

PERIODISCHE PUNKTDEFEKTSTRUKTUREN
UND QUANTENPUNKTEMITTER IN
ZWEIDIMENSIONALEN PHOTONISCHEN
KRISTALLEN

Dissertation

zur Erlangung des akademischen Grades

Doctor rerum naturalium (Dr. rer. nat.)

vorgelegt der

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

von Herrn Stefan Richter
geb.: 07.11.1975 in: Dresden

Gutachter:

1. PD Dr. M. Zacharias, MPI für Mikrostrukturphysik
2. Prof. Dr. H. Graener, Martin-Luther-Universität Halle/Wittenberg
3. Prof. Dr. K. Busch, University of Central Florida, Orlando

Halle (Saale), am 06. Juli 2004

urn:nbn:de:gbv:3-000007089

[<http://nbn-resolving.de/urn/resolver.pl?urn=nbn%3Ade%3Agbv%3A3-000007089>]

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	4
2	Photonische Kristalle	7
2.1	Zur Begriffsklärung	7
2.2	Das Konzept der photonischen Kristalle	8
2.3	Die Zustandsdichte im Photonischen Kristall	11
2.4	Beispiele photonischer Kristallstrukturen	13
2.4.1	Eindimensionale photonische Kristalle	13
2.4.2	Zweidimensionale photonische Kristalle	13
2.4.3	Dreidimensionale photonische Kristalle	15
2.5	Defektstrukturen in photonischen Kristallen	16
2.5.1	Punktdefekte	16
2.5.2	Liniendefekte-Wellenleiterstrukturen	18
2.5.3	Defektstrukturen als Resonatoren	19
3	Strahlende Rekombination	22
3.1	Die Lichtemission	22
3.2	Der Purcell-Effekt	25
3.3	Die lokale Zustandsdichte	26
3.3.1	Die Bewegungsgleichung	26
3.3.2	Die lokale Zustandsdichte von Resonatoren - Kopplungsregime	27
4	HgTe-Quantenpunkt-Emitter	30
4.1	Herstellung und optische Eigenschaften	30
5	Makroporöses Silizium - ein Modell für photonische Kristalle	33
5.1	Die Herstellung	33
5.1.1	Der elektrochemische Ätzprozeß	33
5.1.2	Geordnete Makroporen	35
5.1.3	Die Erzeugung von Defektstrukturen - Proximity Effekt	35
5.2	Der 2D hexagonale Kristall	35
5.2.1	Die Bandstruktur	35
5.2.2	Optische Charakterisierung	36
5.2.3	Reflexionsmessung und Bandstruktur - der Vergleich	38
5.2.4	Aufweitung der Poren	44
6	Interne Emitter in 2D-Photonischen Kristallen	45
6.1	Kopplungsbedingungen für Emitter	45
6.2	Definierte Infiltration	46
6.2.1	Herstellung von HgTe/Polymer-Nanoröhren	46
6.2.2	Optische Eigenschaften	47
6.2.3	Einfluß auf die Bandstruktur	49

6.3	Lumineszenz interner Emitter	50
6.3.1	Der optische Aufbau zur Photolumineszenzspektroskopie	50
6.3.2	Lumineszenzspektroskopie an photonischen Kristallen.	52
7	Periodische Punktdefektstrukturen	58
7.1	Design und Herstellung	58
7.2	Strukturelle Eigenschaften periodischer Punktdefekte	59
7.3	Theoretische Modellierung	62
7.4	Optische Eigenschaften periodischer Punktdefekte	64
7.5	Lokalisierte Zustände	65
7.5.1	Lokalisierung der Felder	65
7.5.2	Klassifizierung der lokalisierten Zustände	69
7.5.3	Die Wechselwirkung lokalisierter Zustände	70
7.5.4	Gruppengeschwindigkeiten der Defektzustände	72
7.6	Interne Emitter in Punktdefekten	75
7.6.1	Lokale Zustandsdichte-Kopplungsbedingung der Emitter	75
7.6.2	Lumineszenzuntersuchungen an Punktdefekten	79
7.6.3	Selektives Infiltrieren in die Punktdefekte	80
7.6.4	Lumineszenzmessung der Resonatormoden	81
8	Zusammenfassung und Ausblick	85
8.1	Zusammenfassung	85
8.2	Ausblick	87

1. Einleitung

Betrachtet man eine Luftblase in einem Stück Glas, so stellt man fest, daß ein Teil des Lichtes reflektiert bzw. gebrochen wird. Dieses reflektierte bzw. gebrochene Licht erlaubt es, die Luftblase im Glas zu sehen. Aufgrund der unterschiedlichen Brechungsindizes von Luft und Glas wirkt die Luftblase als Streuzentrum für das Licht.

In ähnlicher Art und Weise wirkt ein Atom bzw. Ion als Streuzentrum für ein sich näherndes Elektron. Aus der Festkörperphysik ist bekannt, daß ein Kristall eine periodische Anordnung von Streuzentren darstellt. Treffen nun Elektronen von außen auf den Kristall, so werden sie abhängig von ihrer Energie und dem Einfallswinkel unterschiedlich stark gestreut. Aufgrund ihrer Welleneigenschaft kommt es bei der Erfüllung der Bragg-Bedingung zu einer konstruktiven Interferenz der Elektronenwelle und damit zu einer verstärkten Reflexion.

Befindet sich das Elektron im Kristall, so würde man bei naiver Betrachtung annehmen, daß eine permanente Streuung an den Atomen des Kristalles erfolgt. Tatsächlich ist jedoch in Abhängigkeit von der Energie eine relativ freie Bewegung des Elektrons über mehrere hundert Gitterkonstanten möglich, bevor es zu einer Streuung kommt. Eine solche Streuung erfolgt nur an einer Störung der Gitterperiodizität (Fremdatom, Versetzung, Phonon...). Denn aufgrund der periodischen Anordnung der Atome, ist die Wellenfunktion der Elektronen selbst gitterperiodisch und genügt dem Bloch-Theorem. Eine solche Bloch-Welle kann sich frei im perfekten Kristall bewegen. Durch die periodische Anordnung einer sehr großen Anzahl von Atomen bildet sich aus den diskreten Energieniveaus der Elektronen eine Bandstruktur aus, welche die Bewegung der Elektronen im Kristall bestimmt. Die Bandstrukturen von Isolatoren bzw. Halbleitern stellen dabei eine Besonderheit dar, da sie energetische Bereiche aufweisen, in denen keine Zustände existieren. Diese Bereiche werden als Bandlücken bezeichnet.

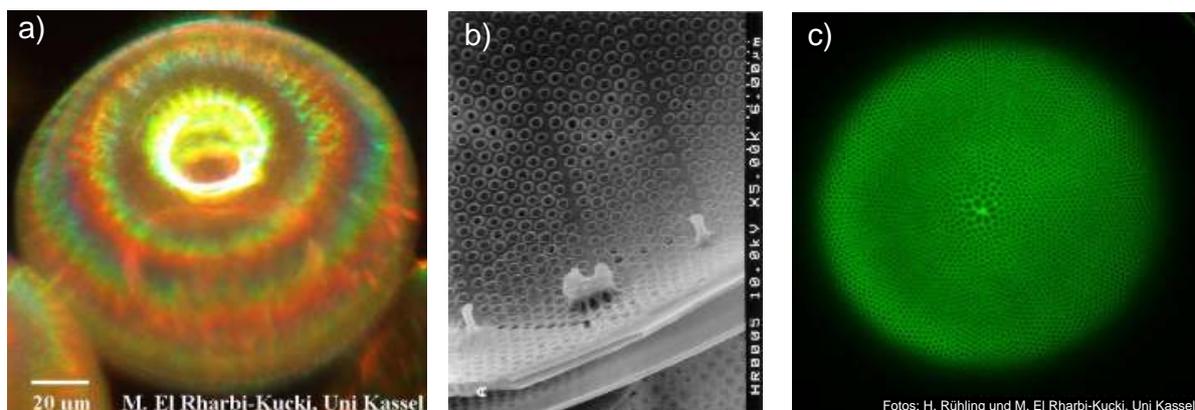


Abbildung 1.1: a) Lichtmikroskopische Aufnahme einer Kieselalge (*Coscinodiscus Granii*), b) REM-Aufnahme des Lochgitters; c) Lichtemission des eingelagerten Farbstoffes, aufgenommen mit einem konfokalen Lumineszenzmikroskop. (Bilder von M. El Rharbi-Kucki und H. Rühling, Universität Kassel)

Um dieses Konzept auch für Licht anzuwenden, ist es notwendig Materialien mit unterschiedlichem Brechungsindex gitterperiodisch anzuordnen. Dadurch entsteht ein photonischer Kristall. Wie auch bei den Elektronen im atomaren Kristall existiert für die Photonen eine Bandstruktur innerhalb des photonischen Kristalls.

In der Natur gibt es eine Reihe von Beispielen für photonische Kristalle. So beruht die Farbgebung der Flügel einiger Schmetterlingsarten nicht auf Farbpigmenten, sondern auf deren Oberflächenstrukturierung, wodurch ein bestimmter Wellenlängenbereich des Lichtes reflektiert wird. Als weitere Beispiele wären Muschelschalen, die Pfauenfeder oder auch die Opale zu nennen. Ein besonderes Beispiel sind die Schalenskelette der Kieselalgen (Diatomeen). Sie bestehen aus Silikaten mit einem periodischen Lochgitter (Abb.1.1). Bei der Zucht solcher Diatomeen wurden der Nährlösung Farbstoffe beigemischt. Diese Farbstoffe werden in die Schale eingelagert und sind unter dem Fluoreszenzmikroskop sichtbar (Abb.1.1c). Dies ist gerade im Hinblick auf die Untersuchung von Lichtemittern in photonischen Kristallen interessant.

Allerdings ist kein natürlicher photonischer Kristall bekannt, dessen Bandstruktur eine vollständige Bandlücke aufweist. Ein solcher energetischer Bereich ohne photonische Zustände verbietet die Lichtausbreitung im Kristall aus einer beliebigen Raumrichtung. Deshalb ist man daran interessiert, Strukturen künstlich herzustellen, die eine solche vollständige Bandlücke in ihrer Bandstruktur aufweisen. Für den eindimensionalen Fall ist der „Bragg-Stack“, bestehend aus einer schichtweisen Anordnung unterschiedlicher Dielektrika, schon seit langem bekannt. Eine Verallgemeinerung dieses Prinzips auf drei Dimensionen wurde 1987 von Yablonovitch und John vorgeschlagen [89] [36]. Einige Jahre später wurde eine solche Struktur im Mikrowellenbereich erstmals experimentell realisiert [90]. Seitdem gab es viele Vorschläge und experimentelle Umsetzungen von mehrdimensional periodischen Strukturen mit photonischen Bandlücken. Eine Optimierung der Herstellungsverfahren ermöglichte eine Verringerung der Strukturgrößen mit photonischen Bandlücken bis hin zum Spektralbereich des infraroten bzw. auch des sichtbaren Lichtes. Dies ermöglicht die Untersuchung der Lichtemission, da insbesondere Emitter durch einen umgebenden photonischen Kristall beeinflusst werden. Innerhalb eines dreidimensionalen photonischen Kristalles mit vollständiger Bandlücke wird die spontane Emission unterdrückt. Der experimentelle Nachweis wurde bisher jedoch nicht erbracht, da die untersuchten Kristalle eine zu große Unordnung aufwiesen oder die Anzahl ihrer Elementarzellen zu gering war.

Das Interesse an den photonischen Kristallen beschränkt sich aber nicht nur auf die Untersuchung ihrer Eigenschaften. Es wurden ebenso Experimente an Systemen durchgeführt, die mit Photonen bzw. dem elektromagnetischen Feld wechselwirken. So sind z.B. Arbeiten in den Bereichen der Quantenoptik, nichtlinearen Optik oder auch der Plasmonik im Zusammenhang mit photonischen Kristallen veröffentlicht worden [79, 37].

Ein System, daß sich zu Herstellung von photonischen Kristallen eignet, ist das makroporöse Silizium. Durch einen elektrochemischen Ätzprozeß lassen sich ausgedehnte, hoch geordnete, periodische Strukturen mit einem hohen Brechungsindexkontrast herstellen. Die Anwendung als Modellsystem eines zweidimensionalen photonischen Kristall mit vollständiger Bandlücke wurde bereits demonstriert [26, 10, 74].

Ein solches bewährtes Modellsystems bietet nun die Möglichkeit, prinzipielle Eigenschaften photonischer Kristalle experimentell zu untersuchen.

Um weitere Erkenntnisse über ein solches Modellsystem zu gewinnen, ist es notwendig, daß zunächst geringfügige Veränderungen vorgenommen werden, um dessen Eigenschaften mit dem ungestörten System zu vergleichen. So ist beispielsweise das Einführen von Defektstrukturen im Kristallgitter von besonderem Interesse, da diese (wie bei Halbleitern) Zustände innerhalb der photonischen Bandlücke erzeugen. Wie auch bei Festkörpern ist es also denkbar, daß beispielsweise die Defektkonzentration einen wesentlichen Einfluß auf die Eigenschaften des

Kristalls hat.

Weiterhin ist es bis jetzt nicht gelungen, interne Emitter in einen photonischen Kristall aus makroporösem Silizium einzubringen, um den Einfluß der Bandstruktur auf das Emissionsverhalten von Emitttern zu untersuchen. Da aber insbesondere bei diesem Kristall die photonischen Eigenschaften besonders stark ausgeprägt sind, ist eine Wechselwirkung zwischen photonischem Kristall und Emitter zu erwarten, die Aussagen sowohl über den Emitter als auch den Kristall selbst ermöglichen sollten.

Die Ziele der vorliegenden Arbeit sind:

1. Die Funktionalisierung eines zweidimensionalen photonischen Kristalles aus makroporösem Silizium mit internen Lichtemittern.
2. Die spektrale Charakterisierung einer Modifikation der Lichtemission.
3. Die Untersuchung von periodischen Punktdefektstrukturen in photonischen Kristallen.

2. Photonische Kristalle

2.1 Zur Begriffsklärung

Was ist ein photonischer Kristall ?

Ein photonischer Kristall ist die räumlich periodische Anordnung dielektrischer Materialien mit unterschiedlichem Brechungsindex. Abbildung 2.1 zeigt die dielektrische Funktion ϵ und damit den Brechungsindex n als periodische eindimensionale Funktion des Ortes mit der Gitterkonstante a . Die Elemente mit niedrigem Brechungsindex haben die Breite $2r$.

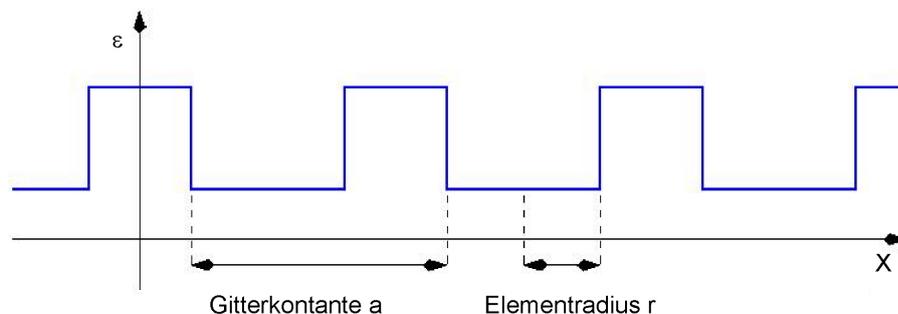


Abbildung 2.1: Räumlich periodische dielektrische Funktion ϵ als Modell eines eindimensionalen photonischen Kristalls

Für eine elektromagnetische Welle in dieser periodischen Struktur existiert, aufgrund der Streuung an den Grenzflächen unterschiedlicher Brechungsindizes, die eindimensionale Braggbedingung

$$\frac{\nu}{c} = m \frac{\pi}{a}. \quad (2.1)$$

Dabei ist $\nu = c/\lambda$ die Frequenz der Welle und m eine ganze Zahl. Betrachtet man die Streuung an einem einzelnen Element der Struktur, so ist die Transmission für $\lambda/2 = 2r$ maximal. Für $\lambda/4 = 2r$ ergibt sich eine maximale Reflexion.

Bei geeignetem Verhältnis von Elementradius r und Gitterkonstante a kommt es somit zur destruktiven Interferenz und damit zur Auslöschung der Welle im Kristall.

Außerdem ist das Verhältnis der elektromagnetischen Wellenlänge zur Periodizitätslänge des Kristalls von Bedeutung. Ist die Wellenlänge deutlich größer als die Gitterkonstante des photonischen Kristalls, so „sieht“ die Welle ein effektives Medium und es kann für die gesamte Struktur ein mittlerer (effektiver) Brechungsindex angegeben werden. Nur für eine mit der Gitterkonstante vergleichbaren bzw. kleineren Wellenlänge kommt es zur Bragg-Streuung und somit zur Interferenz der gestreuten Wellen. Variiert man jetzt den Brechungsindex in einer Ebene bzw. in allen 3 Raumrichtungen, so erhält man einen zwei- bzw. dreidimensionalen photonischen Kristall.

2.2 Das Konzept der photonischen Kristalle

Der Formalismus, der den photonischen Kristallen zugrunde liegt, wurde 1864 von J.C. Maxwell in seiner Arbeit „Die dynamische Theorie des elektromagnetischen Feldes“ [54] erstmals vorgestellt. Die Elektrodynamik läßt sich in 4 kompakten Gleichungen darstellen

$$\nabla \cdot \vec{D}(\vec{r}, t) = \nabla \cdot \varepsilon(\vec{r}, \omega) \varepsilon_0 \vec{E}(\vec{r}, t) = 0 \quad (2.2)$$

$$\nabla \cdot \vec{B}(\vec{r}, t) = \mu_0 \mu \nabla \cdot \vec{H}(\vec{r}, t) = 0 \quad (2.3)$$

$$\nabla \times \vec{E}(\vec{r}, t) = -\mu_0 \mu \frac{\partial \vec{H}(\vec{r}, t)}{\partial t} \quad (2.4)$$

$$\nabla \times \vec{H}(\vec{r}, t) = \frac{\varepsilon(\vec{r}, \omega) \varepsilon_0 \partial \vec{E}(\vec{r}, t)}{\partial t} \quad (2.5)$$

Dabei ist \vec{E} das elektrische Feld, \vec{D} die dielektrische Verschiebung, \vec{H} das magnetische Feld und \vec{B} die magnetische Flußdichte. Weiterhin ist zu beachten, daß hier nur die quellenfreien Gleichungen, d.h. ohne Ladungs- bzw. Stromdichten, angegeben werden. Aus den beiden Rotationsgleichungen erhält man die Wellengleichungen für das elektrische bzw. magnetische Feld

$$\nabla \times \nabla \times \vec{E}(\vec{r}, t) = -\frac{\varepsilon(\vec{r}, \omega)}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{E}(\vec{r}, t)}{\partial t^2} \quad (2.6)$$

$$\nabla \times \left[\frac{1}{\varepsilon(\vec{r}, \omega)} \nabla \times \vec{H}(\vec{r}, t) \right] = -\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{H}(\vec{r}, t)}{\partial t^2}. \quad (2.7)$$

Für einen unendlichen Kristall läßt sich die Zeitabhängigkeit der beiden Gleichungen mit Hilfe von harmonischen Wellen separieren

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

$$\vec{H}(\vec{r}, t) = \vec{H}(\vec{r}, \omega) e^{i\omega t}. \quad (2.9)$$

Für die beiden Wellengleichungen (2.6) und (2.7) ergibt sich damit

$$\frac{1}{\varepsilon(\vec{r}, \omega)} \nabla \times \nabla \times \vec{E}(\vec{r}, \omega) = \frac{\omega^2}{c^2} \vec{E}(\vec{r}, \omega) \quad (2.10)$$

$$\nabla \times \left[\frac{1}{\varepsilon(\vec{r}, \omega)} \nabla \times \vec{H}(\vec{r}, \omega) \right] = \frac{\omega^2}{c^2} \vec{H}(\vec{r}, \omega). \quad (2.11)$$

Betrachtet man die Gleichungen (2.10) und (2.11) als Operatorgleichungen, so stellen diese Eigenwertprobleme für das elektrische und das magnetische Feld dar. Wesentlich hierbei ist, daß der Operator der Wellengleichung für das magnetische Feld hermitesch ist. Damit lassen sich sofort Schlußfolgerungen ziehen; die Eigenwerte $\frac{\omega^2}{c^2}$ sind reell und die Eigenfunktionen $\vec{H}(\vec{r}, \omega)$ bilden ein vollständiges orthogonales System. Weiterhin sind die Gleichungen linear, d.h. jede Superposition von Lösungen ist wieder eine Lösung. Ein Vergleich zur Quantenmechanik und der Schrödingergleichung ist somit naheliegend. Es existieren jedoch auch gravierende Unterschiede.

1. Die Wellenfunktion der Schrödingergleichung ist eine skalare Funktion (unter Vernachlässigung des Spins), während das magnetische Feld hingegen eine vektorielle Größe ist.
2. Ist das Potential $V(\vec{r})$ der Schrödingergleichung und damit auch die Gleichung separabel (z.B. für einzelne Raumkoordinaten), so vereinfacht sich die Gleichung zu einzelnen Problemen der jeweiligen Raumkoordinaten. Für die Wellengleichung des Magnetfeldes ist dies nicht möglich, selbst wenn $\varepsilon(\vec{r}, \omega)$ separabel ist, da bereits die Differentialoperatoren verschiedene Raumrichtungen koppeln.

Es ist also notwendig, nur eine der beiden Wellengleichungen (2.10, 2.11) zu lösen. Um das jeweils andere Feld zu erhalten, kann man die Beziehung

$$\vec{E}(\vec{r}, \omega) = \left(\frac{-ic}{\omega\varepsilon(\vec{r})}\right)\nabla \times \vec{H}(\vec{r}, \omega) \quad (2.12)$$

nutzen. Dabei ist es aufgrund der Hermitizität vorteilhaft, die Gleichung für das magnetische Feld zu lösen.

Der photonische Kristall wird durch die räumlich variierende dielektrische Funktion $\varepsilon(\vec{r}, \omega)$ dargestellt. Zur Vereinfachung soll angenommen werden, daß

1. die Materialien, aus denen der Kristall besteht, isotrop sind, d.h. $\varepsilon(\vec{r}, \omega)$ ist eine skalare Funktion,
2. $\varepsilon(\vec{r})$ frequenzunabhängig ist,
3. im betrachteten Spektralbereich keine Absorption auftritt, $\varepsilon(\vec{r})$ ist somit eine reelle Funktion,
4. die Materialien nicht magnetisierbar sind (die Permeabilität $\mu = 1$).

Ein unendlich ausgedehnter Kristall wird dabei durch eine periodische Funktion $\varepsilon(\vec{r})$ beschrieben, für die $\varepsilon(\vec{r}) = \varepsilon(\vec{r} + \vec{R})$ gilt. \vec{R} ist dabei ein beliebiger Gittervektor im Kristall. Diese Periodizität der dielektrischen Funktion erlaubt es, ein Ergebnis der quantenmechanischen Beschreibung der Festkörperphysik zu nutzen. Als Lösungsansatz des ortsabhängigen Anteils des magnetischen Feldes erweisen sich Blochwellen als geeignet

$$\vec{H}(\vec{r}, \omega) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{n,\vec{k}}^H(\vec{r}). \quad (2.13)$$

$u_{n,\vec{k}}^H(\vec{r})$ ist dabei eine gitterperiodische Funktion, für die gilt

$$u_{n,\vec{k}}^H(\vec{r}) = u_{n,\vec{k}}^H(\vec{r} + \vec{R}), \quad (2.14)$$

mit dem Bandindex n und einem reziproken Gittervektor \vec{k} . Setzt man den Blochwellenansatz in die Wellengleichung (2.11) ein, ergibt sich

$$(i\vec{k} + \nabla) \times \left[\frac{1}{\varepsilon(\vec{r})} (i\vec{k} + \nabla) \times u_{n,\vec{k}}^H(\vec{r}) \right] = \frac{\omega^2}{c^2} u_{n,\vec{k}}^H(\vec{r}). \quad (2.15)$$

Ebenso wie in der Festkörpertheorie lassen sich nun die dielektrische Funktion wie und $u_{n,\vec{k}}^H(\vec{r})$ als Fourierreihen entwickeln. Damit wird das Differentialgleichungssystem (2.10, 2.11) zu einem algebraischen Gleichungssystem, aus dessen Koeffizientendeterminante man die Eigenwerte $\omega_{n,\vec{k}}$ für den jeweiligen \vec{k} -Vektor der Bloch-Funktion erhält.

Diese Fouriertransformation des Gleichungssystems entspricht dem Übergang vom Realraum zum reziproken Raum. Um also das Äquivalent zur Bandstruktur der Elektronen in einem Festkörper zu erhalten, wählt man für die k -Vektoren die Pfade zur Verbindung der Symmetriepunkte in der 1. Brillouinzone des Kristalls.

