der Kristall endlich ist, werden Fabry-Perot-Resonanzen auftreten. Aus dem Abstand Δf zweier Maxima in Transmission und der Kristalllänge d kann auf den Brechungsindex geschlossen werden:

$$n_{\text{FPR}} = \frac{1}{2d\Delta f} \quad (\text{B.10})$$

Dies ist nur bei dünnen Kristallen oder großer Frequenzauflösung möglich.

Die FDTD-Methode ermöglicht noch eine andere Herangehensweise. Durch Aufsetzen eines sehr großen Kristalls gilt die Annahme, dass die Medien Luft und PhC jeweils halbusendlich sind, d.h. ein Puls wird zum Teil an der Grenzfläche Luft/PhC reflektiert und der Rest wandert ungestört im PhC weiter. Bevor nun Energie an der anderen Grenzschicht reflektiert werden kann, wird ein Spektrum berechnet. Das Reflexionsgesetz für den Halbraum lautet:

$$R = \left| \frac{n-1}{n+1} \right|^2 \quad (\text{B.11})$$

Aufgelöst nach dem Brechungsindex folgt

$$n_{\text{half},\infty} = \frac{1 + \sqrt{R_{\text{half},\infty}}}{1 - \sqrt{R_{\text{half},\infty}}} \quad (\text{B.12})$$

Ist der Kristall so groß, dass sich Fabry-Perot-Effekte durch ein kleines Zeitfenster für die Fouriertransformation herausmitteln und die verschiedenen Frequenzkomponenten im Kristall an beiden Grenzschichten praktisch keine Phasenbeziehung mehr zueinander besitzen, so kann man aus der Mehrfachreflexion, nachdem sich das Reflexionsbild für lange Iterationszeiten stabilisiert hat, ebenso einen Brechungsindex gewinnen:

$$\begin{aligned} R_{\text{multiply}} &= R_1 + T_1 R_2 T_2 + \\ &\quad T_1 R_2 R_2 R_2 T_2 + \\ &\quad T_1 R_2 R_2 R_2 R_2 T_2 + \\ &\quad \dots \\ &= \\ &\quad R_1 + \frac{T_1 R_2 T_2}{1 - R_2^2} \end{aligned} \quad (\text{B.13})$$

Mit R_1 als Reflexion von Medium 1 nach Medium 2 und R_2 für den umgekehrten Fall. Wird davon ausgegangen, dass sich das Medium in Luft befindet, so kann nach dem

B. Effektiv-Medium mit PhC und ARL

Brechungsindex des Mediums aufgelöst werden:

$$n_{\text{multiply}} = \frac{\sqrt{2R_{\text{multiply}} - R_{\text{multiply}}^2} + 1}{1 - R_{\text{multiply}}} \quad (\text{B.14})$$

Dies gilt für $R_{\text{multiply}} \neq 1$.

Über die FDTD-Methode hat man auch eine zeitliche Information, wann ein Wellenpaket einen Sensorpunkt passiert. Aus einer gemessenen Zeitdifferenz und dem bekannten Abstand zwischen zwei Sensoren kann die Gruppengeschwindigkeit für dieses Wellenpaket berechnet werden.

Abbildung (B.1) zeigt den effektiven Brechungsindex, welcher mit Hilfe dieser Methoden gewonnen wurde. Es ist sehr schön zu erkennen, dass die Oberflächenterminierung einen hohen Einfluss auf den scheinbaren Brechungsindex hat. Mit der Standardterminierung $d_{\text{ARL}} = 0,00$, was einem Schnitt durch den Mittelpunkt der Poren entspricht, nähert sich der Brechungsindex asymptotisch mit kleiner werdender Frequenz dem Gruppengeschwindigkeits-Brechungsindex an. Das Brechungsindexergebnis für die Mittelung über die dielektrische Zahl (Wiener Grenzen) weicht sehr stark von den anderen Verfahren ab. Auch die Anti-Reflexions-Schicht beschert einen höheren effektiven Brechungsindex für $n_{\text{half},\infty}$ und n_{multiply} , wobei beide Methoden gleiche Werte liefern. Der Gruppenindex bestimmt aus den Umlaufzeiten ist, wie erwartet, unabhängig von der ARL-Dicke und passt zu dem Banddiagrammindex.

C. EPR-PhC

Es gibt verschiedene Messmethoden, um auf Eigenschaften der Materie Rückschlüsse zu ziehen. Im Kapitel 3.2 wurde z.B die Absorptionseigenschaft eines Gases im Infraroten ausgenutzt, um dessen Konzentration zu bestimmen.

Geht es nun darum die Natur und Anordnung von Atomen in Festkörpern zu bestimmen, so bietet es sich an, auf die Messmethode der Elektronen Paramagnetischen Resonanz zurückzugreifen. Hierbei wird die Absorption von elektromagnetischer Strahlung im Mikrowellenbereich in Abhängigkeit eines Magnetfeldes gemessen [73]. Da die Wechselwirkung zwischen Materie und Mikrowelle gering ist, bedient man sich eines Zylinder-Resonators (siehe Abbildung (C.1)). Durch den Resonator wird der elektromagnetischen Welle mehr Zeit gelassen, als dies im einfachen Transmissionsverfahren möglich ist, um mit der Materie wechselzuwirken. Außerdem reicht ein viel kleineres Probenvolumen aus.

Man bezeichnet mit der Güte eines Resonators seine Fähigkeit, Energie zu speichern.

$$Q = 2\pi \frac{\text{Energie im Resonator}}{\text{Energieverlust nach einer Periode}} \approx \frac{f_0}{\Delta f_{1/2}} \quad (\text{C.1})$$

Gemessen wird der Gütefaktor üblicherweise über die Zentralfrequenz des Resonators (f_0) und seiner Halbwertsbreite ($\Delta f_{1/2}$) in Reflexion.