Stellt man die Eigenwerte $\omega_{n,\vec{k}}$ gegenüber den zugehörigen k -Vektoren der 1. Brillouinzone

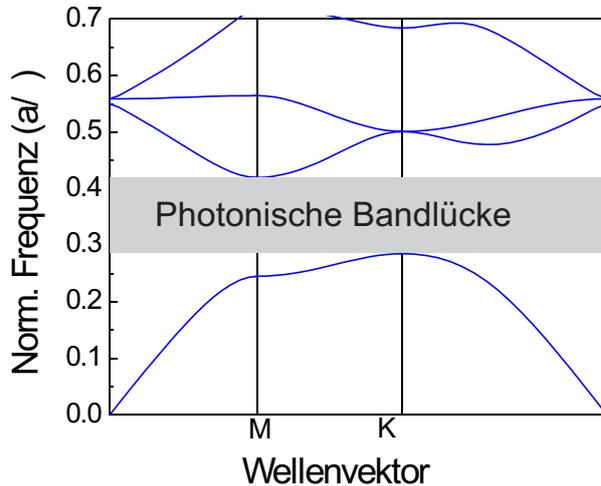


Abbildung 2.2: Bandstruktur eines quadratischen zweidimensionalen photonischen Kristalls aus Stäben (Bandstrukturrechnung R. Hillebrand)

dar [Abb. 2.2], so ergibt sich die Bandstruktur eines photonischen Kristalls. Für bestimmte Kristallstrukturen in Abhängigkeit des dielektrischen Kontrastes ergeben sich in der kompletten 1. Brillouinzone Frequenzintervalle, in denen keine Zustände des elektromagnetischen Feldes existieren. In Analogie zur Festkörperphysik werden diese Bereiche als photonische Bandlücken bezeichnet. Innerhalb der photonischen Bandlücke eines unendlich ausgedehnten photonischen Kristalls ist die Existenz propagierender elektromagnetischer Wellen nicht möglich. Typischerweise werden Felder mit Frequenzen innerhalb der Bandlücke als evaneszierende Welle mit imaginären \vec{k} beschrieben. Der Ortsanteil des Feldes (2.13) wird dabei um einen Faktor $\exp(-\vec{k}\cdot\vec{x})$ erweitert. Existieren Bandlücken nur für bestimmte Bereiche in der 1. Brillouinzone, so werden diese Stopbänder genannt, da eine Ausbreitung der Welle nur in bestimmten Richtungen erfolgen kann.

Die Größe einer Bandlücke läßt sich durch das Verhältnis ihrer Breite und der mittleren Frequenz angeben, $\frac{\Delta\omega}{\omega}$.

Die Eigenwerte werden in den sogenannten normierten Frequenzen $f_{norm} = \frac{\omega a}{2\pi c} = \frac{a}{\lambda}$ angegeben. Damit wird eine wesentliche Eigenschaft der Ausgangsgleichungen zum Ausdruck gebracht, sie sind skalierbar. Die berechnete Bandstruktur ist somit nur von der Struktur des Kristalls, jedoch nicht von seiner absoluten Größe abhängig. Zur Anwendung auf einen konkreten photonischen Kristall muß man also lediglich die jeweilige Gitterkonstante a einsetzen. Prinzipielle Eigenschaften lassen sich somit an Modellen eines größeren Maßstabs bestimmen. Will man jedoch Experimente in einem bestimmten Spektralbereich (z.B. im sichtbaren Licht oder im nahen Infrarot) durchführen, so ist es notwendig, Strukturen im entsprechenden Maßstab herstellen zu können.

Unter Kenntnis der Eigenwerte $\omega_{n,\vec{k}}$ lassen sich jetzt zu jedem Eigenwert die zugehörigen ortsabhängigen Felder $H(\vec{r}, \omega)$ bzw. $E(\vec{r}, \omega)$ im photonischen Kristall berechnen. Abbildung 2.3 zeigt die Verteilung der elektrischen Feldenergie für unterschiedliche Frequenzen. Unterhalb der photonischen Bandlücke konzentriert sie sich im Material mit hohem Brechungsindex

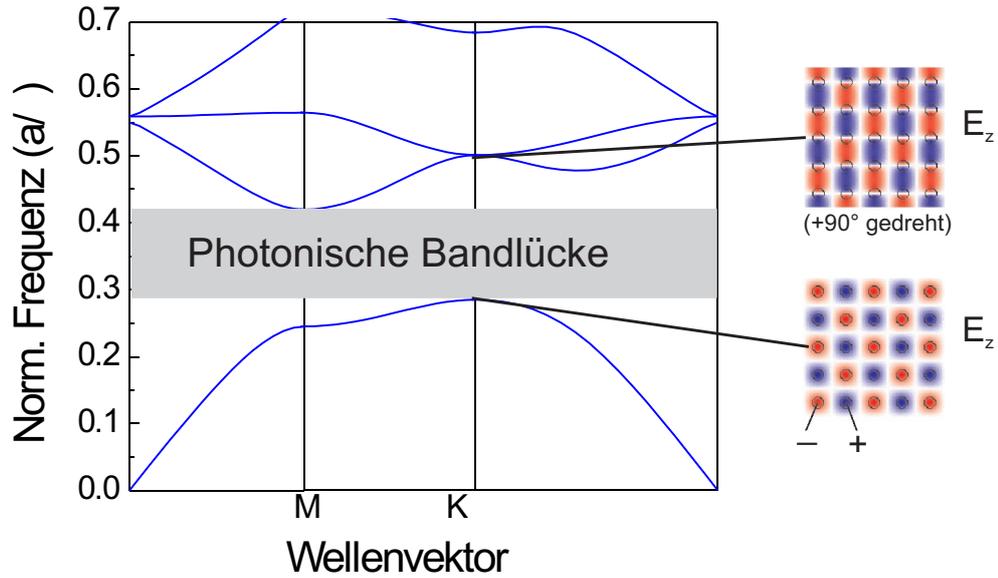


Abbildung 2.3: Verteilungen des E-Feldes im quadratischen zweidimensionalen photonischen Kristall aus Stäben (Bandstrukturrechnung R. Hillebrand).

dex, oberhalb der photonischen Bandlücke dagegen im Material mit niedrigem Brechungsindex. Deswegen wird das Band unterhalb der fundamentalen Bandlücke auch als dielektrisches Band bezeichnet, das Band oberhalb der Bandlücke als Luftband (analog zu elektronischen Systemen, Valenzband bzw. Leitungsband).[35, 73, 40]

2.3 Die Zustandsdichte im Photonischen Kristall

Ebenso wie bei vielen anderen Systemen ist auch beim photonischen Kristall die Zustandsdichte (density of states, DOS) von besonderer Bedeutung. Die Zustandsdichte ist definiert als

$$D(\omega) = \sum_n \int d\vec{k} \delta(\omega - \omega_n(\vec{k})). \tag{2.16}$$

Für ein Photonengas im freien Raum ergibt sich der Ausdruck

$$D_f(\omega) = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3}, \tag{2.17}$$

der proportional zu ω^2 , dem Quadrat Photonenfrequenz, ist. Im Gegensatz dazu ist die Zustandsdichte des freien Elektronengases proportional zu $\sqrt{\omega_e}$, wobei ω_e die Frequenz der Elektronen ist.

Die Zustandsdichte ist eindeutig durch die Dispersionsrelation gegeben. Ausgehend von einer vorhandenen Bandstruktur, lassen sich die Bänder entlang einer Kristallrichtung auf die Frequenzachse projizieren. Man erhält daraus die so genannte projizierte photonische Zustandsdichte (Abb.2.4). Sie stellt die Zustände dar, die für propagierende Wellen entlang dieser Kristallrichtung zugänglich sind.

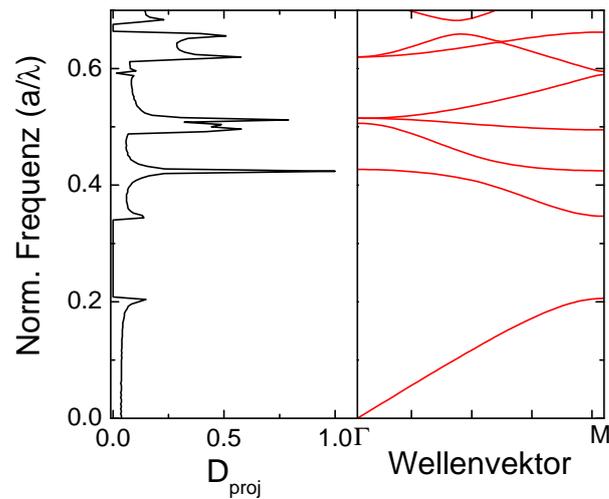


Abbildung 2.4: Projizierte Zustandsdichte eines zweidimensionalen hexagonalen photonischen Kristalls ($r/a = 0,36$; TM-Polarisation) (Bandstrukturrechnung R. Hillebrand).

Im Bereich der Bandlücke ist die Zustandsdichte gleich Null. Am Rand der Bandlücke hingegen sind sehr starke Überhöhungen der Zustandsdichte zu erkennen. Diese resultieren aus den flachen Bändern nahe der Bandlücke, da sich dort sehr viele Zustände im Frequenzintervall $\omega + d\omega$ befinden. Der Anstieg der Bänder entspricht der Gruppengeschwindigkeit c_g der Welle im Kristall

$$c_g = \frac{\partial \omega}{\partial k} = \frac{c}{n_{eff}}. \quad (2.18)$$

Das heißt, je dichter man einem Punkt mit Anstieg Null in der Bandstruktur kommt, umso langsamer propagiert die Welle im photonischen Kristall. Dies kann auch mit Hilfe eines effektiven Brechungsindex n_{eff} und der Lichtgeschwindigkeit im Vakuum c ausgedrückt werden.

2.4 Beispiele photonischer Kristallstrukturen

2.4.1 Eindimensionale photonische Kristalle

Das klassische Beispiel des (eindimensionalen) photonischen Kristalls ist der sogenannte „Bragg-Stack“. Dabei handelt es sich um eine Schichtstruktur dielektrischer Materialien mit unterschiedlichen Brechungsindizes (Abb. 2.5). Die Periodizität ist somit nur in einer Raumrichtung vorhanden. Die zugehörige Bandstruktur ist in Abbildung 2.5 dargestellt. Am Punkt $\frac{\pi}{a}$ wird die Dispersionsrelation in die 1. Brillouinzone zurückgefaltet. Ähnlich wie beim Modell fast freier Elektronen kommt es zu Bandverbiegungen und zur Entstehung von Bandlücken.

Trifft jetzt eine elektromagnetische Welle, deren Frequenz innerhalb der Bandlücke liegt, senk-

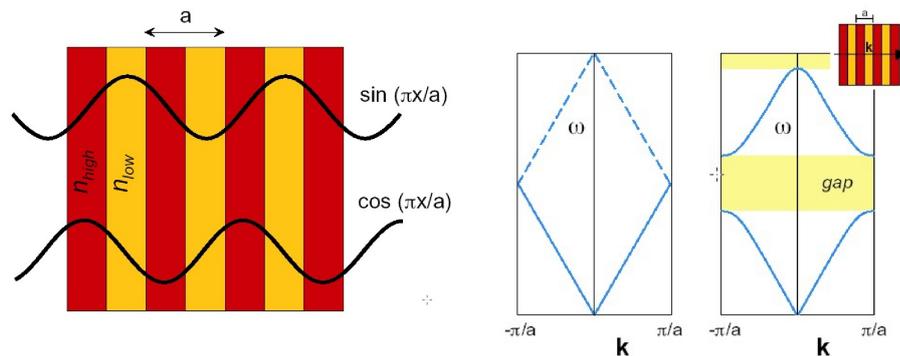


Abbildung 2.5: links: Stehende Wellen in einem Bragg-Stack; rechts: Zurückfaltung der Dispersionsrelation am Rand der 1. Brillouinzone und Ausbildung einer photonischen Bandlücke.[35]

recht auf die Oberfläche der Schichten, so wird sie total reflektiert. Die Ursache dafür ist die Bragg-Reflexion. Ist ein ganzzahliges Vielfaches der Wellenlänge gleich der doppelten Periodenlänge der Schichten, $m\lambda = 2a$, so kommt es für die reflektierte Welle zu einer konstruktiven Interferenz.

Für $\vec{k} = \pi/a$ bilden sich an den Bandkanten stehende Wellen mit $\lambda = 2a$ aus. Aufgrund der Kristallsymmetrie existieren zwei Möglichkeiten für stehende Wellen im Kristall. Die Schwingungsbäuche der Welle befinden sich entweder im Material mit hohem oder im Material mit niedrigem Brechungsindex. Dies entspricht den oben schon erwähnten Luft- bzw. dielektrischen Bändern. So läßt sich am einfachen eindimensionalen Beispiel anschaulich die Entstehung der photonischen Bandlücken erklären.

2.4.2 Zweidimensionale photonische Kristalle

Da sich diese Arbeit auf zweidimensionale (2D) Systeme photonischer Kristalle konzentriert, sollen Beispiele hier nur kurz angeführt und prinzipiell diskutiert werden. Eine detaillierte Betrachtung des hexagonalen 2D Kristalls erfolgt in Kapitel 5. Mit einer periodischen Brechungsindexvariation in einer Ebene (x-y-Ebene) läßt sich das Konzept der photonischen Kristalle auf zwei Dimensionen erweitern. In der verbleibenden dritten Raumrichtung (z-Richtung) liegt weiterhin ein homogenes dielektrisches Medium vor. Folglich muß ein idealer zweidimensionaler Kristall aus einer Anordnung unendlich langer Stäbe bzw. Poren bestehen. Abbildung 2.6 zeigt die Bandstruktur eines hexagonalen Gitters aus Luftporen in einem Dielektrikum. Zwischen dem ersten und zweiten Band (TE-Polarisation, rot) bildet sich eine Bandlücke (hellgrauer Bereich) aus.

Aufgrund der dielektrischen Homogenität entlang der Stäbe (Poren) sind jedoch zwei Polarisationsrichtungen für elektromagnetische Wellen in der Periodizitätsebene ($k_z = 0$) zu unterscheiden. Zum einen existieren transversal elektrische Moden (TE-Moden, E-Feld in der Periodizitätsebene) zum anderen transversal magnetische Moden (TM-Moden, H-Feld in der Periodizitätsebene). Wie in Abbildung 2.6 dargestellt, existiert eine komplette zweidimensionale Bandlücke (dunkelgrauer Bereich) also nur, wenn in einem bestimmten spektralen Bereich kein Zustand für alle Raumrichtungen **und** beide Polarisationsrichtungen existiert.

Elektromagnetische Wellen, deren Frequenz innerhalb der Bandlücke liegt, können dann nicht innerhalb der Periodizitätsebene propagieren. Sie werden beim Auftreffen auf den Kristall total reflektiert.

Betrachtet man jetzt Wellen, deren Ausbreitungsrichtung nicht in der x-y-Ebene liegt ($k_z \neq 0$), so kann man nicht mehr zwischen TE- und TM-Moden unterscheiden, da die beiden Polarisationsrichtungen mischen.

Einen besonderen Fall der 2D photonischen Kristalle stellen sogenannte „slab“-Strukturen dar

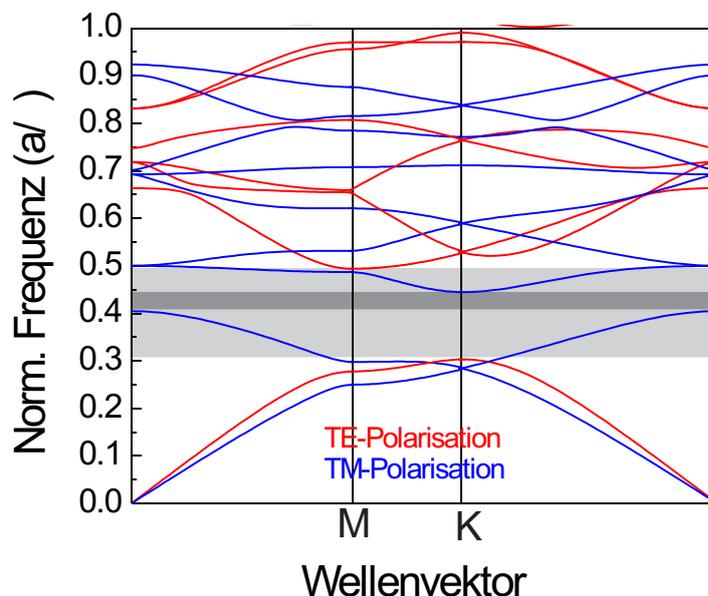


Abbildung 2.6: Bandstruktur eines zweidimensionalen hexagonalen Kristalls aus Luftporen in Silizium (hellgrau-Bandlücke für TE-Polarisation, dunkelgrau-(komplette) für TM-Polarisation [33].

(Abb. 2.7). Dabei handelt es sich um ein System mit sehr geringem Aspektverhältnis (~ 1). Das Aspektverhältnis ist definiert als Stab- bzw. Porenlänge zu Stab- bzw. Porendurchmesser. Es wurde theoretisch nachgewiesen, daß ein 2D photonischer Kristall erst ab einem Aspektverhältnis > 20 vorliegt [34]. Diese Strukturen bestehen im allgemeinen aus einer Dreischichtstruktur. Ähnlich wie bei einem Glasfaserkabel befindet sich eine Material mit hohem Brechungsindex (core) zwischen zwei Materialien mit geringem Brechungsindex (cladding). Zumindest die mittlere Schicht ist dabei mit einer periodischen Strukturierung versehen. Die Ausbreitung elektromagnetischer Wellen läßt sich so auf die x-y-Ebene beschränken, da es aufgrund des Brechungsindexkontrastes der Schichten zur internen Totalreflexion kommt. Es existieren gebundene Zustände unterhalb des Lichtkegels (Abb. 2.7), der durch die Bedingung $\omega = ck_{||}$ gegeben ist, wobei $k_{||}$ der Wellenvektor innerhalb der Periodizitätsebene ist. Oberhalb des Lichtkegels kann das Licht die „slab“-Struktur verlassen. Allerdings kann dieses System nicht mehr

mit einer zweidimensionalen Wellengleichung beschrieben werden. Ebenso ist eine Aufteilung in TE- und TM-Moden nicht mehr möglich.[39, 35, 73]

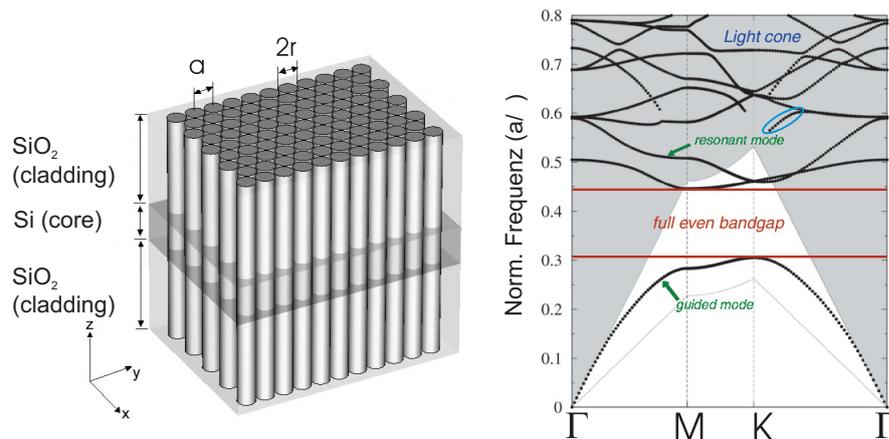


Abbildung 2.7: „slab“-Struktur eines hexagonalen zweidimensionalen Kristall, rechts: zugehörige Bandstruktur mit dem Lichtkegel („light cone“)(C.Jamois)

2.4.3 Dreidimensionale photonische Kristalle

Die Beeinflussung der Ausbreitung elektromagnetischer Wellen in allen drei Raumrichtungen ist von zentralem Interesse seit der Entwicklung des Konzeptes der photonischen Kristalle. Bei einer periodischen Variation des Brechungsindex entlang aller drei Raumachsen ist es für eine Lichtwelle nicht mehr möglich, wie in einem dielektrisch homogenen Medium ungestreut zu propagieren.

Dabei sind besonders Strukturen interessant, die eine vollständige Bandlücke in allen drei Raumrichtungen aufweisen, d.h. elektromagnetische Wellen innerhalb eines bestimmten spektralen Bereiches können im Kristall nicht ausgedehnt existieren.

Ein Lichtemitter mit einer bestimmten Frequenz ν innerhalb eines unendlichen dreidimensionalen photonischen Kristalls mit entsprechender Bandlücke kann im angeregten Zustand kein Licht emittieren, da die dabei ausgesandte Lichtwelle nicht im Kristall existieren kann [89]. Im Kapitel 3 wird dieses Gedankenexperiment detailliert diskutiert.

Eine der ersten dreidimensionalen Strukturen mit vollständiger Bandlücke, die auch experimentell realisierbar war, ist der sogenannte Yablonovite [90]. Dabei handelt es sich um Luftzylinder in einem Hochindexmaterial. Diese Zylinder werden unter einem Winkel von 120° relativ zueinander in das Material gebohrt. Auf diese Weise entsteht durch die Schnittpunkte der Zylinder eine Diamantstruktur. Eine Diamantstruktur hat eine vollständige photonische Bandlücke zwischen dem zweiten und dritten Band. Diese Bandlücke kann theoretisch eine Größe von bis zu 30 Prozent erreichen [29].

Zur Herstellung dreidimensionaler photonischer Kristallstrukturen werden unterschiedliche Methoden angewendet. So werden zum Beispiel Selbstorganisationsprozesse von Kugeln (aus Poly-methylmethacrylat bzw. SiO_2) genutzt, um künstliche Opalstrukturen herzustellen [11, 85]] (Abb.2.8 a). Andere Ansätze nutzen epitaktische Prozesse bzw. das Waferbonden zur Herstellung einer sogenannte Woodpilestruktur. Diese besteht aus parallelen dielektrischen Stäben, die schichtweise senkrecht zu einander orientiert sind, und so eine flächenzentrierte tetragonale bzw. kubische Struktur darstellen [21, 59] (Abb.2.8 b). Ebenso wird die Polymerisation durch die 2-Photonen-Absorption zum direkten Schreiben photonische Kristallstrukturen in Dielektrika genutzt [82].

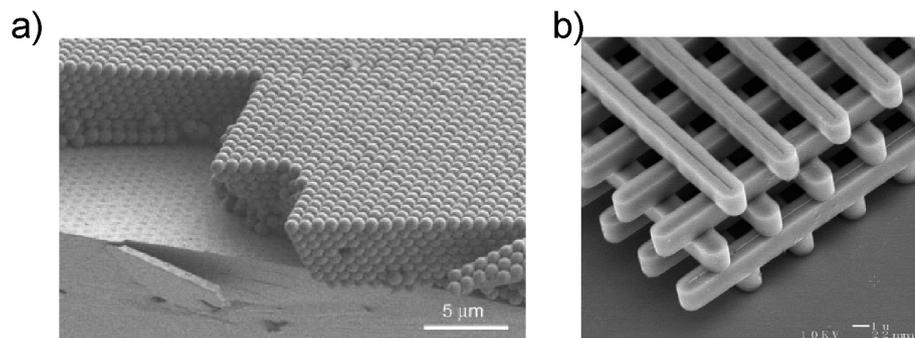


Abbildung 2.8: Dreidimensionale photonische Kristallstrukturen a) Opalstruktur [85]; b) Woodpilestruktur [21].

Alle diese Techniken befinden sich allerdings noch im experimentellen Stadium. Es treten noch Schwierigkeiten wie Stapelfehler, die fehlende Beeinflussung einzelner Elemente oder ein zu geringer Brechungsindexkontrast auf.

2.5 Defektstrukturen in photonischen Kristallen

2.5.1 Punktdefekte

Die Entstehung einer photonischen Bandlücke resultiert aus der Ausbildung von Bloch-Moden aufgrund der Translationssymmetrie des unendlichen Kristalls. Was aber geschieht, wenn man die Größe eines einzigen Elementes ändert ?

Abbildung 2.9 zeigt einen quadratischen zweidimensionalen Kristall aus Stäben, in dem der Durchmesser eines Stabes geändert wurde. Für einen kleineren Stabdurchmesser, d.h. weniger Hochindexmaterial (Luftdefekt), wird ein Zustand des dielektrischen Bandes in die Bandlücke geschoben. Im Vergleich zu einem Halbleiter würde dieser Zustand einem Akzeptorniveau entsprechen.

Umgekehrt führt ein größerer Stabdurchmesser (dielektrischer Defekt) zu einem Zustand in der Bandlücke, der aus dem Luftband stammt. Dies entspricht einem Donatorniveau im Halbleiter.

Variiert man die Defektgröße kontinuierlich, so läßt sich die Defektfrequenz innerhalb der Bandlücke verschieben. Während beim quantenmechanischen Model eines Teilchens im Potentialtopf eine minimale Tiefe des Topfes existiert, um einen gebundenen Zustand zu erzeugen, ist dies im photonischen Kristall nicht der Fall. Hier verursachen auch kleinste Strukturveränderungen eine Lokalisierung der Felder.

Streng genommen läßt sich der Begriff des Wellenvektor \vec{k} beim Entstehen eines Punktdefektes nicht mehr verwenden, da die Translationssymmetrie gebrochen wird.

Eine Welle mit der Defektfrequenz kann nur in der Nähe eines Punktdefektes existieren, da sie im photonischen Kristall nicht propagieren kann. Sie muß demzufolge um den Punktdefekt exponentiell abfallen. Die Welle ist somit am Punktdefekt lokalisiert.