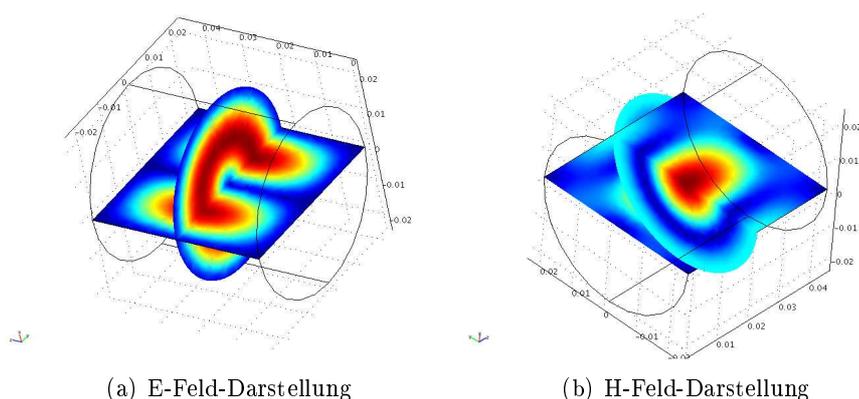


Abbildung C.1.: Klassischer Zylinder-EPR-Resonator. 3D-FEM-Simulation.

C.1. Anforderungen

An einen Resonator werden neben einem hohen Q-Faktor eine Reihe weiterer Anforderungen gestellt. Es gilt die dielektrischen Verluste in der Probe zu minimieren. Dazu muss eine Resonatormode gesucht werden, welche ein Minimum der elektrischen Feldkomponenten am Probenort besitzt. Gleichzeitig wird eine hohe magnetische Feldkomponente am Probenort gefordert, da ja ein paramagnetischer Übergang induziert werden soll. Klassische EPR-Resonatoren sind zylindrisch. Für diese einfache Bauweise sind analytische Lösungen der Moden bekannt. Neben metallischen gibt es noch dielektrische Resonatoren.

Es reicht aber nicht aus, nur die Mikrowellenleistung im Resonator zu platzieren. Aus messtechnischen Gründen müssen Stäbe im Resonator angebracht werden, welche als Spule dienen und das äußere magnetische Feld modulieren. Durch eine geeignete Spulenanordnung können zudem Kernresonanzübergänge angeregt werden. Ein Lock-In-Verstärker dient zur Auswertung des modulierten Signales.

Manche EPR-Linien entstehen erst durch Anregung mit Licht oder werden durch diese verhindert. Hierfür müssen Schlitze in den Resonator eingebracht werden. Weiterhin wäre es auch von Vorteil, wenn man die Lumineszenz in Abhängigkeit des äußeren B-Feldes unter Einwirkung der Mikrowellenleistung beobachten könnte.

All diese Zugänge im konventionellen zylindrischen Resonator verschlechtern die Güte. Außerdem führt die Skalierung hin zu kleineren Wellenlängen (höheren Frequenzen) zu Problemen in der Herstellung. Die Lichtschlitze sind nicht mehr realisierbar.

Da nun die Anforderungen an den Resonator ihn löchrig machen, was seine Güte verschlechtert, stellt sich die Frage, ob man nicht einen anderen Weg gehen kann. Hier kommen nun die photonischen Kristalle ins Spiel. Mit ihnen hat man die Möglichkeit Defektresonanzen gezielt zu erstellen. Durch ihre löchrige Struktur bieten sie viele Zugangsmöglichkeiten (Licht, Modulation, ...).

Die EPR-Effekte treten häufig erst bei tiefen Temperaturen auf. Für die Tieftemperaturphysik bietet es sich an metallische Materialien anzuwenden. Der gesuchte PhC für die EPR soll daher aus Metall hergestellt werden. Das Ziel ist ein 100GHz -Resonator, welcher bei $1,5\text{K}$ arbeitet.

Metalle lassen sich nicht mit der vorgestellten PWEM (Kapitel 2.2.2) berechnen, jedoch mit der FEM (Kapitel 2.2.3). Als Kristallsystem wird der hexagonale Kristall, bestehend aus Metallstäben in Luft, ausgewählt. Durch diese Stäbe kann z.B. Strom fließen, um die B-Feld-Modulation zu erzeugen. Zwischen den Stäben hindurch kann Licht eingestrahlt werden und die Lumineszenz abgestrahlen.

Um mit dem Defektdesign zu beginnen, muss erst einmal geklärt werden, ob sich eine Art Bandlücke für eine Polarisation ergibt. Die Bandlücke sollte sich auch in den ersten Bändern auftun. Höhere Bänder erfordern eine noch viel höhere Fertigungsgenauigkeit.

Für die $\text{TM}=E_z$ -Polarisation gibt es eine so genannte „cut-off“-Frequenz, d.h. die Propagation unterhalb dieser Frequenz ist verboten. Dies entspricht im Sprachgebrauch der PhC einer Bandlücke. Die $\text{TE}=H_z$ -Polarisation hingegen weist ein erlaubtes Band auf.

Es soll deshalb für die $\text{TM}=E_z$ -Polarisation ein Defekt gesucht werden, welcher geeig-

net ist. Eine Mischung zwischen H_z und E_z ist nicht zu befürchten, da sich für H_z keine Defektmode im ersten Band ausbildet.

C.2. Quadrupol-Defekt

In PhCs gibt es viele Möglichkeiten einen Defekt zu realisieren. Die Metallstäbe können vergrößert, verkleinert oder verschoben werden. Sie können auch aus einem anderen Material bestehen oder beschichtet werden. Am einfachsten werden Defektmodes aber durch das Entfernen eines oder mehrerer Stäbe erzeugt.

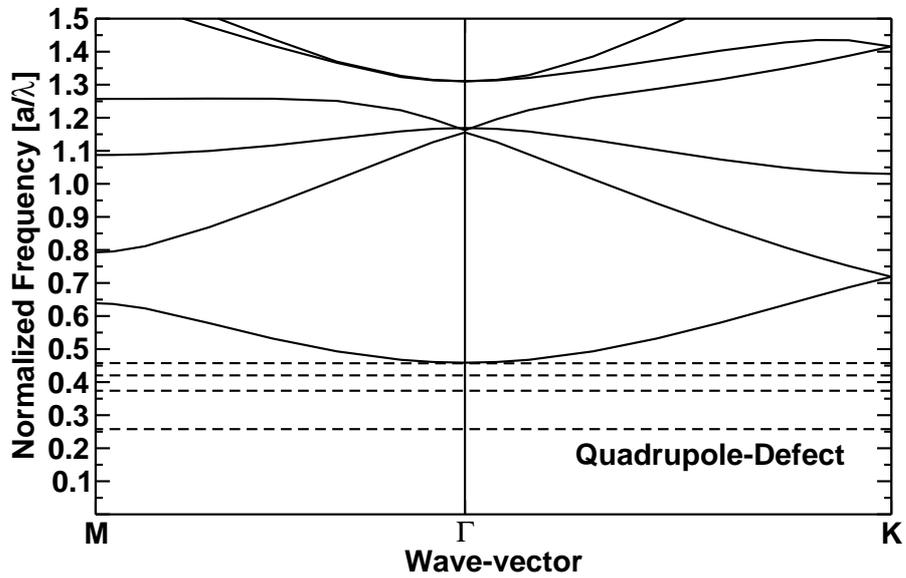
Wird nur ein Stab entfernt, so soll von einem Monopoldefekt gesprochen werden. Dieser Monopoldefekt weist nur eine Mode auf, die ein Maximum der elektrischen Energie am Ort des fehlenden Stabes besitzt. Wir suchen nach einer Mode, welche ein Maximum der magnetischen Komponente dort besitzt.

Werden zwei benachbarte Stäbe entfernt, so erzeugt man einen Dipoldefekt. Dieser Dipoldefekt besitzt in seiner Grundmode eine ähnliche Eigenschaft wie der Monopoldefekt, hat aber insgesamt zwei Moden. Die zweite Mode besitzt schon Eigenschaften, welche für die Anwendung als EPR-Resonator geeignet sind: Die elektrische Komponente konzentriert sich an den fehlenden Stäben und die magnetische zwischen diesen. Das nutzbare Modenvolumen ist aber gering. Die nächste sinnvolle Konfiguration ist der Quadrupoldefekt (Abbildung <C.2>), d.h. es werden vier benachbarte Stäbe entfernt. Zu dessen Realisierung gibt es zwei Möglichkeiten: Senkrecht, d.h. die lange Seite in Richtung $\Gamma\mathbf{M}$, oder unter 60° , d.h. die lange Seite in Richtung $\Gamma\mathbf{K}$. Die Modenformen der beiden Konfigurationsmöglichkeiten sind ähnlich, nur in der Frequenz leicht verschoben. Im Folgenden werden nur die $\Gamma\mathbf{K}$ -Quadrupoldefekte behandelt. Neben der Grundmode, welche dem Monopol ähnlich ist, gibt es zwei brauchbare Defektmodes. Eine befindet sich etwa auf der Hälfte zwischen der ersten und der dritten Defektfrequenz, wobei die dritte sich relativ nahe an der cut-off Frequenz befindet.

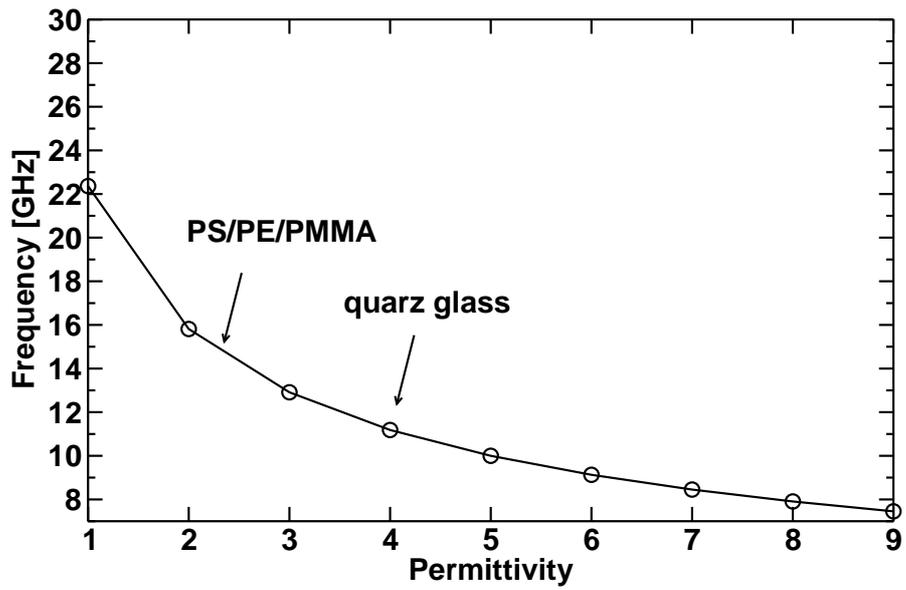
In Abbildung <C.3> wurde eine Quadrupolresonanz ausgerechnet und die elektrische Energiedichte aufgetragen (3D-FEM). Die Energie dringt von unten in das System über einen k-Band-Port ein und konzentriert sich in der Resonanz. Die elektrische Komponente bildet dabei einen Dipol. Zwischen den beiden Maxima ist die magnetische Komponente konzentriert. Die blauen Pfeile geben Auskunft über dessen Richtung.