Die Feldverteilungen der jeweiligen Defektzustände konzentrieren sich um den Defekt. Für den Luftdefekt bildet sich z.B. ein Monopolverteilung der z-Komponente des E-Feldes aus. Dabei konzentriert sich die Feldenergie, ähnlich wie beim dielektrischen Band, in den Stäben.

Für den dielektrischen Defekt ergibt sich eine Dipolverteilung, deren Feldenergie zwischen den Stäben konzentriert ist. Dieser Zustand ist zweifach entartet, d.h. es gibt zwei invariante Orientierungen der Feldverteilung im Kristall.

Die Feldverteilungen solcher lokalisierten Zustände orientieren sich dabei an der Symmetrie

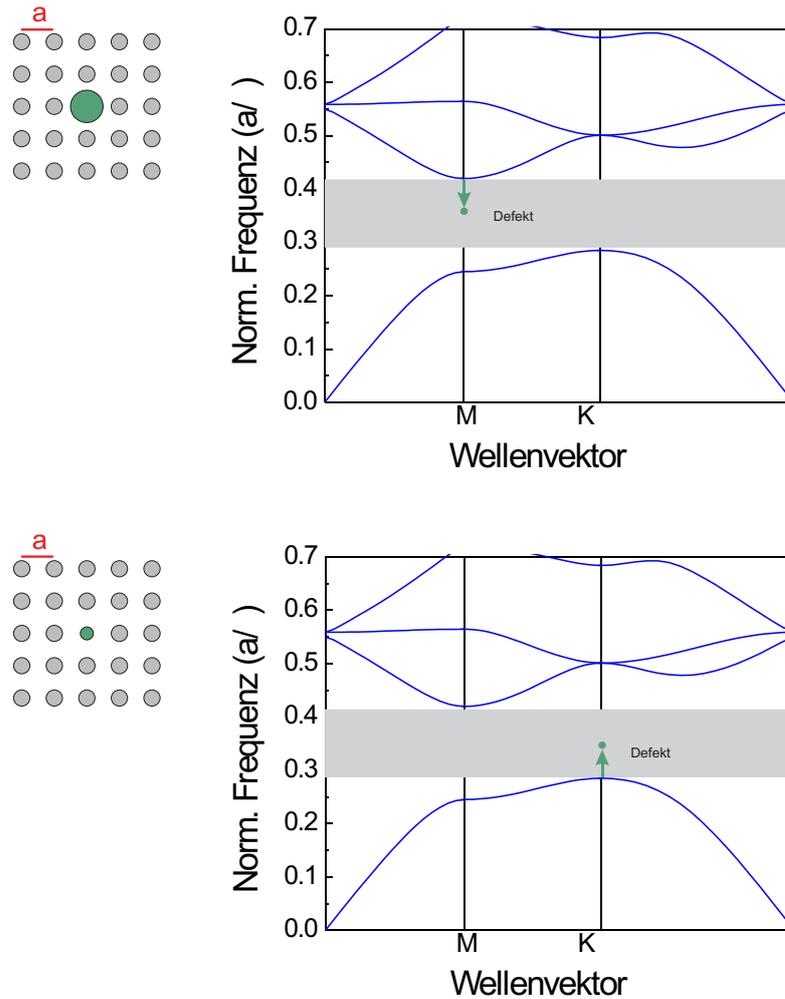


Abbildung 2.9: Punktdefekte in einem zweidimensionalen quadratischen Kristallgitter aus Stäben; oben vergrößerter Stabdurchmesser - Luftdefekt; unten kleinerer Stabdurchmesser - dielektrischer Defekt.

des photonischen Kristalls. Für ein quadratisches Gitter ergeben sich somit Monopol-, Dipol-, Quadrupolmoden usw.. Es ist allerdings zu beachten, daß diese Feldverteilungen nicht mit der Multipolentwicklung einer Ladungs- bzw. Stromverteilung verwechselt werden dürfen. Zur Beschreibung dieser lokalisierten Zustände sind die oben beschriebenen Blochwellen nicht (Gl. 2.13) optimal geeignet. Ähnlich wie beim Modell eng gebundener Elektronen nutzt man die sogenannten Wannier-Funktionen als Basissystem für die Entwicklung der Felder [15, 62].

2.5.2 Liniendefekte-Wellenleiterstrukturen

Eine andere Klasse von Defekten sind Liniendefekte, die sich entlang einer Kristallrichtung ausdehnen. Ordnet man Punktdefekte in einem photonischen Kristall in einer Reihe entlang einer Kristallrichtung an, erhält man einen solchen Liniendefekt. Die Translationssymmetrie entlang des Liniendefektes bleibt erhalten. Bei geeigneter Größe der Punktdefekte bildet sich ein Band innerhalb der Bandlücke aus (Abb.2.10). Eine Welle mit entsprechender Frequenz kann sich somit entlang des Liniendefektes ausbreiten. Senkrecht zum Defekt kann die Welle jedoch nicht propagieren, ihre Amplitude fällt exponentiell ab. Der Liniendefekt wirkt also als Wellenleiter (Abb. 2.10).

Während im konventionellen Wellenleiter das Licht durch Totalreflexion im Medium mit hohem Brechungsindex geführt wird, kann das Licht im photonischen Kristall auch im Material mit niedrigem Brechungsindex geleitet werden.

Mit Hilfe von Liniendefekten in photonischen Kristallen lassen sich verschiedene Strukturen realisieren. Strahlteiler [13], „Add-Drop“-Filter [1], Mach-Zehnder-Interferometer [58] und Superprismen [43, 4] sind nur einige Beispiele zur Anwendung von Liniendefekten.

Es existieren jedoch technologische Probleme, wie z.B. Verlustminimierung, Dispersionskompensation [30] oder Impedanzanpassung [13]. Gegenwärtig sind Wellenleiterstrukturen in photonischen Kristallen ein sehr intensiv untersuchtes und häufig kontrovers diskutiertes Thema. Deswegen sollen hier nur die Grundlagen beschrieben sein.

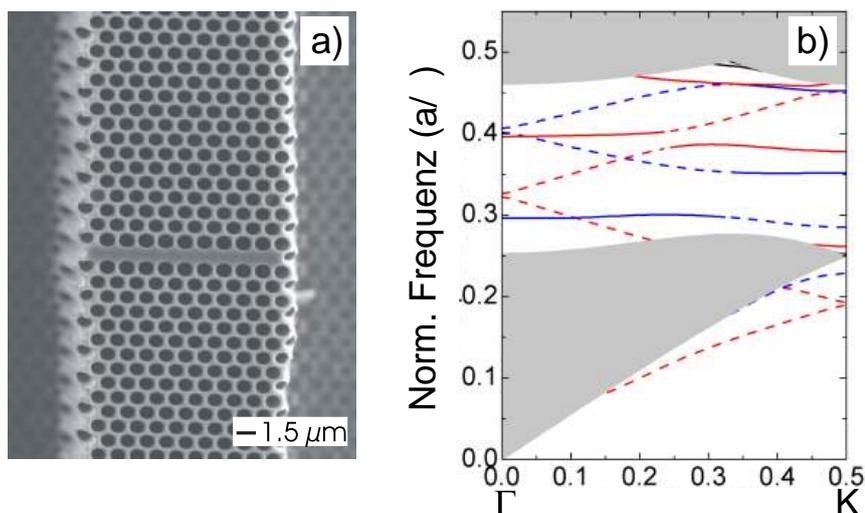


Abbildung 2.10: a) Liniendefekt in einem zweidimensionalen hexagonalen Kristall [9]; b) zugehörige projizierte Bandstruktur (C.Jamoi).

2.5.3 Defektstrukturen als Resonatoren

Aufgrund der Lokalisierung elektromagnetischer Wellen und somit der Feldenergie innerhalb von Defektstrukturen photonischer Kristalle sind diese, insbesondere für optische Frequenzen, als Kavitäten bzw. Mikroresonatoren interessant. Die Beschränkung auf die endliche Ausdehnung des Resonators führt zur Ausbildung stehender Wellen (Resonatormoden) mit diskreten Frequenzen.

Um die Güte einer Resonatormode hinsichtlich ihres Energieverlustes zu charakterisieren, definiert man den sogenannten Qualitätsfaktor (Q-Faktor)[91],

$$Q = \omega_0 \frac{\text{gespeicherte Feldenergie}}{\text{Energieverlust pro Sekunde}} = \omega_0 \frac{U}{P}. \quad (2.19)$$

ω_0 ist die Frequenz einer Resonatormode, die durch die Bedingung stehender Wellen innerhalb des Resonators vorgegeben sind.

Für die gespeicherte Energie ergibt sich damit ein exponentielles Abklingverhalten

$$P = \frac{dU}{dt} = -\frac{\omega_0}{Q}U \quad (2.20)$$

$$U(t) = U_0 e^{(-\omega_0 t/Q)}. \quad (2.21)$$

Für die Felder ergibt sich damit

$$E(t) = E_0 e^{-\frac{\omega_0 t}{2Q}} e^{-i(\omega_0 + d\omega)t}. \quad (2.22)$$

Dabei wird neben der Dämpfung auch eine mögliche Verschiebung der Resonanzfrequenz $d\omega$ berücksichtigt. Da eine solche gedämpfte Schwingung eine Überlagerung vieler Frequenzen darstellt, ist es sinnvoll eine Fouriertransformation durchzuführen,

$$E(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty E_0 e^{-\frac{\omega_0 t}{2Q}} e^{-i(\omega_0 + d\omega)t} dt. \quad (2.23)$$

Somit ergibt sich für die Energieverteilung

$$|E(\omega)|^2 \propto \frac{1}{(\omega - \omega_0 - d\omega)^2 + (\frac{\omega_0}{2Q})^2}. \quad (2.24)$$

Diese hat die Gestalt einer Resonanzkurve mit der Halbwertsbreite $\delta\omega = \omega_0/Q$. Die endliche Halbwertsbreite beschreibt reale Resonatoren, da eine unendlich scharfe Resonanzfrequenz experimentell nicht realisierbar ist.

Der Q-Faktor kann nun ausgedrückt werden als

$$Q = \frac{\omega_0}{\delta\omega}. \quad (2.25)$$

Sowohl die Resonanzfrequenz ω_0 als auch die Halbwertsbreite $\delta\omega$ sind spektroskopisch meßbare Größen. Somit läßt sich der Q-Faktor experimentell bestimmen.

Eine weitere wichtige Größe zur quantitativen Charakterisierung eines Resonators ist die Finesse F . Für einen konventionellen Fabry-Perot-Resonator ist sie definiert als

$$F = \frac{\Delta\omega}{\delta\omega} = Q \frac{\Delta\omega}{\omega}. \quad (2.26)$$

$\Delta\omega$ ist der Abstand zweier benachbarter Resonatormoden. Der sogenannte freie Spektralbereich eines Fabry-Perot-Resonators ist gegeben durch

$$\Delta\omega = \frac{\pi c}{nL}, \quad (2.27)$$

mit n als Brechungsindex des Resonatormediums und L als Resonatorlänge. Es wird also die spektrale Breite der Moden in Relation zu ihrem Abstand zueinander gesetzt. Die Finesse ist damit ein Maß für die spektrale Selektivität des Resonators.

Um nun Resonatoren unterschiedlicher Dimension miteinander zu vergleichen, ist es notwendig die Finesse mit Hilfe der spektralen Modendichte $\rho(\omega) = \omega dN/d\omega$ auszudrücken

$$F = \frac{Q}{\rho(\omega)}. \quad (2.28)$$

Für zwei- bzw. dreidimensionale Resonatoren ist sie gegeben durch [92]

$$\rho_{2D}(\omega) = \frac{A\omega^2}{2\pi n^2 c^2} \quad (2.29)$$

$$\rho_{3D}(\omega) = \frac{A\omega^3}{2\pi n^3 c^3}. \quad (2.30)$$

A bzw. V sind die Modenvolumina für zwei bzw. drei Dimensionen. Die Finesse läßt sich somit schreiben als

$$F_{2D} = \frac{Q\lambda^2}{2\pi n^2 A} \quad (2.31)$$

$$F_{3D} = \frac{Q\lambda^3}{2\pi n^3 V}. \quad (2.32)$$

Die Finesse hängt also lediglich vom Qualitätsfaktor und vom Modenvolumen ab. Demnach ist bei gleichem Qualitätsfaktor die spektrale Selektivität eines kleinen Resonators höher als die eines größeren.

Eine besondere Klasse der Resonatormoden sind die sogenannten „Whispering-Gallery“-Moden. Sie treten in kreis- bzw. kugelförmigen Resonatorgeometrien auf. Dabei bilden sich aufgrund einer kontinuierlichen internen Totalreflexion entlang des Kreisumfangs bzw. des Kugeläquators geschlossene Wellenzüge aus. Der Name ist auf ihre Entdeckung zurückzuführen. In der kreisförmigen Gallerie der St. Pauls Kathedrale in London konnte man das Flüstern einer Person an der gegenüberliegenden Seite hören. Durch die Anregung akustischer Eigenmoden werden Schallwellen entlang der Wand übertragen. Dieses Phänomen wurde bereits 1914 durch Lord Rayleigh beschrieben [67]. Ähnlich wie elektronische Wellenfunktionen von Atomen lassen sich die einzelnen Moden durch die Modenzahlen n , l und m beschreiben. Betrachtet man das

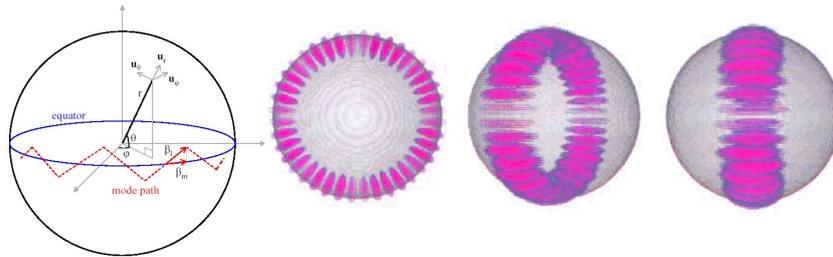


Abbildung 2.11: „Whispering-Gallery“-Moden in einem Kugelresonator, links sphärisches Koordinatensystem zur Definition der Modenzahlen, links: fundamentale Mode für $n=1$ und $m=1$.

Beispiel eines kugelförmigen Resonators in sphärischen Koordinaten (Abb. 2.11), so lassen sich, abhängig von der Anzahl der Feldmaxima, die Modenzahlen den jeweiligen Koordinatenrichtungen zuordnen. Die Modenzahl n entspricht dabei der Anzahl Maxima entlang des Radius. Der Wert von l ist durch die Anzahl der Wellenlängen festgelegt, die mit der optischen Länge des Äquators übereinstimmt. In polarer Richtung ist die Anzahl der Maxima gleich $l - m + 1$. Damit lassen sich die unterschiedlichen Resonatormoden entsprechend ihrer Modenzahlen klassifizieren.

Aufgrund der Auszeichnung der Äquatorialebene ist außerdem die Polarisation (transversal elektrisch TE, transversal magnetisch TM) zu berücksichtigen.

Zur mathematischen Beschreibung der Resonatormoden werden sphärische Bessel- und Hankelfunktionen sowie Legendre-Polynome benutzt.

„Whispering-Gallery“-Moden erreichen sehr hohe Q-Faktoren. Kugelresonatoren mit Durchmessern von 10 bis 1000 μm erzielen Werte von bis zu $8 \cdot 10^9$ [25, 84]. Der Q-Faktor ist dabei durch die Oberflächenrauigkeit und die Materialabsorption limitiert.

3. Strahlende Rekombination

3.1 Die Lichtemission

Die Emission bzw. Absorption eines Photons wird im Rahmen der Quantenmechanik mit Hilfe der zeitabhängigen Störungstheorie behandelt. Dabei geht man von einem Hamiltonoperator der Form $H(t) = H_0 + V(t)$ aus, wobei H_0 der ungestörte Hamiltonoperator ist, dessen Eigenfunktionen und Eigenwerte bekannt sind. $V(t)$ stellt eine zeitabhängige Störung des Systems dar. Zweckmäßigerweise entwickelt man die gesuchte Wellenfunktion des Systems nach den Eigenfunktionen u des ungestörten Operators H_0 ,

$$\Psi(r, t) = \sum_n C_n(t) \exp(-i\omega_n t) u_n(r). \quad (3.1)$$

Setzt man diesen Ansatz in die Schrödingergleichung ein, so erhält man eine Bewegungsgleichung für die Koeffizienten C_n .

$$\dot{C}_n(t) = -\frac{i}{\hbar} \sum_m \langle n | V | m \rangle C_{nm}(t) \exp(-i\omega_{nm} t). \quad (3.2)$$

Bei bekannter Anfangsbedingung $C_i(0)$ läßt sich diese Bewegungsgleichung iterativ lösen, für die erste Ordnung der Iteration ergibt sich somit,

$$\dot{C}_{fi}^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar} \langle f | V | i \rangle \exp(-i\omega_{fi} t). \quad (3.3)$$

Das Matrixelement $\langle f | V | i \rangle$ beschreibt die Wechselwirkung zwischen dem emittierenden (bzw. absorbierenden) System (mit den Eigenzuständen i und f) und einem äußeren Feld V . Für den Fall einer periodischen Störung, etwa eines monochromatischen elektromagnetischen Feldes, $V = V_0 \exp(\pm i\omega t)$ läßt sich Gleichung 3.3 exakt integrieren:

$$C_{fi}^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar} \langle f | V_0 | i \rangle \int_0^t \exp -i(\omega_{fi} \pm \omega)t dt. \quad (3.4)$$

bzw.

$$C_{fi}^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar} \langle f | V_0 | i \rangle \frac{\exp(-i\omega_{fi} \pm \omega)t - 1}{i(\omega_{fi} \pm \omega)t}. \quad (3.5)$$

Die Quadrate der Koeffizienten C_{fi} lassen sich als Übergangswahrscheinlichkeiten vom Zustand i in den Zustand f interpretieren, für die gilt $\sum_n |C_n|^2 = 1$.

$$W_{fi} = |C_{fi}^{(1)}|^2 = \frac{1}{\hbar^2} |\langle f | V_0 | i \rangle|^2 \frac{4 \sin^2[(\omega_{fi} \pm \omega)t/2]}{(\omega_{fi} \pm \omega)^2}. \quad (3.6)$$

Im Resonanzfall $\omega_{fi} = \omega$ ergibt sich im Nenner $\omega_{fi} - \omega = 0$, d.h. der Term für $(\omega_{fi} - \omega)$ ist wesentlich größer als für $(\omega_{fi} + \omega)$. Dies ist insbesondere für optische Frequenzen im THz-Bereich der Fall. Der Term für die Summe der Frequenzen wird daher vernachlässigt. Diese Näherung wird auch als „Rotating Wave Approximation“ bezeichnet. Bisher wurden nur diskrete Frequenzen ω_{fi} bzw. ω betrachtet. Dies ist jedoch nicht realistisch, da z.B. die Bandstruktur eines Festkörpers eine kontinuierliche Verteilung von Zuständen des Systems oder das Emissionsspektrum eines schwarzen Strahlers ein kontinuierliches elektromagnetisches Spektrum darstellt. Zu diesem Zweck ist es notwendig Gleichung 3.6 mit der Zustandsdichte $D(\omega_{fi})$ des Systems bzw. $D(\omega)$ des Feldes zu multiplizieren und über alle Frequenzen zu integrieren, woraus sich eine totale spektrale Übergangswahrscheinlichkeit ergibt:

$$P_T = \int D(\omega_{fi}) |C_{fi}^{(1)}|^2 d\omega_{fi} \quad \text{bzw.} \quad P_T = \int D(\omega) |C_{fi}^{(1)}|^2 d\omega. \quad (3.7)$$

In der semiklassischen Beschreibung nimmt man für das externe Feld den Ausdruck für einen elektrischen Dipol, der mit einem elektromagnetischen Feld wechselwirkt $V = -e\mathbf{r}\mathbf{E} = -\wp E_0 \cos\omega t$, an, so erhält man für die Übergangswahrscheinlichkeit

$$|C_{fi}^{(1)}|^2 = \frac{\wp E_0}{\hbar^2} \frac{4 \sin^2[(\omega_{fi} - \omega)t/2]}{(\omega_{fi} - \omega)^2}. \quad (3.8)$$

Dieser Ausdruck ist die Übergangswahrscheinlichkeit der stimulierten Emission bzw. Absorption, d.h. der Emission bzw. Absorption eines Photons durch ein 2-Niveau-System unter Einwirkung eines äußeren elektromagnetischen Feldes.

Eine bessere quantenmechanischen Beschreibung bietet der sogenannte Jaynes-Cummings-Hamiltonoperator

$$H = \frac{1}{2} \hbar \omega_{ab} \sigma_z + \hbar \omega a^\dagger a + \hbar (a + a^\dagger) (g \sigma_+ + g^* \sigma_-). \quad (3.9)$$

Der erste Term ist der Hamiltonoperator eines 2-Niveau-Systems. Der zweite Term ist das quantisierte elektromagnetische Feld, dargestellt durch einen harmonischen Oszillator mit den Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren a^\dagger und a sowie unter Vernachlässigung von dessen Nullpunktsenergie. Der letzte Term beschreibt die Wechselwirkung des 2-Niveau-Systems mit dem elektromagnetischen Feld, mit den Pauli Spin-flip Matrizen σ_+ und σ_- sowie dem elektrischen Dipolmatrixelement

$$g = -\frac{\wp E_\omega}{2\hbar} \sin Kz \quad \text{mit} \quad E_\omega = \sqrt{\frac{\hbar \omega}{\epsilon_0 V}}. \quad (3.10)$$

Multipliziert man in Gleichung 3.9 den Term für die Wechselwirkung aus, so erhält man 4 Paare der Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren mit den Pauli Spin-flip Matrizen. $a\sigma_+$ entspricht der Absorption eines Photons und der Anregung des Atoms vom niedrigen Zustand $|b\rangle$ in den höheren Zustand $|a\rangle$. Dagegen beschreibt $a^\dagger\sigma_-$ die Emission eines Photons sowie die Relaxation des Atoms. Die übrigen Paare $a\sigma_-$ und $a^\dagger\sigma_+$ lassen sich vernachlässigen. Betrachtet man die Zeitentwicklung der Operatoren stellt man fest, daß diese Operatorenkombinationen sehr klein im Vergleich zu den „resonanten“ Kombinationen werden. Diese Näherung entspricht der oben beschriebenen „Rotating Wave Approximation“, in diesem Fall jedoch für den Formalismus der 2. Quantisierung. Die Wechselwirkungsenergie koppelt nun die Zustände $|an\rangle$ und $|bn+1\rangle$

(dabei ist n die Quantenzahl des elektromagnetischen Feldes). Der Hamiltonoperator hat jetzt die Form

$$H = \frac{1}{2}\hbar\omega_{ab}\sigma_z + \hbar\omega a^\dagger a + \hbar g(a\sigma_+ + a^\dagger\sigma_-). \quad (3.11)$$

Mit Hilfe dieser quantenmechanischen Beschreibung unseres Systems läßt sich nun auch das Problem der spontanen Emission, d.h. der Relaxation eines angeregten Atoms unter Abwesenheit eines äußeren elektromagnetischen Feldes, behandeln. Sowohl für den semiklassischen Fall wie auch in der quantisierten Beschreibung ergibt sich ein oszillierendes Verhalten der Aufenthaltswahrscheinlichkeiten für den unteren und oberen Zustand des Atoms. Diese Oszillation erfolgt mit der sogenannten Rabi-Frequenz, für den semiklassischen Fall beträgt diese $R_0 = \wp E_0/\hbar$. Da sie proportional zur Feldamplitude E_0 , würde es ohne externes Feld nicht zu einer Emission und damit auch nicht zu einer Relaxation des angeregten Atoms kommen. Die quantisierte Formulierung liefert für die Rabi-Frequenz $R_0 = E_\omega\sqrt{n+1}$, welche sich für $n=0$ zu E_ω reduziert. Berechnet man jetzt für das Vakuumfeld den Erwartungswert der Feldamplitude erhält man

$$\langle E \rangle = E_\omega \langle 0 | a + a^\dagger | 0 \rangle = 0. \quad (3.12)$$

Der Erwartungswert für die Feldintensität hingegen verschwindet nicht,

$$\langle E^2 \rangle = E_\omega^2 \langle 0 | (a + a^\dagger)^2 | 0 \rangle = E_\omega^2. \quad (3.13)$$

Anhand von Gleichung 3.13 läßt sich veranschaulichen, daß Fluktuationen des Vakuumfeldes ein Atom, daß sich im angeregten Zustand befindet, relaxieren lassen und somit die spontane Emission verursachen. Eine spontane Absorption tritt hingegen nicht auf, da diese die Energieerhaltung verletzen würde.