C.3. Resonanz-Messungen

Der berechnete Resonator ($a = 6\text{mm}$, $r = 1,2\text{mm}$) wurde in Auftrag gegeben und mittels eines selbst aufgebauten Mikrowellenmessplatzes vermessen. In Abbildung <C.4> ist das Ergebniss dieser Messung zu finden. Es wurde ein Gütefaktor von $Q \gtrsim 4000$ gefunden.

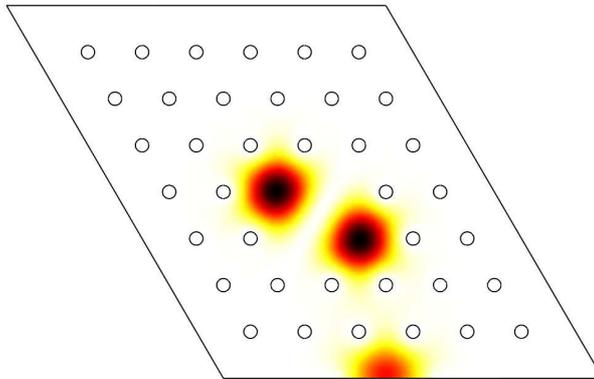


(a) Banddiagramm mit Defektmoden

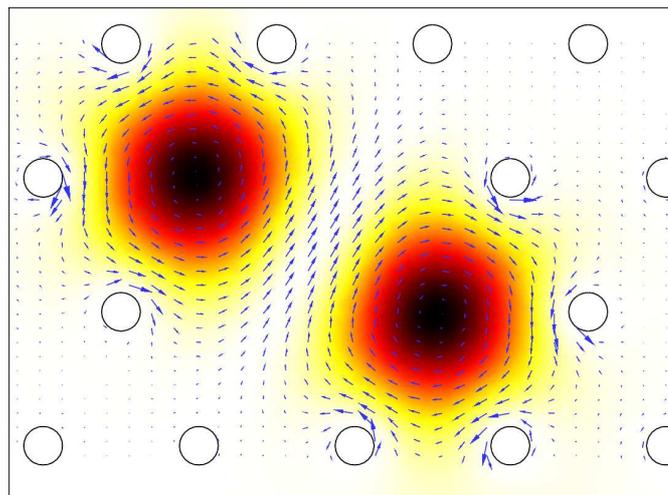


(b) Cut-off Frequenz als Funktion der dielektrischen Konstante des Umgebungsmaterials, $a = 6\text{mm}$

Abbildung C.2.: Banddiagramm für die $\text{TM}=E_z$ -Polarisation und Abhängigkeit der Cut-off-Frequenz von dem Umgebungsmaterial. $r/a = 0,2$.



(a) Übersicht über Resonatorconfiguration. Energie wird über einen unten angebrachten Port angeboten.



(b) Resonanz. Nahbild. Blaue Pfeile geben die Richtung des Magnetfeldes an.

Abbildung C.3.: Quadrupol-Resonanz für einen EPR-Resonator. 3D-FEM Simulation. Die elektrische Energiedichte wurde farblich kodiert.

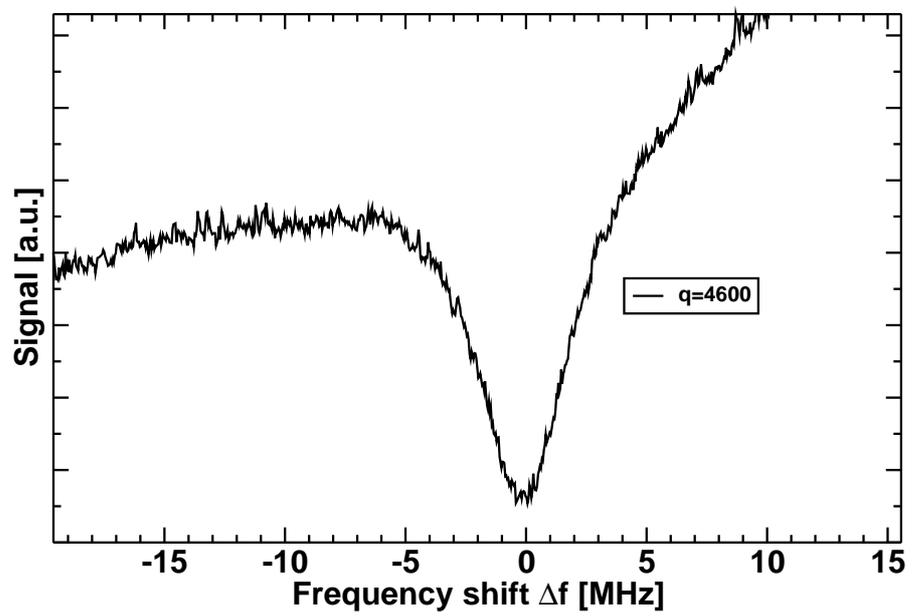


Abbildung C.4.: Gemessene Quadrupol-Resonanz

D. Eigene Veröffentlichungen

- T. M. Geppert, S.L. Schweizer, J. Schilling, C. Jamois, A. v. Rhein, D. Pergande, R. Glatthaar, P. Hahn, A. Feisst, A. Lambrecht, R.B. Wehrspohn, Photonic crystal gas sensors, Proc. of SPIE, **5511**:61-70 (2004)
- S. Richter, M. Steinhart, H. Hofmeister, M. Zacharias, U. Gösele, N. Gaponik, A. Eychmuller, A.L. Rogach, J.H. Wendorff, S.L. Schweizer, A. von Rhein, R.B. Wehrspohn, Quantum dot emitters in two-dimensional photonic crystals of macroporous silicon, Appl. Phys. Lett, **87**(14):142107 (2005)
- R.B. Wehrspohn, T.M. Geppert, S.L. Schweizer, A. v. Rhein, D. Pergande, T. Beyer, A. Lambrecht, Photonic crystal gas sensors, Proc. of SPIE, **5855**:24-29 (2005)
- R.B. Wehrspohn, A. v. Rhein, T. Geppert, Photonic Crystals: Principles and Applications, Encyclopedia of Materials: Science and Technology, Elsevier, Oxford, 2001, Pages 1-9, 0080431526
- A. Bielawny, P.T. Miclea, A. v.Rhein, R.B. Wehrspohn, S. v.Riesen, S. Glunz, Dispersive elements for spectrum splitting in solar cell applications, Proc. of SPIE, **6197**:619704 (2006)
- A. v. Rhein, P. Pergande, S. Greulich-Weber, R.B. Wehrspohn, Experimental verification of apparent negative refraction in low-epsilon material in the microwave regime, J. of Appl. Phys., submitted (2006)

D. Eigene Veröffentlichungen

E. Verzeichnisse

E. Verzeichnisse

Literaturverzeichnis

- [1] C. J. BRINKER und G. W. SCHERER: *Sol-Gel Science*. Academic Press Inc., Princeton, 1990.
- [2] V. LEHMANN und H. FÖLL: *Formation mechanism and properties of electrochemically etched trenches in n-type silicon*. J. Electrochem. Soc., 137:653, 1990.
- [3] LEHMANN, V.: *Electrochemistry of Silicon*. Wiley-VCH, Weinheim, 2002.
- [4] S. JOHN: *Strong localization of photons in certain disordered dielectric superlattices*. Phys. Rev. Lett., 58:2486, 1987.
- [5] E. YABLONOVITCH, T. GMITTER und K. LEUNG: *Photonic band structure: The face-centered-cubic case employing nonspherical atoms*. Phys. Rev. Lett, 67:2295, 1991.
- [6] J.D. JOANNOPOULOS, R.D. MEADE und J.N. WINN: *Photonic Crystals: Molding the Flow of Light*. Princeton Univ. Press, Princeton, New Jersey, 1995.
- [7] ST.G. JOHNSON und J.D. JOANNOPOULOS: *Block-iterative frequency-domain methods for Maxwell's equations in a planewave basis*. Opt. Express, 8(3):173–190, 2001.
- [8] P.P. SILVERSTER und R.L. FERRARI: *Finite elements for electrical engineers*. Cambridge University Press, New York, 1983.
- [9] A. TAFLOVE und S.C. HAGNESS: *Computational Electrodynamics: The Finite-Difference Time-Domain Method*. Artech House Publishers, Norwell, Massachusetts, 2000.
- [10] K. YEE: *Numerical solution of initial boundary value problems involving maxwell's equations in isotropic media*. Anten. Propag., IEEE Trans., 14(3):302–307, 1966.
- [11] O. HESS, C. HERMANN und A. KLAEDTKE: *Finite-Difference Time Domain simulations of photonic crystal defect structures*. Phys. Stat. Sol. (a), 197(3):605–619, 2003.
- [12] MANDELSHTAM, V. A. und H. S. TAYLOR: *Harmonic inversion of time signals*. J. Chem. Phys., 68:6756–6769, 1997.
- [13] P. BIENSTMAN: *Rigorous and efficient modelling of wavelength scale photonic components*. Doktorarbeit, Universität Genf, 2001.

- [14] C. KITTEL: *Einführung in die Festkörperphysik*. R. Oldenbourg Verlag, München, 1999.
- [15] W. JIANG, R.T. CHEN und X. LU: *Theory of light refraction at the surface of a photonic crystal*. Phys. Rev. B, 71:245115, 2005.
- [16] O. WIENER. *Physik. Zeitschriften*, Seite 332, 1904.
- [17] S. M. RYTOV: *Electromagnetic properties of a finely stratified medium*. Soviet Physics JETP, 2(3):465, 1956.
- [18] D. E. ASPNES: *Bounds on allowed values of the effective dielectric function of two-component composites at finite frequencies*. Phys. Rev. B, 25(2):1358, 1982.
- [19] D.A.G. BRUGGEMAN: *Berechnung verschiedener physikalische Konstanten von heterogenen Substanzen*. Anal. Phys., 24(5):636, 1935.
- [20] K.K. KÄRKÄINEN, A.H. SIHVOLA und K.I. KIKOSKINEN: *Effective Permittivity of Mixtures: Numerical Validation by FDTD Method*. IEEE Trans. Geosci. Rem. Sens., 38(3):1303, 2000.
- [21] A. BIELAWNY, P.T. MICLEA, A. V.RHEIN, R.B. WEHRSPHON, S. V.RIESEN und S. GLUNZ: *Dispersive elements for spectrum splitting in solar cell applications*. In: *Proc. of SPIE*, Band 6197, Seite 619704, 2006.
- [22] S. RICHTER, M. STEINHART, H. HOFMEISTER, M. ZACHARIAS, U. GÖSELE, N. GAPONIK, A. EYCHMULLER, A.L. ROGACH, J.H. WENDORFF, S.L. SCHWEIZER, A. VON RHEIN und R.B. WEHRSPHON: *Quantum dot emitters in two-dimensional photonic crystals of macroporous silicon*. Appl. Phys. Lett., 87(14):142107, 2005.
- [23] R.D. MEADE, K.D. BROMMER, A.M. RAPPE und J.D. JOANNOPOULOS: *Electromagnetic Bloch waves at the surface of a photonic crystal*. Phys. Rev. B, 44:10961, 1991.
- [24] F. RAMOS-MENDIETA und P. HALEVI: *Surface electromagnetic waves in two-dimensional photonic crystals: Effect of the position of the surface plane*. Phys. Rev. B, 59:15112, 1999.
- [25] F. RAMOS-MENDIETA und P. HALEVI: *Electromagnetic surface modes of a dielectric superlattice: the supercell method*. J. Opt. Soc. Am. B, 14(2):370, 1997.
- [26] P. KRAMPER, M. AGIO, C. M. SOUKOULIS, A. BIRNER, F. MÜLLER, R. B. WEHRSPHON, U. GÖSELE und V. SANDOGHDAR: *Highly directional emission from photonic crystal waveguides of subwavelength width*. Phys. Rev. Lett., 92:113903, 2004.
- [27] M. LAROCHE, R. CARMINATI und J.-J. GREFFET: *Resonant optical transmission through a photonic crystal in the forbidden gap*. Phys. Rev. B, 71:155113, 2005.