Bisher haben sich die Betrachtungen auf das elektromagnetische Feld einer möglichen Mode beschränkt. Abschließend sei noch der allgemeinere Fall betrachtet, daß sich ein Atom in einer Umgebung mehrerer möglicher Moden des elektromagnetischen Feldes befindet. Zur Formulierung des Hamiltonoperators ist dazu über die Moden des elektromagnetischen Feldes zu summieren,

$$H = \hbar \sum_s \omega_s a_s^\dagger a_s + \hbar\omega_a \sigma_a + \hbar\omega_b \sigma_b + \hbar \sum_s (g_s a_s \sigma_+ + adj.). \quad (3.14)$$

Die Wechselwirkungsenergie koppelt dabei die Zustände $|a\{0\}\rangle$ und $|b\{1_s\}\rangle$ und führt damit zu dem allgemeinen Zustandsvektor

$$|\Psi(t)\rangle = C_{a0}(t) \exp(-i\omega_a t) |a0\rangle + \sum_s C_{b\{1_s\}}(t) \exp(-i(\omega_b + \omega_s)t) |b\{1_s\}\rangle. \quad (3.15)$$

Für den Koeffizienten $C_{a0}(t)$ des angeregten Zustandes erhält man folgende Bewegungsgleichung

$$\dot{C}_{a0}(t) = -\frac{\Gamma}{2} C_{a0}(t) \quad (3.16)$$

mit der spontanen Emissionszerfallsrate Γ

$$\Gamma = -\frac{\omega_{ab}^3 |\langle \mathcal{D} \rangle|^2}{3\pi\epsilon_0\hbar c^3}. \quad (3.17)$$

Dabei wurde ein Kontinuum der Moden des elektromagnetischen Feldes angenommen, wie es im freien Raum auftritt. Es kommt zu einer destruktiven Interferenz der einzelnen Wahrscheinlichkeitsamplituden des unteren Zustandes $|b\{1_s\}\rangle$ und einem exponentiellen Zerfall des angeregten Zustandes. Die Rabi-Oszillationen treten also nur in einer Umgebung mit diskreten Moden des elektromagnetischen Feldes auf. [57]

3.2 Der Purcell-Effekt

Die totale Übergangsrate eines emittierenden bzw. absorbierenden Systems hängt, wie in Gleichung 3.7 dargestellt

$$P_T = \int D(\omega) |C_{fi}^{(1)}|^2 d\omega \quad (3.18)$$

von der Zustandsdichte des umgebenden elektromagnetischen (photonischen) Feldes ab. Dies läßt sich sehr leicht anhand einer einfachen Abschätzung veranschaulichen. Die photonischen Zustandsdichte des freien Raumes ist gegeben durch

$$D_f(\omega) = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3}. \quad (3.19)$$

Geht man von einer Kavität mit einer einzelnen Mode aus, deren spektrale Breite $\Delta\omega$ beträgt, und die auf ein Volumen V_{cav} beschränkt ist, so läßt sich die photonische Zustandsdichte mit

$$D_{cav}(\omega) = \frac{1}{\Delta\omega V_{cav}} = \frac{Q}{\omega V_{cav}} \quad (3.20)$$

beschreiben. Dabei wurde angenommen, daß Emitter und Kavität in Resonanz sind und daß die spektrale Breite der Kavität größer ist als die des Emitters. Weiterhin wurde der Qualitätsfaktor $Q = \omega/\delta\omega$ (Gl. 2.25) eingesetzt. Das Verhältnis dieser beiden Zustandsdichten

$$\frac{D_{cav}(\omega)}{D_f(\omega)} = \frac{Q\pi^2 c^3}{\omega^3 V_{cav}} = f_P \quad (3.21)$$

gibt den sogenannten Purcell-Faktor [66] an, um den sich die totale Übergangsrate des Emitters innerhalb der Kavität gegenüber der Emission im freien Raum ändert. Daran läßt sich sehr leicht erkennen, daß z.B. zur Erhöhung der Übergangsrate entweder ein hoher Q-Faktor oder aber ein sehr kleines Modenvolumen benötigt werden. Diese einfache und keineswegs allgemeingültige Beschreibung hat gezeigt, daß die Emissionsrate nicht nur vom emittierenden System selbst, sondern auch von der Dichte der vorhandenen photonischen Zustände abhängt.

Eine Erhöhung der spontanen Emission wurde bereits anhand von photonischen Kristallen realisiert. Dazu wurden Resonatoren in Brack-Stacks [24] bzw. zweidimensionalen Strukturen [72]

erzeugt. Ebenso verursacht der Purcell-Effekt eine Unterdrückung der spontanen Emission mit dem Purcellfaktor

$$f_P = \frac{D_{PC}(\omega)}{D_f(\omega)} < 1, \quad (3.22)$$

da die Zustandsdichte innerhalb der photonischen Bandlücke des photonischen Kristalls kleiner ist (im perfekter Kristall =0) als die Zustandsdichte im freien Raum.

3.3 Die lokale Zustandsdichte

3.3.1 Die Bewegungsgleichung

Zum Abschluß des vorhergehenden Abschnittes wurde gezeigt, daß die Zustandsdichte (density of states, DOS) des photonischen Feldes eine Modifikation der Übergangsrates eines emittierenden Systems verursacht. Dabei wurde die DOS jedoch nur als Funktion der Frequenz angenommen. Geht man jedoch von einer dielektrisch inhomogenen Umgebung des Emitters, etwa einem Photonischen Kristall aus, so ist es notwendig, die DOS als Funktion der Position des Emitters sowie dessen Dipolmomentes anzunehmen. Der Zustandsvektor eines Emitters, beschrieben durch ein 2-Niveau-System, im photonischen Feld kann angegeben werden mit (Gl. 3.15),

$$|\Psi(t)\rangle = C_{a0}(\mathbf{d}, \mathbf{r}_0, t) |a0\rangle + \sum_s C_{b\{1_s\}}(\mathbf{d}, \mathbf{r}_0, t) \exp(-i(\omega_s - \omega_{ab})t) |b\{1_s\}\rangle, \quad (3.23)$$

Die Koeffizienten $C_i(\mathbf{d}, \mathbf{r}_0, t)$ des angeregten Zustandes und dem elektromagnetischen Vakuumzustandes bzw. des Grundzustandes mit einem Photon in der Mode s sind dabei vom Dipolmatrixelement \mathbf{d} des Emitterübergangs sowie der Position \mathbf{r}_0 des Emitters abhängig. Mit Hilfe der Schrödingergleichung und dem Hamiltonoperator aus Gleichung 3.11 erhält man die Bewegungsgleichungen für die Koeffizienten. Für den angeregten Zustand ergibt sich nach formaler Integration der Bewegungsgleichung des Grundzustandes eine Integrodifferentialgleichung

$$\dot{C}_{a0}(\mathbf{d}, \mathbf{r}_0, t) = - \int_0^t G(\mathbf{d}, \mathbf{r}_0, t - t') C_{a0}(\mathbf{d}, \mathbf{r}_0, t') dt'. \quad (3.24)$$

$G(\mathbf{d}, \mathbf{r}_0, t - t')$ ist die Greensche Funktion, die den Zustand zum Zeitpunkt t mit allen Zuständen des Systems zu vorherigen Zeitpunkten verknüpft. Sie wird deshalb auch als „Memory Kernel“ bezeichnet und ist definiert als

$$G(\mathbf{d}, \mathbf{r}_0, \tau) = \Theta(\tau) \sum_s |g_s(\mathbf{d}, \mathbf{r}_0)|^2 \exp(-i(\omega_s - \omega_{ab})\tau) \quad (3.25)$$

$$= \Theta(\tau) \alpha \sum_n \int_0^\infty d\omega \frac{\exp(-i(\omega - \omega_{ab})\tau)}{\omega} \quad (3.26)$$

$$\times \int_{1.BZ} d\mathbf{k} \delta(\omega - \omega_{n,\mathbf{k}}) |\mathbf{d} \cdot \mathbf{E}_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}_0)|^2 \quad (3.27)$$

Die Einführung der Stufenfunktion $\Theta(\tau)$ geschieht aus Kausalitätsgründen. Weiterhin wurden die Beiträge der Bänder und Wellenvektoren (Integration über die Frequenzen sowie die 1.

Brillouinzone), wie sie in einem photonischen Kristall existieren, explizit einbezogen. Zu diesem Zweck wurde die Deltafunktion der Frequenzen eingeführt, welche den Wert von G nicht ändert. Ein wesentliches Merkmal dieser Greenschen Funktion ist das Fehlen einer konventionellen Zustandsdichte der Form

$$D(\omega) = \sum_n \int_{1.BZ} d\mathbf{k} \delta(\omega - \omega_{n,\mathbf{k}}). \quad (3.28)$$

Die Definition einer solchen Zustandsdichte würde die Berücksichtigung unterschiedlicher Dipolorientierungen relativ zur elektromagnetischen Feldmode sowie den lokalen Beitrag einer Mode am Ort \mathbf{r}_0 nicht ermöglichen. Deswegen ist es notwendig eine projizierte lokale Zustandsdichte zu definieren,

$$D_L(\mathbf{r}, \omega) = \frac{1}{3} \sum_n \int_{1.BZ} d\mathbf{k} \delta(\omega - \omega_{n,\mathbf{k}}) |\mathbf{d} \cdot \mathbf{E}_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}_0)|^2. \quad (3.29)$$

Diese lokale Zustandsdichte (LDOS) ermöglicht jetzt die korrekte Beschreibung eines Ensembles von Emittlern mit dem Dipolmoment \mathbf{d} am Ort \vec{r} in einem photonischen Kristall. Dabei wurde außerdem eine Mittelung über das winkelabhängige Dipolmoment durchgeführt, welche einen Faktor $1/3$ liefert.

Die LDOS ist mit der konventionellen (totalen) Zustandsdichte verknüpft durch

$$D(\omega) = \int_{WSZ} d\mathbf{r} \varepsilon(\mathbf{r}) D_L(\mathbf{r}, \omega). \quad (3.30)$$

Dabei ist $\varepsilon(\mathbf{r})$ die ortsabhängige dielektrische Funktion des photonischen Kristalls. Die Integration läuft dabei über die Wigner-Seitz-Zelle (WSZ) des photonischen Kristalls. [83, 65]

Innerhalb der vollständigen Bandlücke eines dreidimensionalen photonischen Kristalles ist die LDOS gleich Null. Für einen angeregten Emitter, dessen Frequenz sich innerhalb der Bandlücke befindet, ist somit eine Relaxation nicht möglich. Eine spontane Emission aufgrund von elektromagnetischen Vakuumzuständen ist nicht möglich, da diese innerhalb des photonischen Kristalls nicht existieren. Dieses Gedankenexperiment läßt sich natürlich nur anhand eines idealisierten photonischen Kristall durchführen, und wurde erstmals 1987 von E. Yablonovitch beschrieben [89].

Im realen Experiment würde man eine Verlängerung der Lumineszenzlebensdauer des Emitters messen.

3.3.2 Die lokale Zustandsdichte von Resonatoren - Kopplungsregime

Im Gegensatz zum Gedankenexperiment des vorangegangenen Abschnittes, beschränken Resonatoren die LDOS auf wenige diskrete Moden.

Zur Beschreibung eines Emitters im Resonator ist es notwendig, die möglichen Mechanismen für ein Photon zu kennen. Diese lassen sich am Beispiel eines einfachen Fabry-Perot-Resonators veranschaulichen. Neben den Photonen, die in die Resonatormoden emittiert werden, sind insbesondere dabei Verlustmechanismen der Kavität zu betrachten. Zum einen kann der Emitter an das elektromagnetische Kontinuum des freien Raumes koppeln (Verlustrate Γ offener Resonator). Zum anderen ist es möglich, daß emittierte Photonen aufgrund von Verlusten der Spiegel an die Umgebung abgegeben werden (Verlustrate κ).

Betrachtet man nun die Kopplung (Kopplungskonstante g (Gl. 3.11)) von Emitter und Resonator, muß man zwei Fälle unterscheiden.

Im ersten Fall koppeln Emitter und Resonator nur schwach, d.h. die Verlustmechanismen überwiegen die Kopplung, $\Gamma, \kappa \gg g$. Für den angeregten Zustand des Emitters bedeutet das einen exponentiellen Zerfall mit einer Rate $\Gamma_0 = \Gamma + \Gamma_{Cavity}$ (Abb. 3.1).

Die Greensche Funktion (Gl. 3.25) läßt sich

$$G \propto \int_0^t d\tau D_L(\mathbf{r}, \omega) * \delta(t - \tau) \quad (3.31)$$

schreiben. In einem solchen Kopplungsregime ist das zukünftige Verhalten des Systems also nur durch den gewärtigen Zustand bestimmt.

Koppeln Emitter und Resonator jedoch stark ($g \gg \Gamma, \kappa$), so ergibt sich für die Greensche Funktion ein Ausdruck

$$G \propto \frac{\exp(-\omega_{ab}(t - \tau))}{(t - \tau)^{3/2}}. \quad (3.32)$$

Das bedeutet, das zukünftige Verhalten des Systems ist durch alle vorangegangenen Zeitpunkte bestimmt. Diese starke Kopplung verursacht nun ein langsam abklingendes, oszillierendes Verhalten des angeregten Emitterszustandes (Abb. 3.1). Diese Oszillation entsprechen den in Kapitel 3.1 erwähnten Rabi-Oszillationen bei der Wechselwirkung eines Emitters mit den diskreten Resonatormoden. Außerdem kommt es aufgrund der starken Kopplung zu einer Aufspaltung der Energieniveaus (Rabi-Splitting) des Emitters, da beide Systeme (diskrete Resonatormoden und Emitter) nicht mehr durch unabhängige Eigenfunktionen beschrieben werden können ("dressed states").[57]

Wie in diesem Kapitel beschrieben, ist die Lichtemission in starkem Maße von der Zustandsdichte des elektromagnetischen Feldes abhängig. Durch den Einfluß der Zustandsdichte $D(\nu)$ auf die Emissionrate ändert sich nicht nur das zeitliche Verhalten eines Emitters, sondern auch das emittierte Spektrum. So läßt sich eine spektral selektive Verstärkung bzw. Abschwächung der Emission erreichen (Purcell-Effekt). Im Extremfall einer Zustandsdichte identisch Null wird jegliche Emission unterdrückt.

Insbesondere im Bezug auf photonische Kristalle ist die Modifikation der Emission abhängig von der Position des Emitters im Kristall. Zur Beschreibung eines Emitters innerhalb eines photonischen Kristalls hat sich die lokale Zustandsdichte als entscheidende Größe erwiesen. Durch sie wird positionsabhängig die Kopplung eines Emitters an die Zustände des ihn umgebenden elektromagnetischen Feldes vorgegeben. So läßt sich z.B. die Position eines Emitters in einem Resonator berechnen, um eine möglichst effiziente Kopplung an die Resonatormoden zu erreichen.

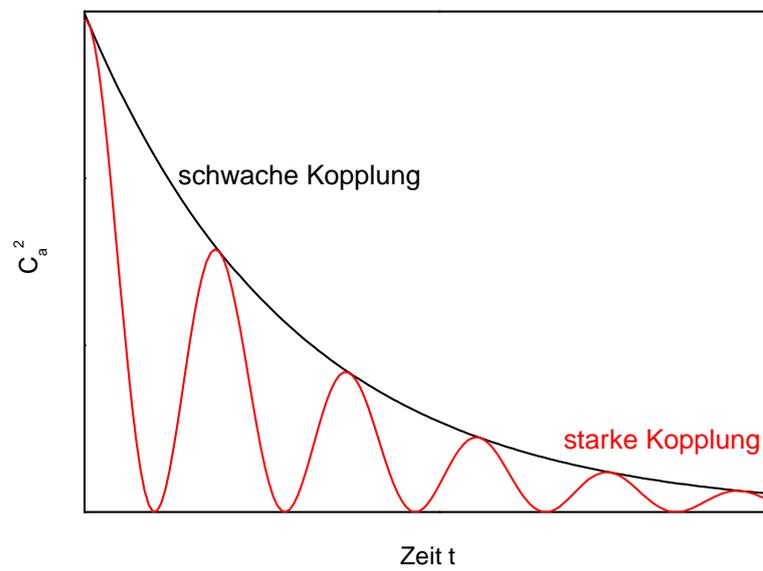


Abbildung 3.1: Zeitliches Verhalten des angeregten Zustandes eines Emitters bei starker bzw. schwacher Kopplung mit einem Resonator

4. HgTe-Quantenpunkt-Emitter

Die Lichtemission innerhalb eines photonischen Kristalls ist von besonderem Interesse, da die Emission durch die photonische Bandstruktur modifiziert, im Extremfall sogar vollständig unterdrückt wird [89].

Um eine solche Modifikation zu untersuchen, ist es notwendig interne Emitter im Kristall zu realisieren, die einen spektralen Überlapp mit der photonischen Bandlücke besitzen. Des Weiteren ist es notwendig, daß die Emitter an die Feldverteilung im Kristall koppeln können, d.h. sie müssen dort positioniert werden, wo die lokale Zustandsdichte signifikante Werte besitzt.

Im eindimensionalen Fall existieren bereits industriell gefertigte Anwendung, wie die Vertical Cavity Enhanced LED bzw. der Vertical Cavity Surface Emitting Laser (VCSEL). Beide nutzen eine Fabry-Perot-Resonatorgeometrie mit Bragg-Spiegeln zur Modenselektion von spontaner bzw. stimulierter Emission.

Im zweidimensionalen Fall wurden z.B. Resonatorgeometrien in photonischen Kristall mittels Plasmaätzen von epitaktisch gewachsenen Heterostrukturen hergestellt [46, 12, 61, 48, 52]. Diese Heterostrukturen basieren auf dem InGaAs-Materialsystem enthalten lichtemittierende Elemente, wie Quantenfilme oder Quantenpunkte. Aufgrund der direkten strahlenden Rekombination läßt sich eine Lichtemission sowohl mit optischer als auch mit elektrischer Anregung erzeugen. Die zweidimensionalen photonischen Kristalle dieser Strukturen besitzen ein sehr geringes Aspektverhältnis. Der Vorteil liegt im lateralen und vertikalen Confinement der Resonatormoden, so daß Q-Faktoren von mehreren 10000 erreicht werden können. Allerdings existiert die Bandstruktur dadurch nur unterhalb des Lichtkegels, was die Realisierung eines zweidimensionalen photonischen Kristalls einschränkt.

Zum Einbringen von Lichtemittern in dreidimensionale photonische Kristalle existieren verschiedene Methoden, von denen hier nur einige als Beispiel angeführt sein sollen.

Zum Beispiel wurde ErCl_3 in eine epitaktisch hergestellte Woodpile-Struktur infiltriert. Bei einer anschließenden Temperung werden die, für die Lichtemission notwendigen, Er^{3+} -Komplexe gebildet [18, 19].

Als Lichtemitter eignen sich ebenfalls Laserdye-Farbstoffe. Diese wurden bereits in Opalstrukturen bzw. invertierte Opalstrukturen infiltriert [56, 76, 41, 42]. Laserdyes emittieren jedoch vorwiegend im sichtbaren Bereich (300 nm - 1500 nm) und nur in Lösung effizient.

Ein weiterer Emitter, der bereits Anwendung in photonischen Kristallen fand, sind CdTe-Quantenpunkt-Kolloide. Diese wurden in invertierte Opalstrukturen aus TiO_2 infiltriert [80]. Die Emission der CdTe-Quantenpunkte bei 520 nm überlappt mit der photonischen Bandlücke der Opalstrukturen.

4.1 Herstellung und optische Eigenschaften

Für einen photonischen Kristall aus makroporösem Silizium benötigt man Emitter im nahen Infrarot mit einer Emissionswellenlänge größer als 1100 nm. Für ein hexagonales Gitter mit einer Gitterkonstante von 500 nm bzw. 700 nm befindet sich die fundamentale Bandlücke im Bereich dieser Emission. Ein System, daß sich als Emitter für diesen Kristall eignet, sind CdHgTe-

Nanokristall-Kolloide, da sich mit einer Variation der Zusammensetzung die spektrale Lage der Emission einstellen läßt (Abb. 4.1). Die ternäre Mischung $\text{Cd}_{1-x}\text{Hg}_x\text{Te}$ wird zum Beispiel für Detektoren im langwelligen Infrarot eingesetzt.

Wie aus Abbildung 4.1 ersichtlich, eignen sich HgTe-Nanokristalle als Emitter im Spektralbe-

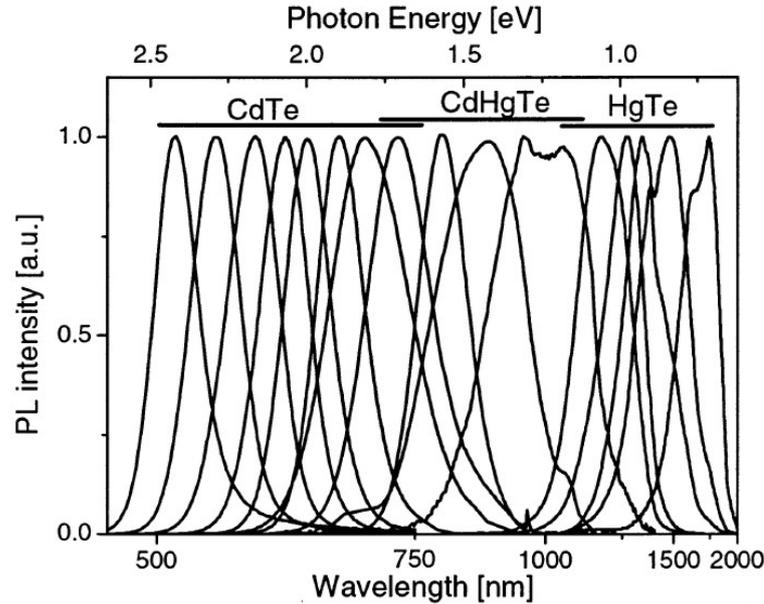


Abbildung 4.1: Variation der Emissionswellenlänge von CdHgTe-Nanokristallen in Abhängigkeit von der Zusammensetzung [23].

reich der fundamentalen Bandlücke der zweidimensionalen photonischen Kristalle aus makroporösem Silizium.

Die Synthese einer wässrigen HgTe-Nanokristall-Suspension geschieht folgendermaßen: Eine N_2 -gesättigte, wässrige Lösung von $\text{Hg}(\text{II})\text{Cl}_4$ (pH-Wert 11,2) wird von einem TeH_2/N_2 -Gemisch durchströmt. Dabei wirkt 1-Thioglycerin als Stabilisator und dient ebenfalls zur Größenkontrolle der Nanokristalle. Die entstandenen HgTe-Nanokristalle werden mit 2-Propanol ausgefällt, mit Thioglycerin oberflächenpassiviert und anschließend wieder in Suspension gebracht [69, 68]. Aus dieser Lösung ist nun wiederum ein Transfer in eine organische Suspension (z.B. Toluol) möglich [23]. Da es beim Herstellungsprozeß keine bevorzugte Kristallrichtung gibt, lassen sich die entstandenen Nanokristalle mit einer facettierten Kugelform beschreiben.

Anhand von TEM-Untersuchungen und Röntgen-Beugung konnte die kristalline Struktur des HgTe nachgewiesen und die Größe der Nanokristalle bestimmt werden [68]. Abbildung 4.2a zeigt hochaufgelöste TEM-Aufnahmen eines Clusters von HgTe-Nanokristallen und eines einzelnen HgTe-Nanokristalls. Die Größe der Nanokristalle variiert zwischen 3 nm und 6 nm, die mittlere Kristallitgröße beträgt 3,5 nm [68].

Als Volumenkristall gehört HgTe zu den Halbmetallen mit einer elektronischen Bandlücke von -0.302 eV bei 4,4 K bzw. -0,15 eV bei 300 K (Γ -Punkt) [14]. Bei den Nanokristallen hingegen beträgt die effektive Bandlücke ca. 0,8 eV, da es, aufgrund des Quanten-Confinement-Effektes, zu einer Diskretisierung und Verschiebung der Zustände zu höheren Energien kommt. Der Quanten-Confinement-Effekt tritt auf, wenn die Strukturgröße kleiner wird als die De-Broglie-Wellenlänge der Elektronen. Er entspricht dem quantenmechanischen Modell eines Potentialtopfes mit einer Breite $2R$. Die Verschiebung der Bandlücke in Abhängigkeit vom Radius der Nanokristalle wurde für CdTe-Nanokristalle abgeschätzt mit [53]

$$\Delta E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2\mu R} - \frac{1,786e^2}{\epsilon R} + 0,752E_{Ryd}. \quad (4.1)$$

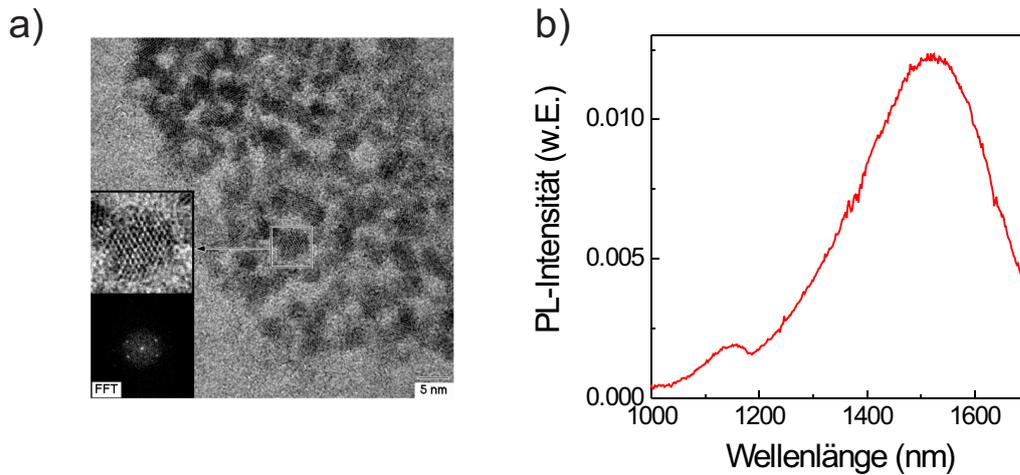


Abbildung 4.2: a) Hochaufgelöste TEM-Aufnahme eines HgTe-Nanokristall-Clusters und eines einzelnen HgTe-Nanokristalls [68]; Photolumineszenzspektrum von HgTe-Quantenpunkten auf einem Silizium-Substrat.