- [28] A. MIHI, H. MIGUEZ, I. RODRIGUEZ, S. RUBIO und F. MESSGUER: *Surface resonant modes in colloidal photonic crystals*. Phys. Rev. B, 71:125131, 2005.
- [29] TORSTEN GEPPERT, S.L. SCHWEIZER und R.B. WEHRSPORN: *Deep trench etching in macroporous silicon*. Appl. Phys. A, 84:237, 2006.
- [30] T. M. GEPPERT: *Towards Photonic Crystal-Based Spectroscopic Gas Sensors*. Doktorarbeit, Martin-Luther Universität Halle-Wittenberg, 2005.
- [31] R.B. WEHRSPORN, T. M. GEPPERT, S.L. SCHWEIZER, A. V.RHEIN, D. PERGANDE, T. BEYER und A. LAMBRECHT: *Photonic crystal gas sensors*. In: *Proc. of SPIE*, Band 5855, Seiten 24–29, 2005.
- [32] T.M. GEPPERT, S.L. SCHWEIZER, J. SCHILLING, C. JAMOIS, A. V. RHEIN, D. PERGANDE, R. GLATTHAAR, P. HAHN, A. FEISST, A. LAMBRECHT und R.B. WEHRSPORN: *Photonic crystal gas sensors*. In: *Proc. of SPIE*, Band 5511, Seiten 61–70, 2004.
- [33] L. BRAGINSKY und V. SHKLOVER: *Light propagation in an imperfect photonic crystal*. Phys. Rev. B, 73:085107, 2006.
- [34] A.A. ASATRYAN, L.C. BOTTEN, M.A. BYRNE, T.N. LANGTRY, N.A. NICOROVICI, R.C. MCPHEDRAN, C. MARTIJN DE STERKE und P.A. ROBINSON: *Conductance of photons in disordered photonic crystals*. Phys. Rev. E, 71:036623, 2005.
- [35] W.R. FREI und H.T. JOHNSON: *Finite-element analysis of disorder effects in photonic crystals*. Phys. Rev. B, 70:165116, 2004.
- [36] A.F. KOENDERINK, A. LAGENDIJK und W.L. VOS: *Optical extinction due to intrinsic structural variations of photonic crystals*. Phys. Rev. B, 72:153102, 2005.
- [37] JÖRG SCHILLING: *Herstellung und optische Eigenschaften von 2D- und 3D-photonischen Kristallen aus makroporösem Silizium*. Doktorarbeit, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg, 2002.
- [38] S. MATTHIAS: *Herstellung und Charakterisierung von 3D-photonischen Kristallen aus makroporösem Silizium*. Doktorarbeit, Martin-Luther Universität Halle-Wittenberg, 2005.
- [39] J.B. PENDRY: *Negative Refraction Makes a Perfect Lens*. Phys. Rev. Lett, 85:3966, 2000.
- [40] V.G. VESELAGO: *The electrodynamics of substances with simultaneously negative values of ϵ and μ* . Sov. Phys. Usp., 10:509, 1964. 1968.
- [41] D.R. SMITH, W.J. PADILLA, D.C. VIER, S. C. NEMAT-NASSER und S. SCHULTZ: *Composite medium with simultaneously negative permeability and permittivity*. Phys. Rev. Lett., 84:4184, 2000.

- [42] LANDAU, LIFSHITS: *Electrodynamics of Continuous Media*. Pergamon Press Ltd., New York, 1960. p 255.
- [43] P.ST.J. RUSSELL: *Interference of integrated Floquet-Bloch waves*. Phys. Rev. A, 33(5):003232, 1986.
- [44] R. ZENGERLE: *Light propagation in singly and doubly periodic planar waveguides*. J. Mod. Opt., 34(12):1589–1617, 1987.
- [45] M. NOTOMI: *Theory of light propagation in strongly modulated photonic crystals: Refractionlike behavior in the vicinity of the photonic band gap*. Phys. Rev. B., 62:10696, 2000.
- [46] C. LUO, S. G. JOHNSON, J. D. JOANNOPOULOS und J.B. PENDRY: *All-angle negative refraction without negative effective index*. Phys. Rev. B, 65:201104, 2002.
- [47] C-H. KUO und Z. YE: *Optical transmission of photonic crystal structures formed by dielectric cylinders: Evidence for non-negative refraction*. Phys. Rev. E, 70:056608, 2004.
- [48] C. LUO, S.G. JOHNSON, J.D. JOANNOPOULOS und J.B. PENDRY: *Subwavelength imaging in photonic crystals*. Phys. Rev. B, 68:045115, 2003.
- [49] A. BERRIER, M. MULOT, M. SWILLO, M. QUI, L. TYHLEN, A. TALNEAU und S. ANAND: *Negative refraction at infrared wavelength in a two-dimensional photonic crystal*. Phys. Rev. Lett., 93(7):073902, 2004.
- [50] I. DE LEON und F. S. ROUX: *Fourier analysis of reflection and refraction in two-dimensional photonic crystals*. Phys. Rev. B, 71:235105, 2005.
- [51] X. ZHANG: *Tunable non-near-field focus and imaging of an unpolarized electromagnetic wave*. Phys.Rev. B, 71:235103, 2005.
- [52] X. ZHANG: *Image resolution depending on slab thickness and object distance in a two-dimensional photonic-crystal-based superlens*. Phys. Rev. B, 70:1951100, 2004.
- [53] S. HE, Z. RUAN, L. CHEN und J. SHEN: *Focusing properties of a photonic crystal slab with negative refraction*. Phys. Rev. B, 70:115113, 2004.
- [54] H-T. CHIEN, H-T. TANG, C-H. KUO, C-C. CHEN und Z. YE: *Directed diffraction without negative refraction*. Phys. Rev. B, 70:113101, 2004.
- [55] X. WANG und K. KEMPA: *Effects of disorder on subwavelength lensing in two-dimensional photonic crystal slabs*. Phys. Rev. B, 71:085101, 2005.
- [56] S. YANG, T. XU, H. RUDA und M. COWAN: *Numerical study of anomalous refraction in photonic crystals*. Phys. Rev. B, 72:075128, 2005.

- [57] A. MARTINEZ und J. MARTI: *Negative refraction in two-dimensional photonic crystals: Role of lattice orientation and interface termination*. Phys. Rev. B, 71:235115, 2005.
- [58] B. LOMBARDET, L. ANDREA DUNBAR, R. FERRINI und R. HOUDRE: *Fourier analysis of Bloch wave propagation in photonic crystals*. J. Opt. Soc. Am. B, 22(6):1179, 2005.
- [59] Z. RUAN, M. QIU, S. XIAO, S. HE und L. THYLEN: *Coupling between plane waves and Bloch waves in photonic crystals with negative refraction*. Phys. Rev. B, 71:045111, 2005.
- [60] S. XIAO, M. QIU und Z. RUAN: *Influence of the surface termination to the point imaging by a photonic crystal slab with negative refraction*. Appl. Phys. Lett., 85(19):4269, 2004.
- [61] E. CUBUKCU, K. AYDIN und E. OZBAY: *Subwavelength resolution in a two-dimensional photonic-crystal-based superlens*. Phys. Rev. Lett., 91(20):207401, 2003.
- [62] B. RIDDLE, J. BAKER-JARBIS und J. KRUPKA: *Complex permittivity measurements of common plastics over variable temperatures*. IEEE Trans. on Microwave Theory Techn., 51(3):727–733, 2003.
- [63] S. FOTEINOPOULOU und C.M. SOUKOULIS: *Electromagnetic wave propagation in two-dimensional photonic crystals: A study of anomalous effects*. Phys. Rev. B, 72:165112, 2005.
- [64] R. MOUSSA, S. FOTEINOPOULOU, L. ZHANG, G. TUTTLE, K. GUVEN, E. OZBAY und C.M. SOUKOULIS: *Negative refraction and superlens behavior in a two-dimensional photonic crystal*. Phys. Rev. B, 71:085106, 2005.
- [65] Y.S. CHAN, C.T. CHAN und Z.Y. LIU: *Photonic Band Gaps in Two Dimensional Photonic Quasicrystals*. Phys. Rev. Lett., 80:956, 1998.
- [66] C. JIN, B. CHENG, B. MAN, Z. LI und D. ZHANG: *Band gap and wave guiding effect in a quasiperiodic photonic crystal*. Appl. Phys. Lett., 75(13):1848, 1999.
- [67] X. ZHANG, Z.-Q. ZHANG und C.T. CHAN: *Absolute photonic band gaps in 12-fold symmetric photonic quasicrystals*. Phys. Rev. B, 63:081105, 2001.
- [68] A. DELLA VILLA, S. ENOCH, G. TAYEB, V. PIERRO, V. GALDI und F. CAPOLINO: *Band gap formation and multiple scattering in photonic quasicrystals with an penrose-type lattice*. Phys. Rev. Lett., 94:183903, 2005.
- [69] D. N. CHIGRIN, S. ENOCH, C. M. SOTOMAYOR TORRES und G. TAYEB: *Self-guiding in two-dimensional photonic crystals*. Opt. Express, 10(11):1203, 2003.
- [70] Z-Y. LI und K-M. HO: *Light propagation in semi-infinite photonic crystals and related waveguide structures*. Phys. Rev. B, 68:155101, 2003.

Literaturverzeichnis

- [71] D.M. WHITTAKER und I.S. CULSHAW: *Scattering-matrix treatment of patterned multilayer photonic structures*. Phys. Rev. B, 60(4):2610–2618, 1999.
- [72] E. NOPONEN und J. TURUNEN: *Eigenmode method for electromagnetic synthesis of diffractive elements with three-dimensional profiles*. J. Opt. Soc. Am. A, 11(9):2494, 1994.
- [73] J.-M. SPAETH, J.R. NIKLAS und R.H. BARTRAM: *Structural Analysis of Point Defects in Solids: An Introduction to Multiple Magnetic Resonance Spectroscopy*, Band 43 der Reihe *Solid-State Sciences*. Springer-Verlag, Berlin.