Dabei ist μ die reduzierte effektive Masse von Elektron und Loch, und E_{Ryd} ist die Rydberenergie der Exzitonen.

Die Nanokristalle stellen somit Quantenpunkte dar, da eine räumliche Einschränkung der Ladungsträger in allen 3 Dimensionen vorliegt. Aufgrund der Endlichkeit der nun vorliegenden Nanokristalle existieren nun keine Bänder mehr, sondern nur noch diskrete Energieniveaus. Dadurch wird eine direkte strahlende Rekombination angeregter Ladungsträger möglich. Diese führt zu einer sehr effizienten Emission der HgTe-Nanopunkte (Abb. 4.2b). Die HgTe-Lumineszenz unterlag bei früheren Entwicklungsstufen der Nanokristalle einer Rotverschiebung und einem Intensitätsverlust, da es zu einer Bildung von Clustern kam [69, 27]. Dies ist jedoch bei dem aktuellen Entwicklungsstand der HgTe-Nanokristalle nicht mehr der Fall. Die große spektrale Breite der Lumineszenz (Halbwertsbreite ca. 0,16 eV) ist auf die Größenverteilung der Nanokristalle zurückzuführen. In Abhängigkeit von der Kristallitgröße ergeben sich unterschiedliche elektronische Bandlücken (Gl.4.1), was zu einer Verbreiterung des Lumineszenzsignales führt. Das Lumineszenzsignal bei 1150 nm entspricht der Si-Bandkanten-Lumineszenz. Obwohl Silizium ein indirekter Halbleiter ist und damit die Übergangswahrscheinlichkeit sehr gering ist, ist ein signifikantes Signal zu erkennen. Die Ursache dafür ist die sehr geringe Defektkonzentration des FZ (float zone)-Siliziums, daß sehr wenige nichtstrahlende Rekombinationskanäle bietet.

5. Makroporöses Silizium - ein Modell für photonische Kristalle

Zur Realisierung eines zweidimensionalen photonischen Kristalles ist es notwendig eine periodische Anordnung dielektrischer Stäbe bzw. Luftporen in einem dielektrischen Material zu erzeugen, deren Länge groß im Vergleich zum Durchmesser ist .

Silizium bietet sich aufgrund seiner vielseitigen Prozessierbarkeit zur Erzeugung solcher Strukturen im optischen Spektralbereich an. Der Brechungsindex energetisch unterhalb der elektronischen Absorptionsbandkante beträgt $n=3,4$ und ermöglicht damit einen hohen Indexkontrast (3,4:1) gegenüber Luft. In diesem Kapitel sollen die optischen Eigenschaften sowie die Herstellung eines zweidimensionalen, hexagonalen photonischen Kristalls aus makroporösem Silizium beschrieben werden.

5.1 Die Herstellung

Die Herstellung eines hexagonalen zweidimensionalen photonischen Kristalls erfordert ausgedehnte geordnete Porenfelder in Silizium. Dies ist mittels eines photoelektrochemischen Ätzprozesses möglich [50, 49]. Die Eigenschaft eines Modellsystems für zweidimensionale photonische Kristalle wurde ebenfalls bereits demonstriert [26, 10, 74]. Der Herstellungsprozeß soll im folgenden beschrieben werden.

5.1.1 Der elektrochemische Ätzprozeß

Der Ätzprozeß basiert auf dem elektrochemischen Verhalten von Silizium in Flußsäure (HF). Dabei kommt es zur Auflösung des Siliziums unter Bildung eines $[SiF_6]^{2-}$ Komplexes. Hierfür ist allerdings die Existenz von Löchern (Defektelektronen) an der Si/HF-Grenzfläche notwendig. Ein Loch führt durch den Bruch einer Bindung zur Ionisation eines Oberflächenatoms des Siliziums. Das aktivierte Siliziumoberflächenatom gibt drei weitere Elektronen ab und bildet einen $[SiF_6]^{2-}$ Komplex. Die Reaktionsgleichung für diesen Prozeß lautet



Legt man zwischen Silizium und HF eine Spannung an, so können sich bei geeignetem Stromspannungsregime Makroporen im Silizium bilden [16]. Der prinzipielle Aufbau für den Ätzprozeß ist in Abbildung 5.1 dargestellt. Der Wafer (100-Orientierung) wird mit der HF in Kontakt gebracht. Der positive Pol einer Spannungsquelle wird an das Silizium (Anode) angelegt. Als Kathode dient ein Platindraht in der HF.

Die, in dieser Arbeit verwendeten Strukturen, wurden aus n-dotiertem Silizium hergestellt,

d.h. die Löcher sind Minoritätsladungsträger. Die für den Ätzprozeß benötigten Löcher werden durch rückseitige Beleuchtung des Siliziums generiert. Diese diffundieren durch den Wafer und gelangen zur gegenüberliegenden Ätzfront.

Die entstandene Raumladungszone folgt den Porenspitzen (Abb.5.1)[94, 77]. Die Löcher wer-

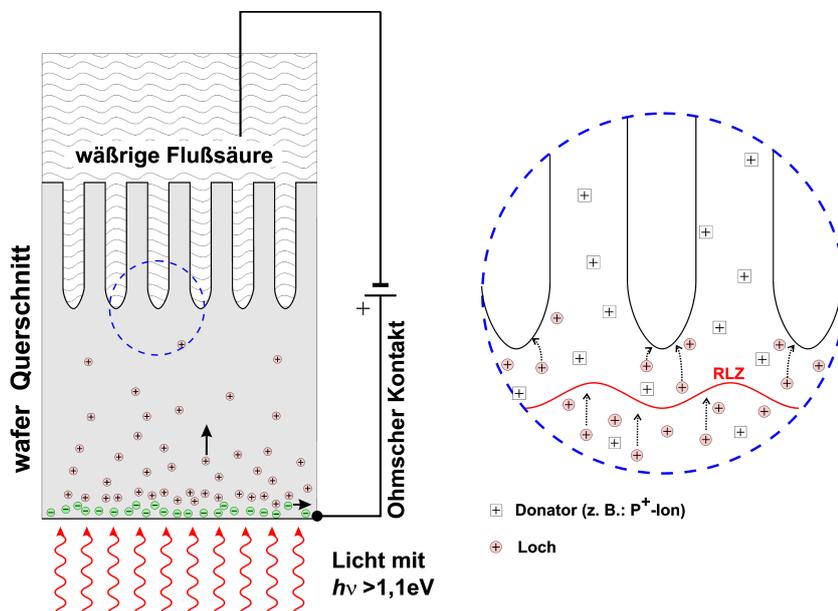


Abbildung 5.1: Schematische Darstellung des elektrochemischen Ätzprozesses zur Herstellung von makroporösem Silizium [9].

den durch die senkrecht auf den Porenoberflächen stehenden elektrischen Feldlinien auf die Spitzen der Poren fokussiert. Durch die Überlappung der Raumladungszonen benachbarter Poren gelangen keine Löcher mehr an die Porenwände. Die Wände sind damit gegen Auflösung geschützt und die Pore kann nur noch an der Spitze geätzt werden. Es kommt somit zu einem Tiefenwachstum der Pore in (100)-Richtung.

Die Porösität ist definiert als Verhältnis zwischen der Querschnittsfläche aller Poren und der Gesamtfläche, $p = \frac{A_{Poren}}{A}$. Da die Querschnittsfläche der Poren gegeben ist durch $A_{Poren} = \frac{I}{j_{Pore}}$, I ist der gesamte fließende Strom und j_{Pore} die Stromdichte entlang der Porenwachstumsrichtung. Mit $A = \frac{I}{j}$ läßt sich die Porösität als Verhältnis der Stromdichten schreiben

$$p = \frac{j}{j_{Pore}}. \quad (5.2)$$

Die Stromdichte j_{Pore} ist abhängig von der Temperatur und der Konzentration der Flußsäure. Damit läßt sich die Ätzgeschwindigkeit mit Hilfe dieser Parameter beeinflussen. Die Porösität hingegen wird für n-dotiertes Silizium durch die Beleuchtungsstärke und damit durch die Anzahl der zur Verfügung stehenden Löcher reguliert.

Während des Wachstumsprozesses der Makroporen kommt es zunächst zu einer willkürlichen Bildung kleinerer Makroporen. Einige dieser Poren werden im weiteren Verlauf aufhören zu wachsen, während andere Poren sich vergrößern. Dieser Prozeß führt zu einer stabilen Konfiguration. Diese ist zum einen durch die Porösität (Gl. 5.2) gegeben. Zum anderen muß die mittlere Wandstärke zweier benachbarter Poren der doppelten Breite der Raumladungszone entsprechen.

Dieser Selbstorganisationsprozeß erreicht jedoch nicht die langreichweitige Ordnung, die für einen photonischen Kristall notwendig ist.

5.1.2 Geordnete Makroporen

Um eine langreichweitige Ordnung der Makroporen zu erreichen, müssen gezielt Nukleationspunkte an der Siliziumoberfläche gesetzt werden. Dazu wird zunächst eine dünne thermische Oxidschicht auf dem Silizium erzeugt. Das Porengitter wird mittels Photolithographie definiert und das Oxid an den Nukleationspunkten weggeätzt. Der folgende KOH- (Kaliumhydroxid) Ätzschritt erzeugt pyramidenförmige Gruben auf der Oberfläche. An diesen Stellen werden während des elektrochemischen Ätzens die Poren wachsen.

Die Dotierung des Siliziums hängt dabei vom gewünschten Abstand der Poren ab. Porenmuster und -abstand werden durch die Lithographie vorgegeben und sind relativ frei wählbar.

Mit diesem Ätzprozeß lassen sich hochgeordnete Porenfelder erzeugen. Das Aspektverhältnis (Porendurchmesser zu Porenlänge) beträgt dabei 100 bis 300. Diese Eigenschaften ermöglichen die Realisierung eines ausgedehnten, zweidimensionalen photonischen Kristalls im nahen infraroten Wellenlängenbereich [75].

5.1.3 Die Erzeugung von Defektstrukturen - Proximity Effekt

Die lithographische Definition der Porenpositionen ermöglicht die Herstellung von Strukturen innerhalb des regelmäßigen Porengittergitters. So können Poren gezielt ausgelassen werden, dadurch werden Defektstrukturen im photonischen Kristall erzeugt. So führt das Auslassen einer einzelnen Poren zu einem Punktdefekt im Kristall, eine Reihe fehlender Poren ergibt einen Liniendefekt.

Dabei kommt es aber zu Abweichungen der Radii angrenzender Poren. Im hexagonalen Kristall betragen diese Abweichungen 8 bis 10 Prozent. Zum Ätzen dieser Poren stehen mehr Ladungsträger zur Verfügung, da die generierten Löcher der Defektbereiche von den benachbarten Poren verkonsumiert werden können.

Dieser sogenannte Proximity-Effekt (engl. Umgebung) ist von besonderer Bedeutung für optischen Untersuchungen von Defektstrukturen. Da selbst kleine geometrische Veränderungen der Defekte sich auf Eigenschaften wie die energetische Lage der Defektmoden und die Feldverteilungen innerhalb des Defektes auswirken, ist der Proximity-Effekt bei Simulationsrechnungen zu berücksichtigen.

5.2 Der 2D hexagonale Kristall

5.2.1 Die Bandstruktur

In der Vielfalt aller möglichen photonischen Kristallstrukturen sind insbesondere diejenigen interessant, die eine Bandlücke in der gesamten 1. Brillouinzone aufweisen. Ein hexagonales Gitter bestehend aus Luftzylindern in einem Dielektrikum kann eine komplette Bandlücke für TE- und TM-Polarisation aufweisen. Dazu ist jedoch ein minimaler Brechungsindexkontrast von mindestens 2,7 notwendig [55].

Für einen solchen Kristall aus Silizium ist eine Bandstruktur in Abbildung 5.2 dargestellt. Das Verhältnis von Zylinderradius zur Gitterkonstante dieser Struktur beträgt $r/a = 0,45$. Für die TE-Polarisation existiert eine komplette Bandlücke $a/\lambda = 0,30$ bis $a/\lambda = 0,49$, während die TM-Polarisation eine komplette Bandlücke von $a/\lambda = 0,40$ bis $a/\lambda = 0,44$ aufweist. Diese überlappt mit der Bandlücke für die TE-Polarisation, so daß die vollständige Bandlücke durch die TM-Polarisation vorgegeben ist. Sie sind die sogenannten fundamentalen Bandlücken, da

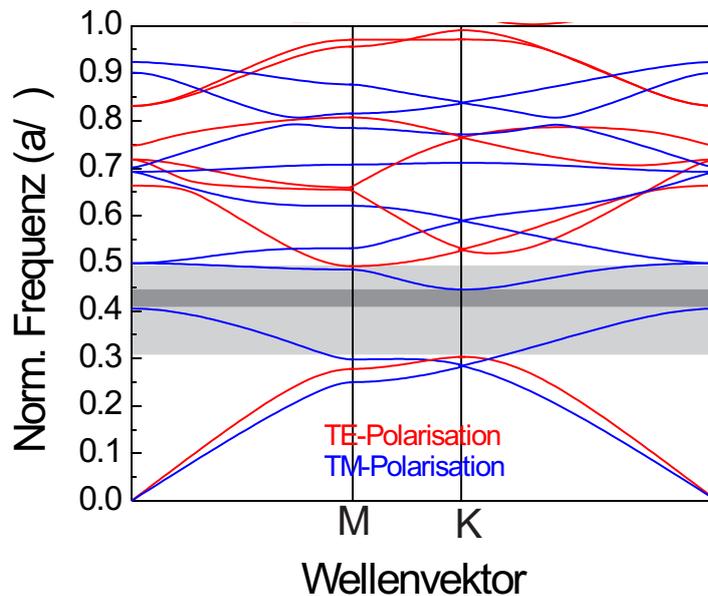


Abbildung 5.2: Bandstruktur des hexagonalen zweidimensionalen photonischen Kristalls aus Silizium ($r/a = 0,45$) (Bandstrukturrechnung C. Jamois)

sie bei den niedrigsten Frequenzen auftreten.

Für höhere Frequenzen existieren weitere Bandlücken. Allerdings ist dabei zu beachten, daß sie sich energetisch oberhalb der Absorptionskante des Siliziums befinden können. Die elektronische Bandlücke und damit die Absorptionskante des Siliziums (1,1 eV entspricht einer Wellenlänge von ca. $1,1 \mu\text{m}$ [8]) befindet sich bei den in dieser Arbeit verwendeten Strukturen (Gitterkonstanten von $a = 500 \text{ nm}$ bzw. $a = 700 \text{ nm}$) bei $a/\lambda = 0,46$ bzw. $a/\lambda = 0,64$. Oberhalb dieser Frequenzen besitzt die dielektrische Funktion komplexe Werte. Da für die Bandstrukturrechnungen jedoch ein reelles $\varepsilon(\vec{r})$ vorausgesetzt wurde, sind die Positionen und Größen der dort vorhergesagten Bandlücken nicht mehr zuverlässig und damit nur bedingt auf die vorhandenen Strukturen übertragbar.

5.2.2 Optische Charakterisierung

Um die optischen Eigenschaften eines photonischen Kristalls experimentell zu bestimmen, ist es zweckmäßig Transmissions- bzw. Reflexionsmessungen vorzunehmen. Bei einem zweidimensionalen photonischen Kristall wird dabei das Licht in der Periodizitätsebene senkrecht zur Oberfläche eingestrahlt. Das transmittierte bzw. reflektierte Licht wird spektral aufgelöst detektiert.

Bei dem senkrecht zur Kristalloberfläche reflektierten Licht handelt es sich nicht zwangsläufig um eine spiegelnde Totalreflexion, sondern um eine Interferenztotalreflexion. Diese entsteht durch die Braggreflexion an den Gitterebenen des Kristalls. Das reflektierte Licht kann bei senkrechtem Auftreffen auch unter anderen Winkeln aus der Oberfläche des photonischen Kristalls wieder austreten [7] (Abb. 7.2). Analog bedeutet dies für den Fall der Transmission nicht unbedingt den senkrechten Austritt des Lichtes aus der gegenüberliegenden Kristalloberfläche [45].

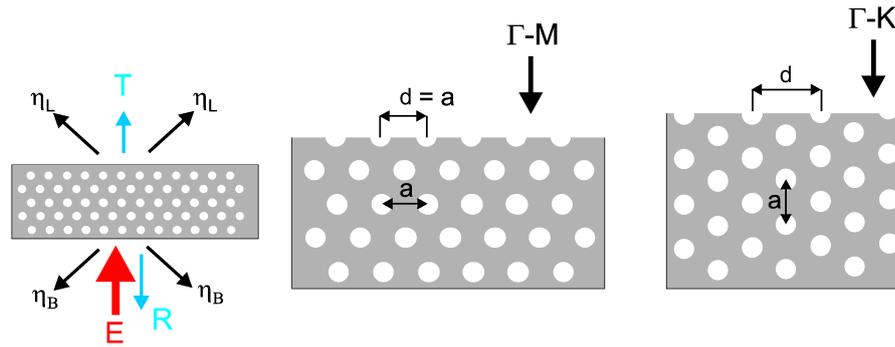


Abbildung 5.3: Beugung an einem photonischen Kristall. Links: E - einfallende Welle, R - spiegelnd reflektierte Welle, T - senkrechte Transmission, η_B Rückwärtsbeugung, η_L Vorwärtsbeugung; Mitte, Rechts: Oberflächengitterkonstante d für die Lichtausbreitung entlang Γ K-Richtung, Γ M-Richtung nach [73, 45]

Auch hier kann das Licht in andere Richtungen gebeugt werden, ähnlich der Laue-Röntgenbeugung.

Die Bedingung für das Auftreten der ersten Beugungsordnung entspricht der Beugung an einem Oberflächengitter mit der Gitterkonstante d . Diese muß größer oder gleich der Vakuumwellenlänge λ sein. Für den hexagonalen zweidimensionalen Kristall mit der Gitterkonstante a bedeutet das, $a/\lambda \geq a/d$ (senkrechter Einfall).

In Γ -M-Richtung entspricht die Periode des Oberflächengitters der Gitterkonstante a (Abb. 7.2). Damit tritt Beugung erst bei Frequenzen $a/\lambda \geq 1$ auf. Die sichtbare Periode in Γ -K-Richtung beträgt $b = \sqrt{3}a$, die Beugung tritt also für Frequenzen $a/\lambda \geq 0,577$ auf.

Für den hexagonalen Kristall mit Gitterkonstanten von 500 nm bzw. 700 nm kommt es damit im Bereich der fundamentalen Bandlücken noch nicht zur Beugung. Diese lassen sich durch Reflexions bzw. Transmissionsmessungen mit senkrechtem Lichteinfall sehr einfach nachweisen. Um eine Transmissionsmessung an einem photonischen Kristall durchzuführen, ist es zweckmäßig einen schmalen Steg aus dem Kristall herauszupräparieren [9]. Idealerweise sollten beide Wände des Steges über die gesamte Porentiefe innerhalb einer Porenreihe verlaufen. Eine schräge Kante würde zu einer verminderten Einkopplung an der Eintrittsfläche führen. An der Austrittsfläche kommt es zu einer Streuung des Lichtes in einen großen Raumwinkelbereich. Diese beiden Effekte führen zu einer geringeren detektierbaren Lichtintensität.

Die Präparation eines Kristalls für eine Reflexionsmessung ist hingegen einfacher, da nur eine Kristalloberfläche benötigt wird. Diese kann durch Brechen des Kristalls erzeugt werden. Im Idealfall verläuft die Bruchkante auf einer atomaren (110)-Ebene des Siliziums. Im Bereich der Poren ist der Anteil des Siliziums aufgrund der hohen Porosität geringer. Hier verläuft die Bruchkante entlang der schmalsten Stelle benachbarter Poren. Dadurch ergeben sich Porenfacetten parallel zu den Poren, die sich sehr gut für Reflexionsmessungen senkrecht zu den Poren eignen.

Für die Reflexionsmessung wurde ein Fourier-Transformations-Infrarot-Spektrometer (FTIR, IFS66, Hersteller Bruker) benutzt. Zentraler Bestandteil des FTIR ist ein Michelson-Interferometer (Abb. 5.4).

Das Licht einer breitbandigen Lichtquelle trifft auf einen Strahlteiler und wird in zwei Strahlen aufgespaltet. Beide Strahlen treffen jeweils senkrecht auf einen Spiegel. Dort werden sie reflektiert und passieren den Strahlteiler ein zweites Mal, beide Strahlen werden wiederum in einer Richtung überlagert. Es kommt abhängig vom Gangunterschied beider Strahlen zur Interferenz. Da ein Spiegel des Michelson-Interferometers beweglich ist kann eine Veränderung

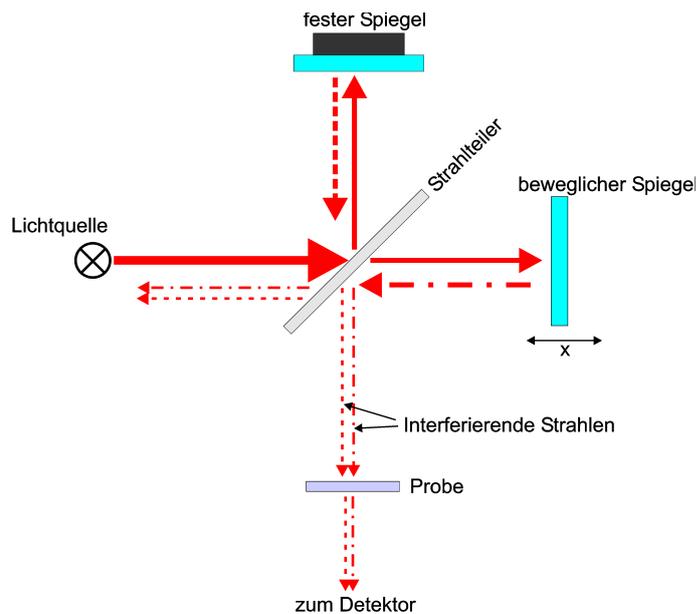


Abbildung 5.4: Prinzipieller Aufbau eines Michelson-Interferometers [73].

des Gangunterschiedes bewirkt werde. Für jede Position x des Spiegels ergibt sich ein neuer Gangunterschied Δs beider Strahlen. Für Wellenlängen mit $\Delta s = m\lambda$ tritt konstruktive Interferenz auf. Destruktive Interferenz tritt für Wellenlängen mit $\Delta s = (m + 1)\lambda$ auf, diese werden ausgelöscht. Da eine integrale Detektion aller Wellenlängen erfolgt, ergibt sich daraus ein Intensitätsspektrum in Abhängigkeit von der Spiegelposition x .

Eine genauere mathematische Behandlung zeigt, daß es sich dabei um das Fourier-transformierte Spektrum im Frequenzraum handelt. Eine Rücktransformation durch die Software liefert das Spektrum im Frequenzraum.

Zur ortsaufgelösten Reflexionsmessung wurde ein IR-Mikroskop (IR-scope II, Hersteller Bruker) mit FTIR gekoppelt. Der Ausgangsstrahl des Interferometers wird damit auf die Probe fokussiert. Der untersuchte Probenbereich wird mit Hilfe einer Loch- bzw. Schneidenblende selektiert. Aufgrund des großen untersuchten Spektralbereiches wird das Licht mittels Cassegrains-Spiegelobjektiven (Numerische Aperturen 0,4 bzw. 0,5) fokussiert bzw. detektiert. Als Referenz dient ein breitbandig reflektierender Silberspiegel.

5.2.3 Reflexionsmessung und Bandstruktur - der Vergleich

Um die optischen Eigenschaften eines existierenden photonischen Kristalls aus makroporösem Silizium mit der berechneten Bandstruktur vergleichen zu können, hat sich die Reflexionsmessung mit einem FTIR-Spektrometer als Standardcharakterisierungsmethode erwiesen. Für eine vollständige Charakterisierung ist es notwendig, die Reflektivität entlang der Hochsymmetrierichtungen $\Gamma - M$ und $\Gamma - K$ durchzuführen. Nur auf diese Weise kann ein vollständiger Vergleich mit der Bandstruktur erfolgen. Außerdem muß die Reflexionsmessung für TE- und TM-Polarisation separat erfolgen, da diese im idealen zweidimensionalen Kristall vollständig entkoppeln.