Abbildungsverzeichnis

2.1. Luftlöcher in 2D-hexagonaler Anordnung	10
2.2. Zusammenhang zwischen Realraum und reziprokem Raum	10
2.3. Bandstruktur 2D-hexagonaler Kristall	15
2.4. Bloch- und Kristallfunktion, FEM	20
2.5. Bandstruktur, FEM	21
2.6. Konvergenzverhalten des Eigenwertproblems für PWEM und FEM	22
2.7. Einfluss der PML, Fehlerbetrachtung	26
2.8. Zeitverhalten und Leistungsspektrum, FDTD	28
2.9. Bandstrukturvergleich zwischen PWEM und FDTD	29
2.10. Konvergenzverhalten bei der FDTD-Methode	30
2.11. 1D-Banddiagramm	33
2.12. Transmission durch 1D-Kristall	34
2.13. Äquifrequenzflächen zur Beschreibung der Reflexionsgesetze	36
2.14. Effektiv-Medium, Wiener-Grenzen	38
2.15. Autokorrelationssignale, Beispiel	42
2.16. FDTD Dispersionsbeispiel	43
2.17. Transmissionsauswertung eines dünnen Siliziumplättchens	44
2.18. inv. Opal-Bandstruktur mit Dispersion	47
2.19. Äquifrequenzflächen für 2D-hexagonalen Kristall	48
2.20. Äquifrequenzflächen eines fcc Kugelkristalls	48
3.1. Definition ARL	53
3.2. Transmission einer Defektmode in Abhängigkeit der ARL-Dicke	55
3.3. Projizierte Bandstruktur	56
3.4. Oberflächenzustände als Funktion der ARL Dicke	57
3.5. d_{ARL} -Einfluss auf die energetische Lage der r-EDs.	59
3.6. d_{ARL} -Einfluss auf Reflexion	60
3.7. r-ED Moden	60
3.8. r-ED Moden	61
3.9. Stufen-Modell der ARL	61
3.10. Aufbau/Schema des Gassensors	62
3.11. Elektronenmikroskopaufnahme geätzter Proben	63
3.12. In-Plane und Off-Axis Bandstruktur eines 2D-hex-PhCs	64
3.13. r-ED Zustand als Funktion der ARL, TE	67
3.14. Transmissionsverbesserung durch ARL, TM-Mode	68
3.15. Absorptionsverbesserung des Gassensors	69

Abbildungsverzeichnis

3.16. Äquifrequenzflächen am Arbeitspunkt	71
3.17. Dispersion für TE= H_z -Polarisation	72
3.18. 3D-FDTD Transmissionsrechnung	74
3.19. Gegenüberstellung von Transmission und Bandstruktur	76
3.20. Transmissionsmessung Γ_M	76
3.21. Reflexionsmessung mit Oberflächenmoden	78
3.22. Poren- und Radius-Streuung in einem PhC	81
3.23. Transfermatrix- und 3D-PWE-Methoden Vergleich	82
3.24. Reflexionssimulation mit Transfermatrix	83
3.25. Transmissionsmessung parallel zu den Porenachsen, Unordnung	83
3.26. Striations	84
4.1. Negative Brechung durch negatives μ und ϵ	88
4.2. Banddiagramm und EFS für negative Brechung mit $\epsilon = 11,6$	93
4.3. Anormale Brechung bei einer FEM-Simulation	94
4.4. Kopplungsverhalten einer PhC-Mode an eine ebene Welle.	95
4.5. Ebene Wellenzerlegung der Blochmode des Negative-Brechungsindexbandes.	95
4.6. EFS und Banddiagramm für Mikrowellen-PMMA-Kristall	98
4.7. Transmission, Messung und Simulation für $\epsilon = 2,6$	99
4.8. Mikrowellenexperiment, Aufbauskinne.	99
4.9. Streufeldvermessung	100
4.10. Streufeldsimulation	101
4.11. Strahlenoptikexperiment	103
5.1. Reflexion durch Streumatrix-Methode	108
5.2. GVD-Parameter	110
5.3. Dispersionskompensator	111
A.1. Wirkung entlang der Hochsymmetrierichtungen	114
A.2. Koppelstärke entlang der Hochsymmetrierichtungen	115
A.3. Längenabhängigkeit von Unordnung, Funktion der Kristalllänge	116
A.4. Längenabhängigkeit von Unordnung, T über Frequenz	116
A.5. Übersicht über Transmission und optische Wegverbesserung	117
A.6. ARL-Auswahl für die negative Brechung	118
B.1. Effektiv-Medium und ARL im 1. Band	120
C.1. Klassischer Zylinder-EPR-Resonator, 3D-FEM-Simulation.	123
C.2. Banddiagramm metallischer hexagonaler Kristall	126
C.3. Quadrupol-Resonanz für einen EPR-Resonator, 3D-FEM Simulation	127
C.4. Gemessene Quadrupol-Resonanz	128

F. Erklärung und Danksagung

F.1. Eidestattliche Erklärung

Ich erkläre hiermit an Eides Statt, dass ich die vorliegende Arbeit selbstständig und ohne die Benutzung anderer als der angegebenen Hilfsmittel angefertigt habe; die aus fremden Quellen direkt oder indirekt übernommenen Gedanken sind als solche kenntlich gemacht.

Die Arbeit wurde bisher in gleicher oder ähnlicher Form keiner anderen Prüfungskommission vorgelegt und auch nicht veröffentlicht.

.....
Andreas von Rhein

F.2. Danksagung

Zu Danken gibt es vielen. Schwierig ist es den dankeswürdigen Personen gerecht zu werden und sie alle aufzulisten. Alle Nichterwähnten in dem kommenden Abschnitt mögen meine Vergesslichkeit entschuldigen.

Zuerst möchte ich Prof. Dr. Wehrspohn danken. Er gab mir die Freiheit und die Möglichkeit auf dem Gebiet der photonischen Kristall zu forschen.

Der nächste Dank richtet sich an Prof. Dr. Greulich-Weber, welcher bei der Inspiration und der Umsetzung des Mikrowellenaufbaus behilflich war.

Für Herstellung und Vorüberlegungen auf denen diese Arbeit zum Teil basiert möchte ich T. Geppert danken, welcher mir aus Halle am Max-Planck-Institut zuarbeitete. Ein großer Dank geht auch an S.L. Schweizer für seine am Ätzer verlorengegangenen Wochenenden und aufreibenden Messkampagnen am Fraunhofer Institut in Freiburg.

Für theoretische Diskussionen möchte ich mich bei D. Pergande, B. Gesemann und A. Bielawny bedanken.

Dankesreden können sehr ausschweifend enden. Weshalb ich nun auch mit meiner Familie abschließen möchte: Zu guter Letzt und immerfort danke ich meiner Frau für die Geduld und meiner Tochter für ihr tägliches Lächeln.