Als Ausgangspunkt der folgenden Untersuchungen wurde eine Kristallstruktur mit einer Gitterkonstante $a=700$ nm und einem Radius $r = 0,36a$ für beide Polarisation entlang beider Hochsymmetrierichtungen ($\Gamma - M$, $\Gamma - K$) untersucht. Um eine Reflexionsmessung mit der Bandstruktur vergleichen zu können, wird die Messung gegenüber einer Bandstruktur dargestellt. Abbildung 5.5 zeigt die Reflexionsmessungen entlang beider Hochsymmetrierichtungen und

für beide Polarisierungen. Diese Messungen wurden an einem Kristall mit einer Gitterkonstante von 700 nm und einem r/a -Verhältnis von 0,36 durchgeführt. Für die TE-Polarisation ist für beide Richtungen ein breiter Bereich hoher Reflektivität von $a/\lambda = 0,22$ bis $a/\lambda = 0,34$ normierte Frequenzen zu sehen. Dieser entspricht der durchgehenden fundamentalen Bandlücke in dieser Polarisation (dunkelgrauer Bereich). Für die TM-Polarisation existiert bei diesem r/a -Verhältnis noch keine durchgehende Bandlücke. Lediglich in $\Gamma - M$ -Richtung sind Stopbänder zu erkennen (hellgraue Bereiche).

Bemerkenswert an diesen Messungen ist das Auftreten vieler Details bei höheren Frequenzen. So sind höhere Bandlücken, Stopbänder eindeutig identifizierbar.

Ein Vergleich der Reflexionsmessungen mit einer Berechnung der Reflektivität (Translight [6]) zeigt eine sehr gute spektrale Übereinstimmung (Abb. 5.6 im gesamten untersuchten Spektralbereich). Abweichungen gibt es jedoch bei den absoluten Werten der Reflektivität. Diese lassen sich mit einer Streuung des auftreffenden Lichtes an einer nicht perfekten Bruchkante begründen so daß Licht von den stufenartigen Facetten nicht wieder in das Mikroskopobjektiv zurückgestreut wird. Außerdem ist die Auskopplung des Lichtes aus dem Kristall abhängig von dem Verlauf der Bruchkante innerhalb der Porenreihe selbst [86, 44].

Da das Mikroskopobjektiv einen Divergenzwinkel aufweist, kommt es zu einem Auftreffen des Lichtes unter anderen Winkeln als der Flächennormalen der Bruchkante. Dabei kommt es zu einer Verkippung der Lichtstrahlen in der Periodizitätsebene bzw. aus der Periodizitätsebene. Beide Fälle führen zu einer Verschiebung der Bandstruktur, insbesondere der Bandkanten [70, 78]. Das gemessene Reflexionsspektrum entspricht dann einer Mittelung über den Einfallswinkel, was zu einem Abflachen der Anstiegsflanken führt.

Gruppentheoretische Betrachtung der Kopplungsbedingungen

Die Kopplung des einfallenden Lichtes an die einzelnen Bänder wird durch die Feldsymmetrien in der Ausbreitungsrichtung bestimmt. Dazu werden in dieser Arbeit gruppentheoretische Betrachtungen der Feldverteilungen für einen 2D photonischen Kristall aus vorgenommen.

Die zur Charakterisierung relevanten Symmetrioperationen, sind diejenigen, unter den das Gitter des photonischen Kristalls invariant bleibt. Sie sind in der Punktgruppe zusammengefaßt, die dem Gitter des photonischen Kristalls entspricht. Für das hexagonale Gitter ist dies die Punktgruppe

$$C_{6v} = \{E, C_6, C_6^{-1}, C_3, C_3^{-1}, C_2, \sigma_x, \sigma'_x, \sigma''_x, \sigma_y, \sigma'_y, \sigma''_y\} = \{E, 2C_6, 2C_3, C_2, 3\sigma_x, 3\sigma_y\}. \quad (5.3)$$

Wie in Abbildung 5.8 dargestellt, besteht diese aus den Drehachsen C_i ; $i = 2, 3, 6$ (senkrecht zur Periodizitätsebene) und den Spiegelebenen σ_l ; $l = x, y$ sowie der identischen Abbildung E . Symmetrioperationen, die durch eine Koordinatentransformation ineinander überführt werden können, werden als zueinander konjugiert bezeichnet (z.B. $C_6, C_6^{-1} \rightarrow 2C_6$). Sie werden in sogenannten Klassen zusammengefaßt.

Eine spezielle Darstellung dieser Symmetriegruppe sind die sogenannten irreduziblen Darstellungen. Dabei wird die Punktgruppe C_{6v} durch vier eindimensionale (A_1, A_2, B_1, B_2) und zwei zweidimensionale Darstellungen (E_1, E_2) repräsentiert. Die Dimension der Darstellungen gibt darüber Auskunft, wieviele Basisfunktionen dieser Darstellung entsprechen (eindimensional - 1 Basisfunktion, zweidimensional - 2 Basisfunktionen). Die Darstellungen sind mit den Symmetrioperationen durch die Charaktertafel verknüpft,

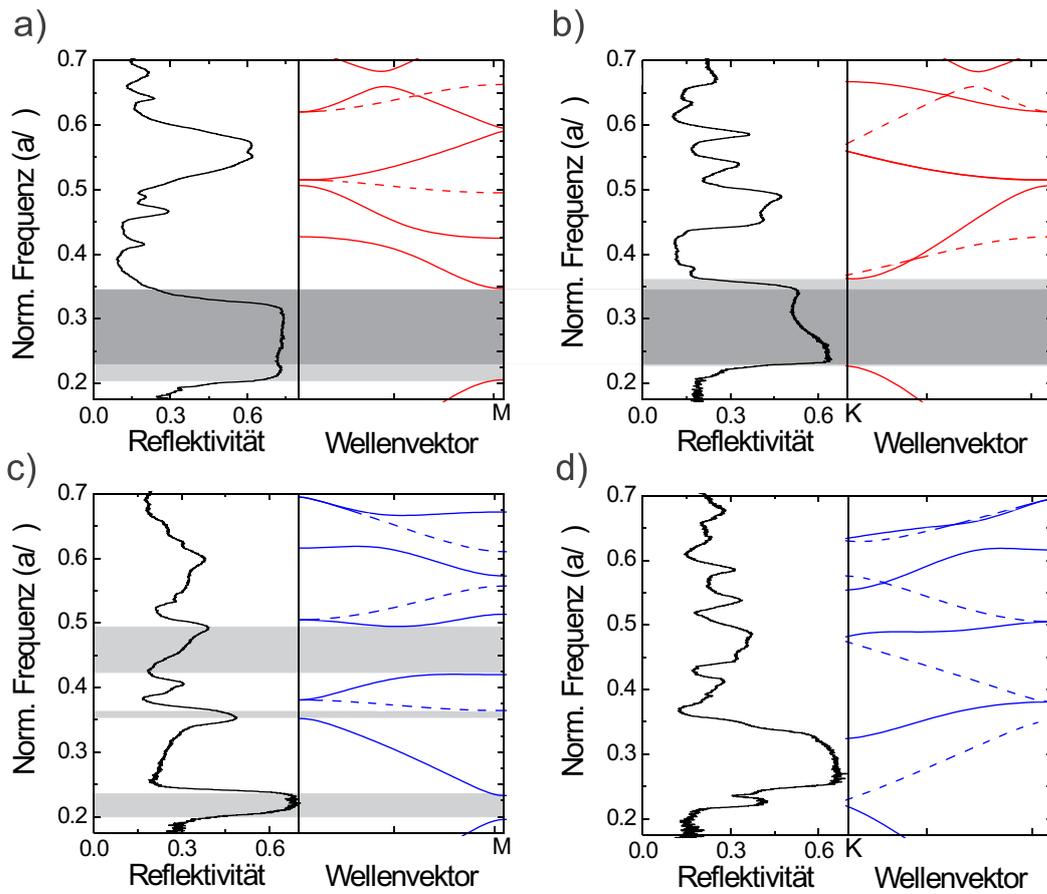


Abbildung 5.5: Vergleich von Reflexionsmessungen und Bandstrukturen für einen zweidimensionalen photonischen Kristall ($r/a=0,36$) a) TE-Polarisation, $\Gamma - M$ -Richtung; b) TE-Polarisation, $\Gamma - K$ -Richtung; c) TM-Polarisation, $\Gamma - M$ -Richtung; d) TM-Polarisation, $\Gamma - K$ -Richtung.

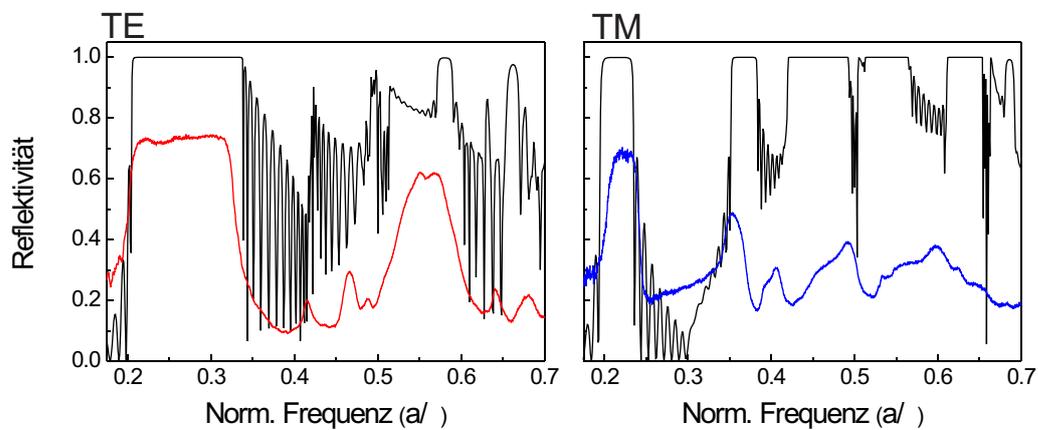


Abbildung 5.6: Vergleich von Reflexionsmessungen und einer Berechnung der Reflektivität mittels Translight für die $\Gamma - M$ -Richtung.

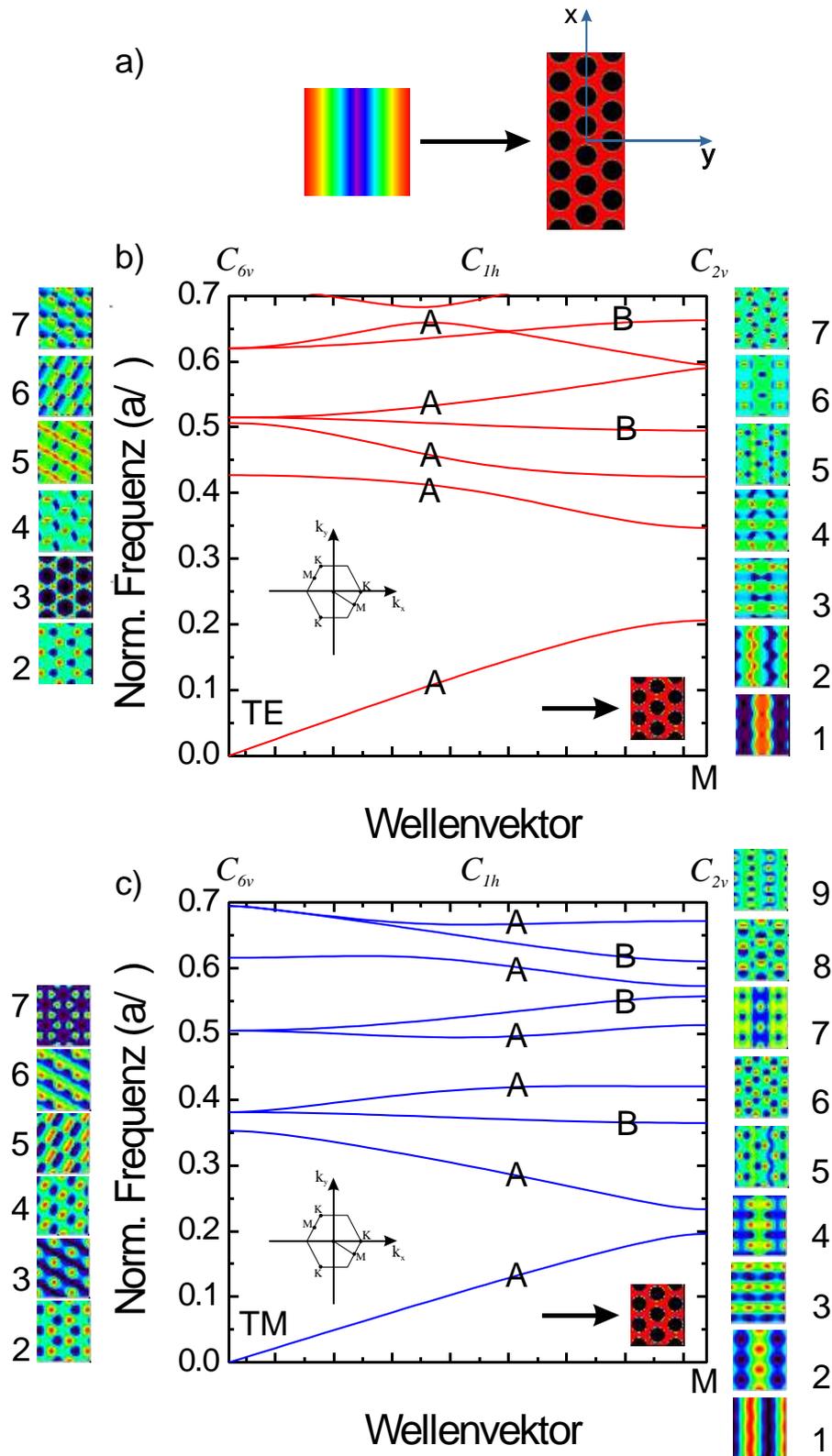


Abbildung 5.7: a) einfallende ebene Welle in $\Gamma - M$ -Richtung; b) Zuordnung der irreduziblen Darstellungen der Bänder in $\Gamma - M$ -Richtung (TE-Polarisation); c) wie b) jedoch für TM-Polarisation.

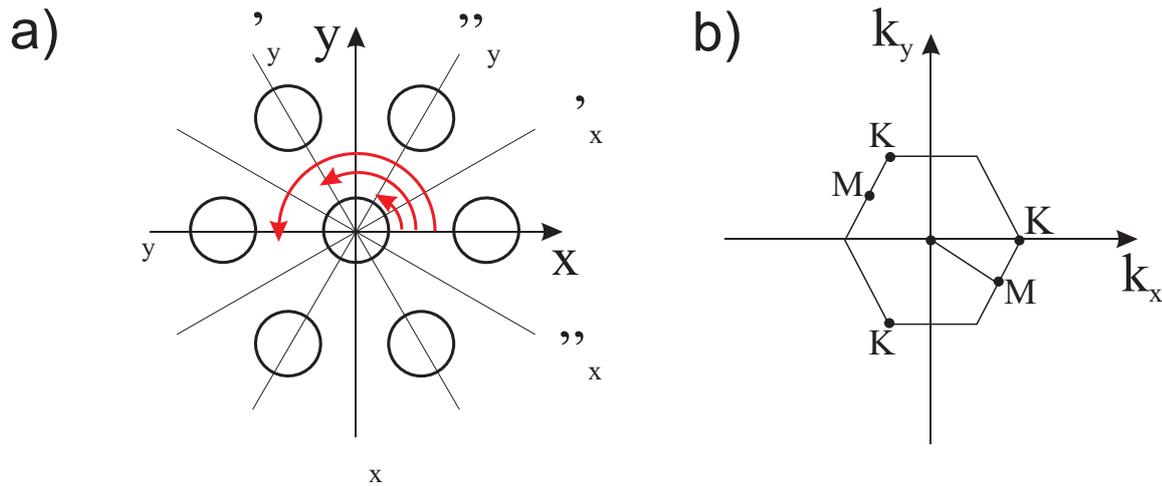


Abbildung 5.8: a) Darstellung der Symmetrieoperationen, unter denen das hexagonale Gitter invariant ist b) 1. Brillouinzone des hexagonalen Gitters mit den entsprechenden Hochsymmetriepunkten.

C_{6v}	E	$2C_6$	$2C_3$	C_2	$2\sigma_y$	$2\sigma_x$
A_1	1	1	1	1	1	1
A_2	1	1	1	1	-1	-1
B_1	1	-1	1	-1	1	-1
B_2	1	-1	1	-1	-1	1
E_1	2	1	-1	-2	0	0
E_2	2	-1	-1	2	0	0

Die Verbindung zwischen den Feldverteilungen der Resonatormoden und der irreduziblen Darstellung besteht nun darin, daß die Feldverteilungen $E_{z, kn}(\vec{r})$, $H_{z, kn}(\vec{r})$ selbst irreduzible Darstellungen der Punktgruppe C_{6v} sind. Dies läßt sich daran veranschaulichen, daß jeder Symmetriepoperator der Gruppe C_{6v} mit den Differentialoperatoren für die Felder in den Wellengleichungen (Gl.2.10,2.11) vertauscht ([71], S. 47). Jeder Feldverteilung läßt sich somit eine irreduzible Darstellung zuordnen. Mit Hilfe der Charaktertafel, ist es möglich das Verhalten der Resonatormoden unter den jeweiligen Symmetrieoperationen zu bestimmen. (Anmerkung: Da es sich hier um einen zweidimensionalen photonischen Kristall handelt, werden hier nur Punktgruppen anstelle von Raumgruppen betrachtet. Die Vektorfelder \vec{E} , \vec{H} reduzieren sich für die jeweiligen Polarisierungen auf die skalaren Felder der z-Komponenten E_z , H_z .)

Den Hochsymmetriepunkten der 1. Brillouinzone werden Untergruppen von C_{6v} als Punktgruppen zugeordnet werden, für den M-Punkt ist das C_{2v} , für den K-Punkt C_{3v} .

Anhand der $\Gamma - M$ -Richtung (hier y-Richtung) lassen sich die Kopplungsbedingungen sehr gut veranschaulichen. Die Charaktertafel für die Gruppe C_{2v} ist:

C_{2v}	E	C_2	σ_y	σ_x
A_1	1	1	1	1
A_2	1	1	-1	-1
B_1	1	-1	1	-1
B_2	1	-1	-1	1

Abbildung 5.7a zeigt eine ebene Welle, die in $\Gamma - M$ -Richtung auf den Kristall trifft. Durch die Ausbreitungsrichtung der Welle ist somit eine Richtung (hier die y-Richtung) bezüglich der Symmetriegruppe C_{2v} ausgezeichnet.

Senkrecht zu ihrer Ausbreitungsrichtung weist die ebene Welle eine konstante Phasenlage auf,

d.h. sie ist invariant unter einer Spiegelung an der Ebene senkrecht zur x-Achse. Diese wird mit σ_x bezeichnet.

Für die beiden Polarisierungen lassen sich anhand der Charaktertafeln jedem Band an jedem k-Punkt ein irreduzible Darstellungen zuordnen. Zwischen den Hochsymmetriepunkten entsprechen die Bänder der Punktgruppe $C_{1h} = \{E, \sigma_x\}$

C_{1h}	E	σ_x
A	1	1
B	1	-1

Diese Punktgruppe C_{1h} ist mit C_{2v} über die Kompatibilitätsrelationen gekoppelt, so daß sich die Charaktertafeln ineinander überführen lassen. Dabei ist darauf zu achten, daß für entartete Bänder am Γ -Punkt eine zweidimensionale Darstellung der Form $E = A + B$ gilt [32, 71]. Diese läßt sich jedoch in eine A -Darstellung und eine B -Darstellung zerlegen. Durch die Auszeichnung der y-Richtung existieren für die Bänder zwischen den Hochsymmetriepunkten zwei mögliche Darstellungen A bzw. B , die bezüglich der Spiegelung an σ_x symmetrisch bzw. antisymmetrisch sind. Das bedeutet die ebene Welle koppelt an die Bänder mit der Darstellung A . An die Bänder mit der Darstellung B koppelt sie hingegen nicht. Diese Bänder wurden zum besseren Vergleich der Reflexionsmessungen mit der Bandstruktur in Abbildung 5.5 gestrichelt dargestellt.

Die Zuordnung in der $\Gamma - K$ -Richtung erfolgt analog zur $\Gamma - M$ -Richtung, allerdings tritt nun auch am K-Punkt eine Entartung der Bänder auf. Da die ebene Welle nun die x-Richtung auszeichnet, hat die Punktgruppe C_{1h} jetzt folgende Charaktertafel

C_{1h}	E	σ_y
A	1	1
B	1	-1

Die Punktgruppe für den K-Punkt ist C_{3v}

C_{3v}	E	$2C_3$	$3\sigma_v$
A_1	1	1	1
A_2	1	1	-1
E	2	-1	0

Dem entsprechend koppeln Bänder mit der Darstellung A_1 , Bänder mit der Darstellung A_2 koppeln nicht, da sie bei einer Spiegelung eine Inversion erfahren.

Anhand dieser Symmetriebetrachtungen konnten die Bänder, hinsichtlich der Kopplung einer ebenen Welle identifiziert werden. Die Bänder, an die die ebene Welle nicht koppeln kann, wurden in Abbildung 5.5 gestrichelt dargestellt. So läßt sich zum Beispiel das Auftreten des Reflexionsmaximums bei $a/\lambda = 0,25$ in Abbildung 5.5d erklären, da dort die ebene Welle nicht an ein vorhandenes Band koppelt.

Weiterhin ist der effektive Brechungsindex der Bänder zu berücksichtigen. Trifft eine ebene Welle von außen auf den Kristall, so wird sie entsprechend des Brechungsindexkontrastes reflektiert. Die Gruppengeschwindigkeit im Kristall und damit der effektive Brechungsindexkontrast hängt aber vom Anstieg des jeweiligen Bandes ab. (Gl. 2.18). Flache Bänder haben einen hohen effektiven Brechungsindex und verursachen daher eine höhere Reflexion als Bänder mit einem größeren Anstieg [20]. Die alternative Betrachtungsweise ist der Übergang der Welle von der Zustandsdichte des Vakuums zur Zustandsdichte des photonischen Kristalls (insbesondere flache Bänder).

Das Auftreten vieler Details sowie die große Flankensteilheit der Reflexionsmaxima sprechen zum einen für den hohen Ordnungsgrad des Kristalls und zum anderen für eine gute Oberflächenbeschaffenheit der Poren. Unordnung im Kristall führt zu einer „Verschmierung“ der photonischen Zustände und damit zu einer Reduzierung der photonischen Bandlücke.

Reflexionsmessungen eignen sich somit sehr gut um die Übereinstimmung von ab-initio Berechnung und real existierender Struktur zu untersuchen. Weiterhin lassen sich Aussagen über die Qualität der untersuchten Struktur hinsichtlich ihrer photonischen Eigenschaften machen. So ist es zum Beispiel möglich das r/a -Verhältnis aus einer solchen Messung zu bestimmen, während bisher Bildauswertungsverfahren von elektronenmikroskopischen Aufnahmen notwendig waren.

5.2.4 Aufweitung der Poren

Die Poren besitzen nach dem elektrochemischen Ätzprozeß einen relativ kleinen Radius ($r \approx 0,36a$). Eine anschließende Temperung führt zur Bildung eines thermischen Oxides an den Porenwänden, welches sich durch chemisches Ätzen mit HF entfernen läßt. Auf diese Art und Weise kann in einem schrittweisen Prozeß der Porenradius auf einen gewünschten Wert eingestellt werden. Da Größe und Lage der photonischen Bandlücke des Kristalls stark vom Porenradius abhängen, bietet das schrittweise Aufweiten der Poren die Möglichkeit, die Bandlücke gezielt in einen bestimmten Spektralbereich zu verschieben. Abbildung... zeigt die Reflexionsspektren eines photonischen Kristalls ($a=700$ nm, TE-Polarisation), dessen Radius von $r = 0,36a$ auf $r = 0,45a$ aufgeweitet worden ist. Dabei wurde die TE-Bandlücke von 39,1 auf 49 Prozent aufgeweitet und ihre spektrale Position von 0,28 auf 0,41 normierte Frequenzen verschoben.

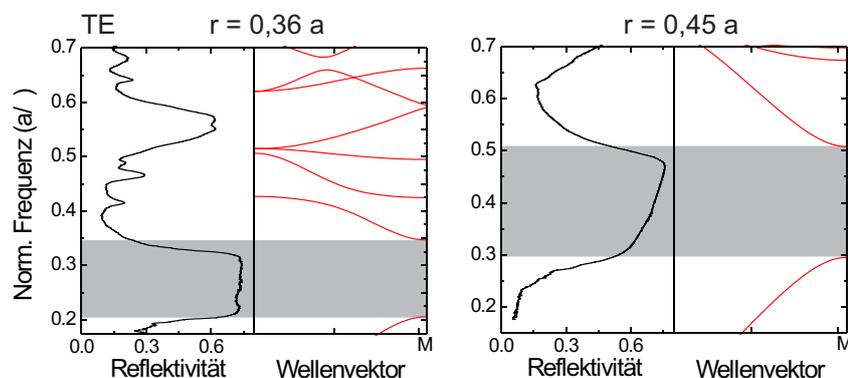


Abbildung 5.9: Verschiebung der Bandlücke durch die Aufweitung der Poren nach thermischer Oxidation und anschließender HF-Ätzung

In diesem Kapitel wurde das makroporöse Silizium als ein sehr gutes Modellsystem eines zweidimensionalen photonischen Kristalls vorgestellt. Das Kapitel stellt somit die Verbindung zwischen den vorangegangenen Arbeiten [26, 9, 73] und dem Ausgangspunkt der eigenen Arbeit her. Dieser Ausgangspunkt ist die optische Charakterisierung des zweidimensionalen Kristalles anhand von Reflexionsmessungen entlang der beiden zugänglichen Hauptsymmetrierichtungen $\Gamma - M$ und $\Gamma - K$. Dazu wurde eine detaillierte Analyse der Bedingungen zur Kopplung ebener Wellen an die Bandstruktur durchgeführt.

6. Interne Emitter in 2D-Photonischen Kristallen

Die Veränderung der photonischen Zustandsdichte durch einen photonischen Kristall wirkt sich nicht nur auf die Ausbreitung existierender Photonen aus, sondern es werden auch emittierende Systeme (Atome, Moleküle, Quantenpunkte,...) in ihrem Emissionsverhalten beeinflusst. Daher ist das Positionieren eines Emitters in einem photonischen Kristall von besonderem Interesse, da sich auf diese Weise die Modifikation seiner Emission untersuchen läßt.

6.1 Kopplungsbedingungen für Emitter

Um eine effiziente Kopplung von Emittlern an die elektromagnetischen Zustände zu realisieren, ist es notwendig ihn dort zu positionieren, wo die lokale Zustandsdichte des elektromagnetischen Feldes Extrema erreicht. Die dreidimensionale LDOS (Gl.3.29) kann für eine konkrete endliche Struktur berechnet werden, indem man den dreidimensionalen Green-Tensor $\mathbf{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ berechnet. Der 3D-Green-Tensor ist eine 3×3 -Matrix. Die Elemente $G_{uv}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ stellen dabei die Komponente u des Feldes am Ort \mathbf{r} für einen emittierenden Dipol, orientiert in Richtung der Koordinate v , am Ort \mathbf{r}' dar. Der Green-Tensor wird für das elektrische Feld und das magnetische Feld getrennt berechnet. Die Tensoren \mathbf{G}^E und \mathbf{G}^H sind dabei über die Randbedingungen des endlichen Problems gekoppelt. Der Emitter wird als punktförmiger Dipol mit beliebiger Polarisation angenommen.[17, 22]

Abbildung 6.1 zeigt eine LDOS-Rechnung für einen endlichen hexagonalen Kristall. Dabei ist die LDOS farbkodiert gegenüber der normierten Frequenz und entlang eines Querschnittes durch den Kristall in $\Gamma - K$ -Richtung dargestellt. Der blaue Bereich ($a/\lambda = 0,3 - 0,49$) entspricht der fundamentalen Bandlücke für die TE-Polarisation. Innerhalb dieses Bereiches ist wiederum die Bandlücke für die TM-Polarisation ($a/\lambda = 0,4 - 0,45$) und damit die vollständige Bandlücke zu erkennen. Die vergleichsweise geringe Abschwächung der LDOS um ca. 1 Größenordnung im Bereich der photonischen Bandlücke ist darauf zurückzuführen, daß es sich hier um eine vollständig dreidimensionale Berechnung handelt. Dies bedeutet, daß entlang der Poren ein dielektrisch homogenes Medium vorliegt. Da ein Ensemble von Emittlern mit zufälliger Orientierung jedoch in alle Richtungen abstrahlen kann, kann das Licht entlang dieser Richtung frei propagieren, da die Zustandsdichte entlang der Poren nicht verändert ist.

Der Herstellungsprozeß eines zweidimensionalen photonischen Kristalls aus makroporösem Silizium bietet keine einfache Methode, Emitter im Silizium zu positionieren. Daher ist ein Infiltrationsprozeß eine naheliegende Methode zur Realisierung interner Emitter. Die lokale Zustandsdichte zeigt an den Porenwänden eine Erhöhung um einen Faktor 3. Ein dort positionierter Emitter kann also an Zustände im photonischen Kristall koppeln, und somit eine erhöhte Emission aufweisen.

Im folgenden soll die definierte Infiltration von HgTe-Quantenpunkten in makroporöses Silizium beschrieben werden.

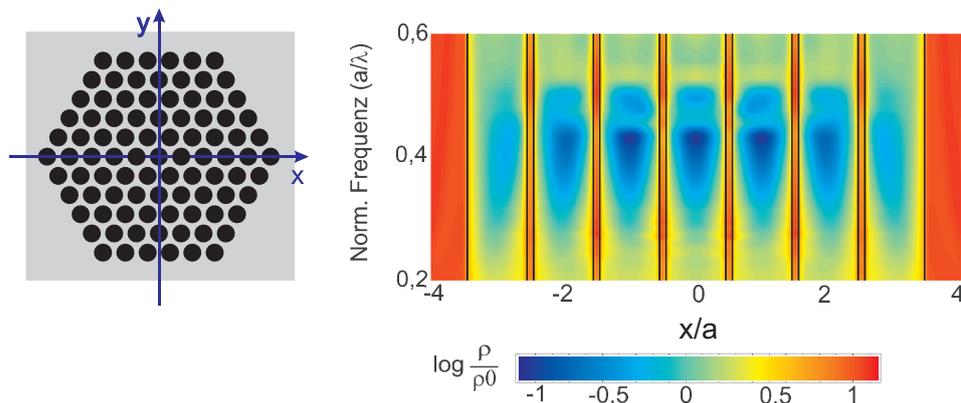


Abbildung 6.1: Lokale Zustandsdichte eines endlichen zweidimensionalen photonischen Kristalls in Abhängigkeit von der normierten Frequenz entlang der $\Gamma - K$ -Richtung (LDOS-Berechnung von D. Fussell, University of Sydney)

6.2 Definierte Infiltration

6.2.1 Herstellung von HgTe/Polymer-Nanoröhren

Der Transfer der HgTe-Nanokristalle in organische Lösungsmittel ermöglicht deren Einbettung in Polymere. Dazu wurden PS (Polystyrol) und PMMA (Polymethyl-methacrylat) in der Kolloidsuspension HgTe/Toluol gelöst. Das Massenverhältnis von HgTe und Polymer beträgt dabei 1:10.

Mit einem Benetzungsprozeß, der von Steinhart et al. [81] entwickelt wurde, lassen sich die Poren von makroporösem Silizium mit Polymeren beschichten. Dazu wird in diesem Fall eine Polymer-Nanopartikel-Lösung auf die Oberfläche eines Makroporenfeldes getropft. Da Polymere zu den Materialien mit niedrigen Oberflächenenergien gehören, kommt es auf der Hochenergieoberfläche des Siliziums zum so genannten „Spreiten“. Dabei bildet sich um einen makroskopischen Tropfen ein Vorläuferfilm aus. Dieser kann Dicken von einigen zehn Nanometern bis hin zu einigen hundert Pikometern haben. Dieser Film benetzt die Porenwände vollständig und verfestigt sich nach dem Verdunsten des Toluols. Dadurch wird eine Replik der Porenstruktur gebildet.

Abbildung 6.2 zeigt HgTe/PS-Nanoröhren, die aus dem Silizium-Templat herausgelöst wurden. Dazu wurde das Silizium mit einer 40 prozentigen KOH-Lösung bei 80 Grad Celsius selektiv geätzt. Der Durchmesser dieser Nanoröhren beträgt $1 \mu\text{m}$, ihre Länge $50 \mu\text{m}$. Abbildung 6.2d zeigt eine TEM-Aufnahme eines Porenquerschnittes, der mittels eines Mikrotomschnittes präpariert wurde. Daraus geht hervor, daß die Wandstärke der Nanoröhren ca. 20 nm beträgt.

Um den Einschluß der HgTe-Nanokristalle im Polymer zu untersuchen, wurden TEM-Aufnahmen der Nanoröhren gemacht. Dafür war eine Präparation von HgTe/PS-Nanoröhren in einem makroporösen Al_2O_3 -Templat notwendig. Dieses Templat wurde dann in Epoxydharz eingebettet, um Mikrotomschnitte anfertigen zu können.

Anhand Abbildung 6.3a und b ist zu erkennen, daß es im Polymer zu einer Einbettung von Clustern, bestehend aus etwa zehn Nanokristallen, kommt. Die Nanokristalle sind dabei, aufgrund ihrer vergleichsweise großen Masse, als dunkle Kontrastbereiche deutlich erkennbar. Abbildung 6.3c zeigt die kristalline Struktur eines einzelnen Nanokristalls in der umgebenden Polymerma-

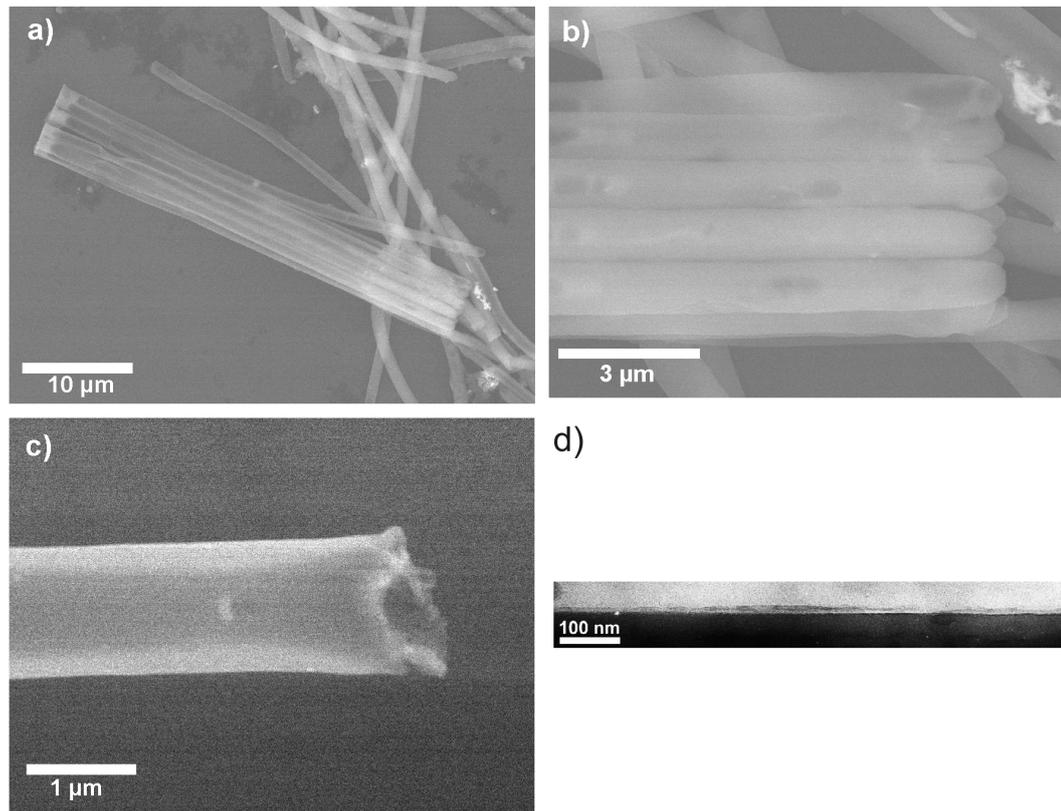


Abbildung 6.2: a)- c) Rasterelektronenmikroskopische Aufnahmen der herausgelösten HgTe/PS-Nanoröhren; d) TEM-Aufnahme eines Röhrenquerschnittes zur Bestimmung der Wandstärke.

trix. Die Auswertung von TEM-Untersuchungen an eingebetteten CdTe-Nanokristallen ergab für deren Gitterkonstanten unveränderte Werte gegenüber dem Volumenkristall ($a = 4,57 \text{ \AA}$, $b = 4,57 \text{ \AA}$, $c = 7,48 \text{ \AA}$). Es kann also davon ausgegangen werden, daß das umgebende Polymer keine strukturellen Veränderungen der Nanokristalle verursacht.

6.2.2 Optische Eigenschaften

Zur Charakterisierung der optischen Eigenschaften der HgTe/PS-Nanoröhren wurden Photolumineszenzmessungen durchgeführt. Dazu wurden die Nanoröhren in einem makroporösen Al_2O_3 -Templat mit einer Gitterkonstante von 500 nm und einem Porendurchmesser von 350 nm hergestellt. Danach wurde der Oberflächenfilm mit organischen Lösungsmitteln entfernt. Da Al_2O_3 im untersuchten Spektralbereich transparent ist und selbst keine Lumineszenz aufweist, ist es möglich die im Templat befindlichen Nanoröhren spektroskopisch zu charakterisieren.

Um die Vielseitigkeit dieser Funktionalisierung der Nanoröhren zu demonstrieren, wurden ebenfalls CdTe-Nanokristalle eingebettet. Diese CdTe-Nanokristalle werden als Kolloide mit einer Methode analog zum HgTe hergestellt [27].

Abbildung 6.4a zeigt die Lumineszenzspektren von HgTe/PS- bzw. CdTe/PS-Nanoröhren, die noch im Al_2O_3 -Templat eingebettet sind. Die Lumineszenz der HgTe-Nanokristalle im PS zeigt gegenüber der Lumineszenz freier HgTe-Nanokristalle keine signifikanten Unterschiede. Um einen Einfluß des Polystyrols auf die HgTe-Emission auszuschließen, wurden Transmissions- und Photolumineszenzmessungen an einem ca 200 nm dicken PS-Film durchgeführt (Abb. 6.4b). Dabei wurden im untersuchten Spektralbereich weder signifikante Veränderung der Transmission durch Absorption noch ein Photolumineszenzsignal gemessen. Das Emissions-

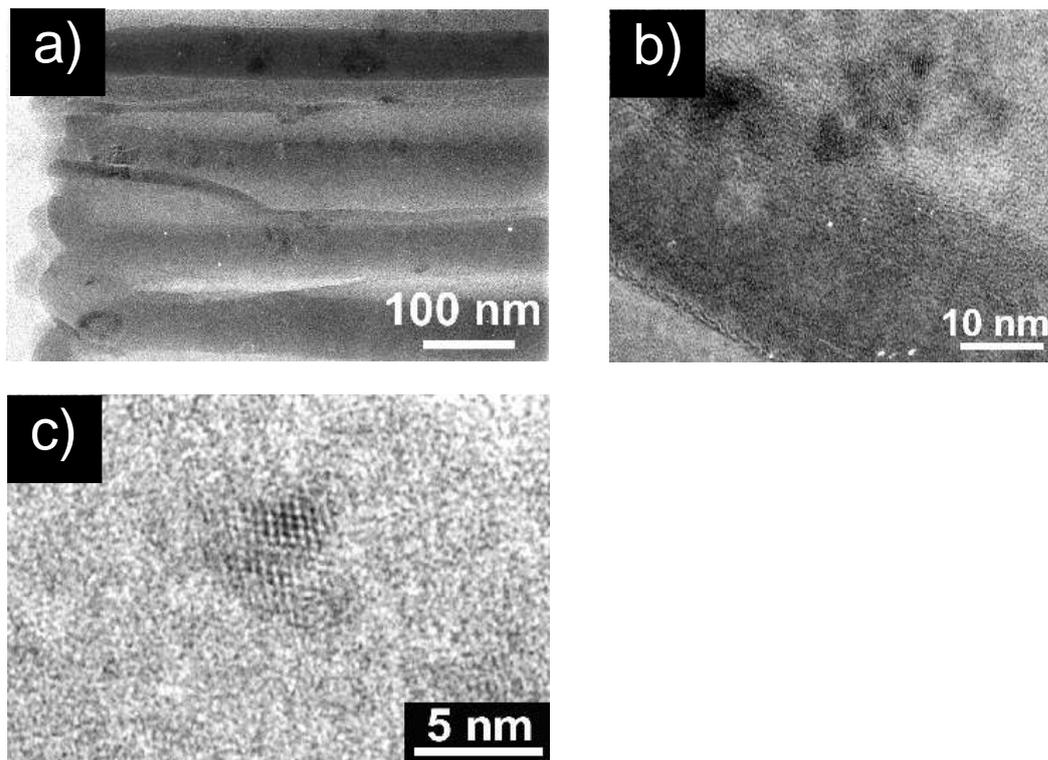


Abbildung 6.3: TEM-Aufnahmen der HgTe/PS-Nanoröhren zur Untersuchung der Einbettung von Nanokristallen im Polymer; a) Übersichtsaufnahme der Porenspitzen; b) hochaufgelöste Aufnahme eines Nanokristall-Clusters innerhalb der Wand einer Nanoröhre (der von oben links nach unten rechts verlaufenden dunkle Streifen ist eine Porenwand aus Al_2O_3); c) einzelner Nanokristall innerhalb einer Nanoröhrenwand.

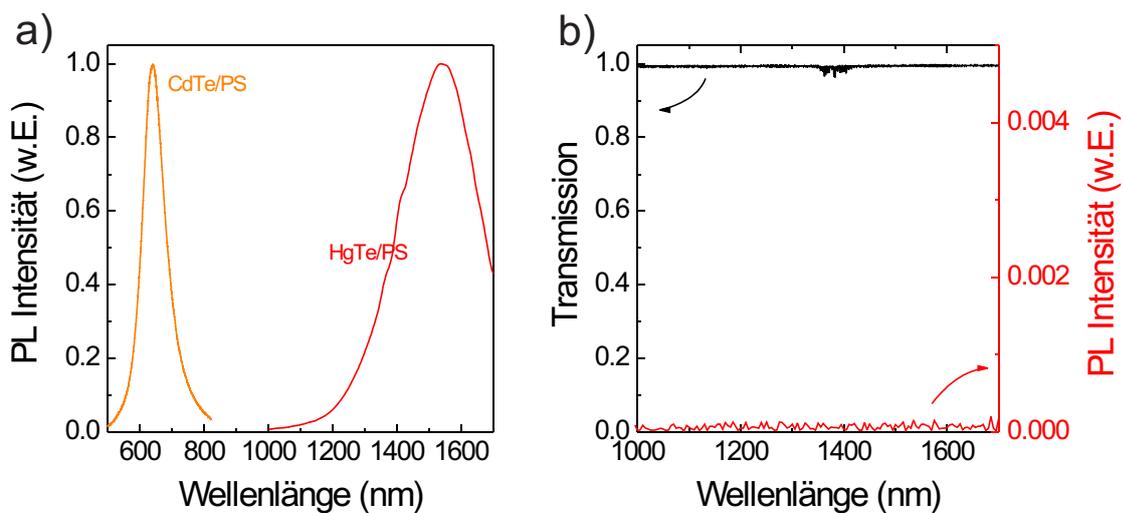


Abbildung 6.4: a) Photolumineszenzspektren von CdTe/PS- und HgTe/PS-Nanoröhren im Al_2O_3 -Templat; b) Transmissions- und Photonlumineszenzspektrum eines PS-Films.

verhalten der Nanokristalle wird also nicht durch das Polystyrol beeinflusst.

Allerdings wäre eine resonante Kopplung zwischen Emission und Nanoröhre bei geeignetem Röhrendurchmesser denkbar, da diese dann eine Art Ringresonator darstellt. Für eine Emissionswellenlänge von 1500 nm läßt sich eine Resonanzbedingung entlang des Umfangs der einzelnen Nanoröhre konstruieren, indem ein ganzzahliges Vielfaches der Wellenlänge dem optischen Weg entlang des Umfangs entspricht. Es gilt dann

$$m \cdot \lambda = n \cdot \pi \cdot D. \quad (6.1)$$

Für einen Nanoröhre aus Polystyrol mit einem Brechungsindex $n=1,59$ und $m=3$ ergibt sich beispielsweise ein Durchmesser von 900 nm.

6.2.3 Einfluß auf die Bandstruktur

Abschließend soll noch der Einfluß der Polymernanoröhren auf die Bandstruktur selbst betrachtet werden. Der Brechungsindex der HgTe/PS-Nanoröhren wird im wesentlichen durch den Brechungsindex von PS (1,59) bestimmt, da der Volumenanteil der HgTe-Nanokristalle, aufgrund der stark unterschiedlichen Dichte beider Materialien, sehr gering ist (ca. 1,2 Prozent, bei einem Masseverhältnis PS:HgTe von 10:1). Betrachtet man die Pore als effektives Medium, so kann man die Veränderung des Brechungsindex innerhalb einer Pore berechnen. Der Brechungsindex ergibt sich aus

$$n_{Diff} = n_{Luft} \cdot \frac{A_{Luft}}{A_{Pore}} + n_{PS} \cdot \frac{A_{PS}}{A_{Pore}}, \quad (6.2)$$

wobei die Brechungsindizes der beiden Materialien Luft und PS mit den Flächenanteilen innerhalb der Pore gewichtet werden. Die Veränderung des Brechungsindex beträgt bei einer Wandstärke der Nanoröhre von 10 nm $n_{Diff} = 1,038$. Aufgrund der geringen Wandstärke der Nanoröhren gegenüber dem Porendurchmesser und des relativ niedrigen Brechungsindex des PS, kommt es nur zu einer geringfügigen Änderung des Brechungsindex innerhalb der Pore.

Streng genommen, darf die Luftpore aber nicht als effektives Medium behandelt werden, da ihr Durchmesser in der Größenordnung der Lichtwellenlänge liegt. Bei einer Auskleidung der Porenwand mit einer HgTe/PS-Nanoröhre wird ein zusätzlicher Brechungsindexübergang eingeführt. Der abrupte Übergang von Silizium als Hochindexmaterial zu Luft wird damit abgeschwächt. Zu diesem Zweck wurde eine Bandstrukturechnung durchgeführt, die diesen zusätzlichen Indexübergang berücksichtigt.

Wie Abbildung 6.5 zeigt, ist der Einfluß der Polymerbeschichtung an den Porenwänden sehr gering. Die Bandstruktur (rot) wird durch dabei zu niedrigeren Frequenzen verschoben. Diese Verschiebung tritt insbesondere bei höheren Bändern auf. Für ein r/a -Verhältnis von 0,36 beträgt die Verschiebung des 7. Bandes $\Delta(a/\lambda) = 6,8 \cdot 10^{-3}$, für das r/a -Verhältnis von 0,45 ergibt sich $\Delta(a/\lambda) = 2,7 \cdot 10^{-2}$.

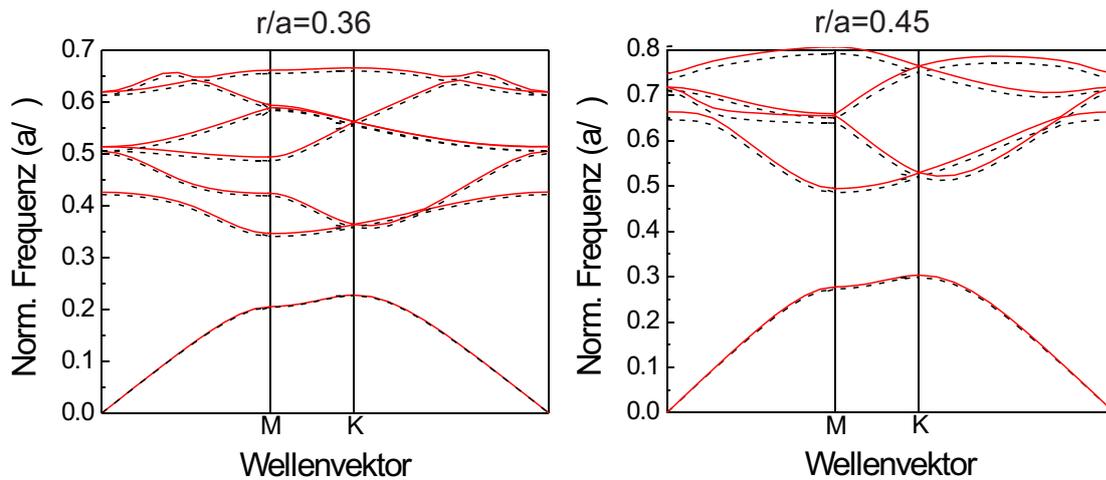


Abbildung 6.5: Veränderung der Bandstruktur (rot) nach einer Polymerbeschichtung ($n=1,59$, schwarz gestrichelt) der Porenwände für ein r/a -Verhältnis von 0,36 bzw. 0,45.

6.3 Lumineszenz interner Emittter

Die, im vorhergehenden Kapitel beschriebene, definierte Infiltration von HgTe/Polymer Nanoröhren ermöglicht erstmals eine Präparation eines 2D photonischen Kristalls aus Silizium mit internen Lichtemitttern. Die Untersuchung und Charakterisierung des Einflusses einer photonischen Bandlücke auf die Lumineszenzeigenschaften der Emittter soll in diesem Kapitel beschrieben werden.

6.3.1 Der optische Aufbau zur Photolumineszenzspektroskopie

Die einfachste experimentelle Möglichkeit die Lumineszenz der internen HgTe-Quantenpunkte zu spektroskopieren, ist eine optische Anregung mit einer monochromatischen Lichtquelle. Dazu ist es notwendig, einen kollimierten Laserstrahl in die Poren einzukoppeln. Daraus ergeben sich folgende Probleme:

1. Die Anregungsenergie sollte im Bereich der höchsten Absorption der Quantenpunkte liegen. Dabei ist jedoch zu berücksichtigen, daß die elektronische Bandkante des Silizium bei 1,1 eV (Raumtemperatur) liegt. Das bedeutet, eine Anregung mit einer Energie $> 1,1$ eV wird daher sehr stark von der Silizium-Matrix absorbiert.
2. Die Einkopplung eines Laserstrahls muß kollimiert und parallel zu den Poren erfolgen, damit auch Quantenpunkte in der Tiefe der Poren angeregt werden. Aufgrund des hohen Aspektverhältnisses der Poren ~ 200 , beträgt die maximale Verkippung des Strahls gegenüber den Poren 0,29 Grad, damit die Quantenpunkte entlang der gesamten Tiefe angeregt werden können.

Der Aufbau zur Photolumineszenzspektroskopie der HgTe-Quantenpunkte im photonischen Kristall ist in Abbildung 6.6 dargestellt. Der Strahl eines Argon-Ionen-Lasers (Wellenlänge 488 nm) wird über ein Prisma an einer Buchkante des photonischen Kristalls parallel in die Poren eingekoppelt.

Dieses Prisma ist der zentrale Bestandteil des optischen Aufbaus. Es liegt auf dem Porenfeld

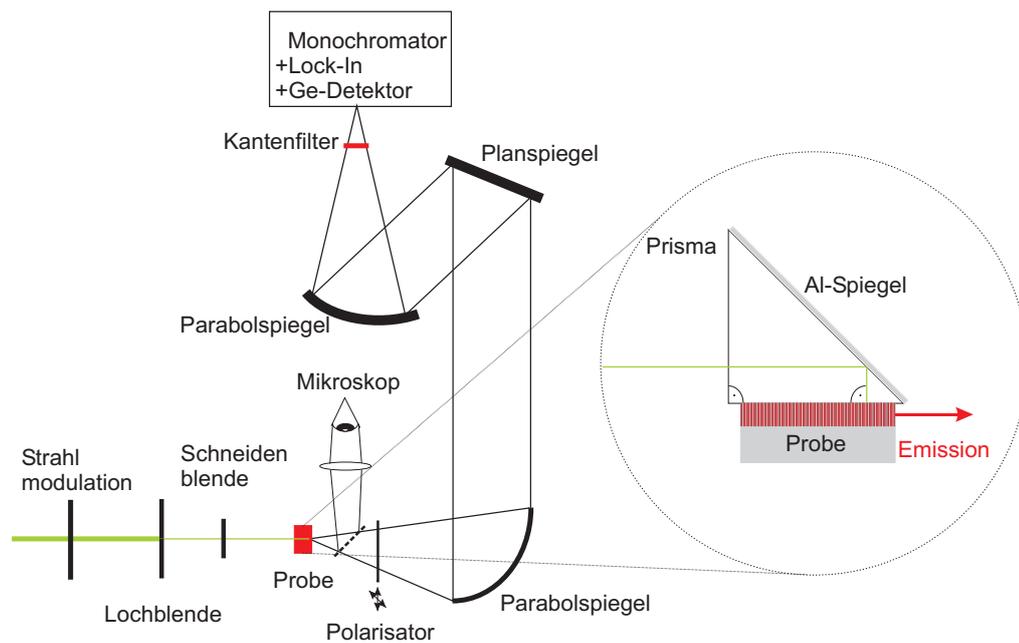


Abbildung 6.6: Schematischer Aufbau zur Detektion der Photolumineszenz der HgTe-Quantenpunkte im zweidimensionalen photonischen Kristall.

des photonischen Kristalls auf und ist auf der Diagonalfäche mit einer $5 \mu\text{m}$ starken Al-Schicht verspiegelt. Auf diese Weise wird der Laser bei senkrechtem Auftreffen auf die Vorderfläche des Prismas in die Poren eingekoppelt. Anhand des hexagonalen Reflexionsmusters (Kapitel 7) läßt sich die senkrechte Einkopplung justieren. Dazu wird der zentrale Reflex rückwärtig auf den Laserstrahl abgebildet. Bei einem Strahldurchmesser von $0,5 \text{ mm}$ und einer Weglänge von 1 m erreicht man so eine Genauigkeit bei der Verkippung, die der maximalen Verkippung zur vollständigen Tiefenanregung der Pore entspricht ($0,29 \text{ Grad}$).

Beim Auftreffen des Laserstrahls auf die Probenoberfläche wird dieser an der Porenöffnung gebeugt. Ein Teil des Lichtes wird jedoch entlang der Pore (ähnlich einem Hohlleiter) geführt. Die Größe der angeregten Fläche (und damit die Anzahl der angeregten Poren) wird mit einer Lochblende ($0,25 \text{ mm}$ bis $0,5 \text{ mm}$) festgelegt. Mit einer Schneidenblende wird der kreisförmige Querschnitt des Lasers auf einer Seite abgeschnitten, um eine Anregung der an der Bruchkante des photonischen Kristalls befindlichen Quantenpunkte zu verhindern.

Das aus der Bruchkante austretende Licht wird mit einem Spiegelsystem detektiert und auf den Spalt eines Gittermonochromators abgebildet. Dieses Spiegelsystem gewährleistet eine Abbildung ohne monochromatische und achromatische Abberation sowie ein vernachlässigbare Absorption im untersuchten Spektralbereich. Das verwendete holographische Gitter hat eine Blaze-Wellenlänge von $\lambda = 1000 \text{ nm}$ und 600 Linien/mm . Der Bereich spektraler Empfindlichkeit und damit der Detektionsbereich erstreckt sich von 700 nm bis 1700 nm . Die Detektion des spektral aufgelösten Signals erfolgt mit einem Stickstoff-gekühlten Germanium-pin-Detektor, der über einen Lock-In-Verstärker ausgelesen wird. Dazu wird der Laser mit einem mechanischen Chopper moduliert. Die Emission entlang der Poren sowie die Oberflächenemission des Siliziums wird über das Prisma ausgekoppelt und gelangt somit nicht in das Detektionssystem. Damit ist gewährleistet, daß nur das Licht detektiert wird, daß sich in der Periodizitätsebene des photonischen Kristalls ausbreitet. Mit Hilfe eines Polarisators kann die gewünschte Polarisation des detektierten Lichtes festgelegt werden.

Der untersuchte Probenort wird mit Hilfe eines Mikroskopes und eines Strahlteilers durch rückwärtige Rekonstruktion des Detektionsstrahlenganges eingestellt. Dabei ist die laterale Auflösung durch die Größe des Spiegelfokus festgelegt und beträgt etwa 0,5 mm.

Die Wahl einer Anregungswellenlänge, die sich energetisch zwischen den Bandkanten von HgTe und Silizium befindet, ist unzuweckmäßig, da die Absorption des HgTe in diesem Bereich vergleichsweise klein ist.

Dieser optische Aufbau minimiert somit die Verlustmechanismen bei der Anregung und gewährleistet eine Detektion der Lumineszenz interner Quantenpunktemitter in der Periodizitätsebene des zweidimensionalen photonischen Kristalls.

6.3.2 Lumineszenzspektroskopie an photonischen Kristallen.

Einstellung des spektralen Überlapps

Ein spektralen Überlapp zwischen HgTe-Emission und fundamentaler Bandlücke eines zweidimensionalen photonischen Kristalls mit einer Gitterkonstante von $a=700$ nm existiert nur für einen Radius $r > 0,4 a$. Das bedeutet, der Radius der geätzten Kristalle muß von 0,36 a auf mindestens 0,45 a vergrößert werden. Dazu wird das makroporöse Silizium thermisch oxidiert und anschließend mit HF chemisch geätzt (Kapitel 5). Durch mehrfaches Oxidieren und Ätzen wurde ein r/a -Verhältnis von 0,45 eingestellt. Dieser Prozeß wird mehrfach durchgeführt, da sonst durch die Volumenzunahme bei der Bildung des SiO_2 , zu starke Verspannungen die poröse Struktur zerstören können. Nach jedem Aufweitungsschritt wurde das r/a -Verhältnis durch den Vergleich der Reflexionsmessung mit der Bandstruktur bestimmt.

Der Radius $r=0,45 a$ bietet einen ausreichenden spektralen Überlapp mit dem Detektionsbe-

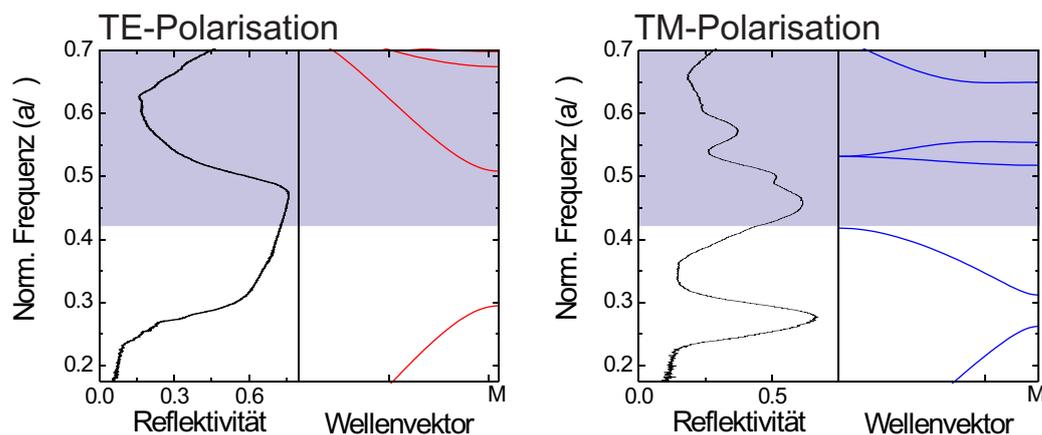


Abbildung 6.7: Vergleich von Reflexionsmessung und Bandstruktur eines zweidimensionalen photonischen Kristalls mit einem r/a -Verhältnis von 0,45 für a) TE-Polarisation; b) TM-Polarisation.

reich (in Abb. 6.7 blau dargestellt) und sorgt gleichzeitig noch für eine ausreichende Stabilität der Struktur (Porösität 73 Prozent). Der Detektionsbereich ist durch das verwendete Gitter des PL-Detektionssystems bei etwa $\lambda = 1700$ nm begrenzt. Abbildung 6.7 zeigt die Reflexionsmessungen an den aufgeweiteten Kristallen im Vergleich zur berechneten Bandstruktur. Der Detektionsbereich ist hellblau gekennzeichnet. Für die TE-Polarisation ist beispielsweise

nur die Detektion des Lumineszenzsignals an der oberen Kante der Bandlücke möglich. Die TM-Polarisation erlaubt die Detektion der zweiten Bandlücke, die gleichzeitig die Größe der vollständigen Bandlücke vorgibt.

Lumineszenzmessungen an der Bandkante

Nachdem der photonische Kristall auf das erforderliche r/a -Verhältnis eingestellt wurde, erfolgte die Infiltration der HgTe-Quantenpunktemitter eingebettet in PS-Nanoröhren. Um die Oberflächenemission und -absorption zu minimieren, wurde der an der Oberfläche befindliche HgTe/Polymerfilm entfernt.

Die polarisationsabhängigen Lumineszenzspektren in $\Gamma - M$ -Richtung sind in Abbildung 6.8 dargestellt. Um den Einfluß der photonischen Bandsstrukturen auf die Emission zu zeigen, wurden diese Spektren auf die Lumineszenz der HgTe-Quantenpunkte im freien Raum normiert. Für die TE-Polarisation ist bei ca. 1350 nm ein Abfallen des Lumineszenzsignals zu erkennen. Vergleicht man dieses Spektrum mit dem dazugehörigen Reflexionsspektrum, so ist im selben Bereich ein Anstieg der Reflektivität festzustellen. Dieser Anstieg entspricht der oberen Kante der photonischen Bandlücke. Von außen auf den Kristall auftreffendes Licht wird durch Interferenz total reflektiert. Für Quantenpunkte mit einer Emissionswellenlänge oberhalb 1350 nm bedeutet dies eine Unterdrückung der Emission in der Periodizitätsebene.

Die Emission für die TM-Polarisation zeigt ein ähnliches Verhalten, ein starker Intensitätsabfall der Lumineszenz bei 1450 nm koinzidiert mit einem hohen Reflexionssignal. Dieser spektrale Bereich oberhalb 1450 nm entspricht der Bandlücke (zwischen Band 2 und 3) der TM-Polarisation und gleichzeitig der kompletten Bandlücke. Außerdem ist bei 1300 nm ein Lumineszenzmaximum zu erkennen, welches durch die Auskopplung des Lichtes entlang der dort existierenden Bänder 3 und 4 hervorgerufen wird.

In beiden Fällen ist ein Anstieg der Lumineszenzintensität oberhalb 1600 nm zu verzeichnen. Dieser wird durch die stark abnehmende Empfindlichkeit des Gitters verursacht. Die Spektren werden nach der Messung auf die systemspezifische Korrekturfunktion normiert, was die drastische Zunahme des Signals erklärt.

Spektroskopie höherer Bänder

Die fundamentale Bandlücke unterdrückt die Emission innerhalb der Periodizitätsebene des zweidimensionalen photonischen Kristalls. Da aber die gesamte Bandstruktur die Emission modifiziert, müssen auch energetisch höher gelegene Bänder bzw. Stopbänder betrachtet werden. Da die spektrale Breite der HgTe-Lumineszenz begrenzt ist, muß die Bandstruktur des photonischen Kristalles verändert werden. Dafür wurden HgTe-Quantenpunkte in einen photonischen Kristall (Gitterkonstante 700 nm) mit einem r/a -Verhältnis von 0,36 infiltriert. Die im Detektionsbereich (blau) liegende Bandstruktur ist im Vergleich zur entsprechende Reflexionsmessung in Abbildung 6.9 dargestellt. Wie auch bei den Lumineszenzuntersuchungen an der fundamentalen Bandlücke, wurden die Lumineszenzspektren auf die Emission im freien Raum normiert. Da diese Lumineszenzspektren in einem Spektralbereich aufgenommen wurden, wo die Bandstruktur sehr viele Bänder aufweist, ist es notwendig, die PL-Spektren direkt mit der Bandstruktur zu vergleichen (Abb.6.11).

Im Unterschied zu einer Reflexionsmessung handelt es sich bei der internen Lichtemission nicht um das Auftreffen einer ebenen Welle. Unter der Annahme, daß die Emitter als Dipole (senkrecht zur Periodizitätsebene orientiert) beschrieben werden können, kann von einer radialsymmetrischen Abstrahlung (innerhalb der Periodizitätsebene) im freien Raum ausgegangen wer-

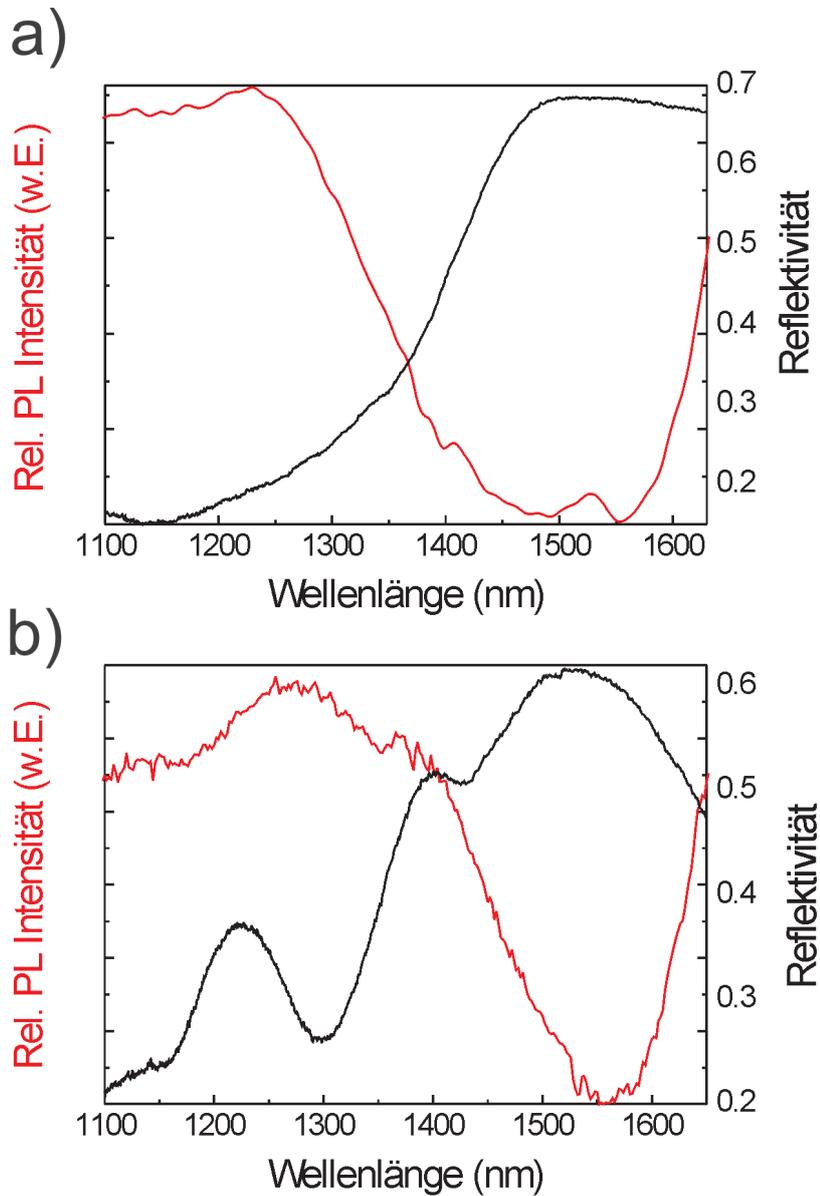


Abbildung 6.8: Vergleich von Photolumineszenzspektren der internen HgTe-Quantenpunkte und Reflexionsmessung eines zweidimensionalen photonischen Kristalls mit einem r/a -Verhältnis von 0,45 in $\Gamma - M$ -Richtung; a) TE-Polarisation; b) TM-Polarisation.

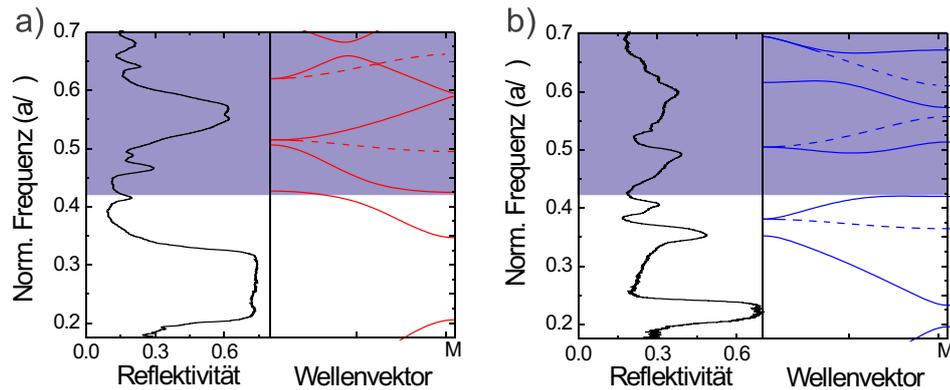


Abbildung 6.9: Vergleich von Reflexionsmessung und Bandstruktur eines zweidimensionalen photonischen Kristalls mit einem r/a -Verhältnis von 0,36 für a) TE-Polarisation; b) TM-Polarisation.

den (Die Annahme, daß die Emittter innerhalb der Periodizitätsebene abstrahlen, läßt sich damit begründen, daß ausschließlich das Licht in der Periodizitätsebene detektiert wird und somit alle anders orientierten Emittter vernachlässigt werden). Im Fernfeld eines solchen Punktemitters kann die Radialsymmetrie wieder mit einer ebenen Welle angenähert werden. Da die Emittter sich jedoch innerhalb des photonischen Kristalls befinden, kann ihre Abstrahlung immer noch als kreisförmig angenommen werden. Somit wird, anders als bei der ebenen Welle, keine Richtung ausgezeichnet und die Kopplungsbedingungen für die ebenen Wellen nicht zutreffen.

Im Fall der Lumineszenzuntersuchungen an der fundamentalen Bandlücke war ein kompletteres Verhalten von Reflexivität und Lumineszenz zu beobachten, da die ebene Welle der Reflexionsmessung an die Bänder in diesem Spektralbereich koppelt. Dies trifft für die höheren Bänder nicht mehr zu (Abb.6.10).

Die gemessenen Reflexionsspektren zeigen für die höheren Bänder starke Intensitätsunterschiede zur Berechnung der Reflexion (Abb. 5.6. Aus diesem Grund werden die Lumineszenzmessung im Bereich der höheren Bänder mit den berechneten Reflexionsspektren verglichen.

Für die TE-Polarisation (Abb. 6.11a) existieren im untersuchten Spektralbereich keine Bandlücken bzw. Stopbänder. Eine ebene Welle kann jedoch nicht an Band 4 koppeln (siehe Kopplungsbedingungen Kap. 5). Für die HgTe-Emittter besteht Einschränkung jedoch nicht. Daher ist für die TE-Polarisation ein Kopplung an Bänder 3, 4, 5 und 6 möglich. Die PL-Intensität läßt sich mit dem Anstieg der Bänder und damit anhand der projizierten Zustandsdicht (Abb. 2.4) erklären. Für geringe Anstiege der Bänder sind sowohl die Zustandsdichte als auch der effektive Brechungsindex hoch. Die Emittter innerhalb des Kristalls können, entsprechend der Zustandsdichte der Bänder, an die Bandstruktur koppeln, d.h. im Falle einer hohen Zustandsdichte nimmt die PL-Intensität zu und umgekehrt. Sehr flache Bänder erschweren jedoch die Auskopplung des Lichtes aus dem Kristall, da der Brechungsindexkontrast sehr hoch ist und das Licht an der Grenzfläche des Kristalles reflektiert wird [20]. Der Anstieg der PL-Intensität ab 1200 nm wird durch eine Kopplung der HgTe-Emission an Band 4 und 5 ermöglicht. Das bei 1400 nm auftretende PL-Maximum resultiert aus der Kopplung der Emittter mit Band 3. Der folgende Abfall der PL-Intensität (1500 nm - 1600 nm) ist durch den flachen Anstieg von Band 3 zu begründen. Oberhalb von 1600 nm können die Emittter an Band 2 einkoppeln - die PL-Intensität erhöht sich. Hierbei ist jedoch zu beachten, daß dieses Ansteigen der PL-Intensität (wie auch bei den Messungen an der fundamentalen Bandlücke) durch die spektrale Korrekturfunktion des Detektionssystems verursacht werden kann.

Im Fall der TM-Polarisation (Abb. 6.11b) existiert für die $\Gamma - M$ -Richtung zwischen Band 4 und 5 ein Stopband. Folglich ist die Reflektivität der ebenen Welle hoch, die PL-Intensität gering. Die ebene Welle koppelt an die Bänder 5 und 7 (Einbrüche in der Reflektivität), an die Bänder 6 und 8 hingegen nicht (Reflexionsmaxima). Für die HgTe-Emitter bestehen jedoch keine Einschränkungen in der Kopplung mit Bändern. Daher verhält sich die PL-Intensität entsprechend der Zustandsdichte und erreicht bei Band 5 ihr Maximum. Dieses ist am Rand der Brillouinzone sehr flach und hat damit eine hohe Zustandsdichte. Es kommt somit (bei ca. 1350 nm) zu einem Intensitätsverlust. Der Unterschied in den Kopplungsbedingungen für Emittter und ebene Welle wird insbesondere an Band 6 sichtbar. Die ebene Welle koppelt nicht, was zu einer hohen Reflektivität führt. Der Emittter hingegen koppelt, deshalb ist ein Plateau im PL Spektrum sichtbar. Das darauf folgende Stopband (zwischen Band 6 und 7) führt zu einer Verringerung der PL-Intensität.

Ähnlich wie bei den Reflexionsmessungen in Kapitel 5 wird durch das Spiegelsystem das Licht über deren Öffnungswinkel (16 Grad) integriert. Dadurch kommt es, aufgrund der winkelabhängigen Verschiebung der Bandstruktur, zu einer spektralen Verschmierung [70, 78] und somit zu einer Abflachung der Anstiegsflanken.

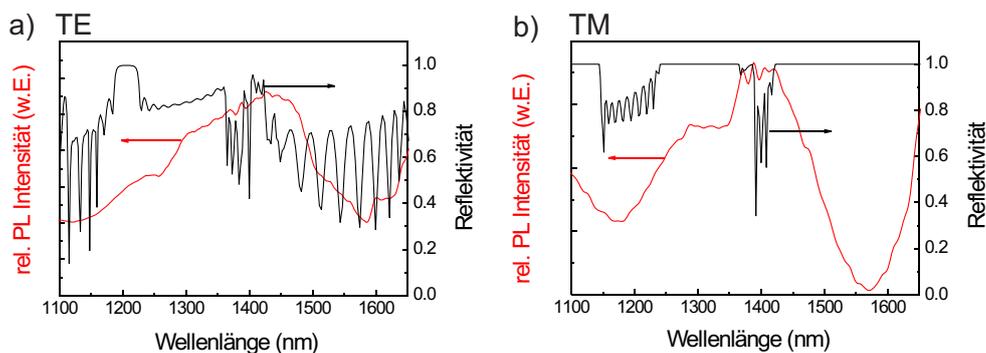


Abbildung 6.10: Vergleich von Photolumineszenzspektren der internen HgTe-Quantenpunkte und Reflexionsberechnungen eines zweidimensionalen photonischen Kristalls mit einem r/a -Verhältnis von 0,36 in $\Gamma - M$ -Richtung für a) TE-Polarisation; b) TM-Polarisation.

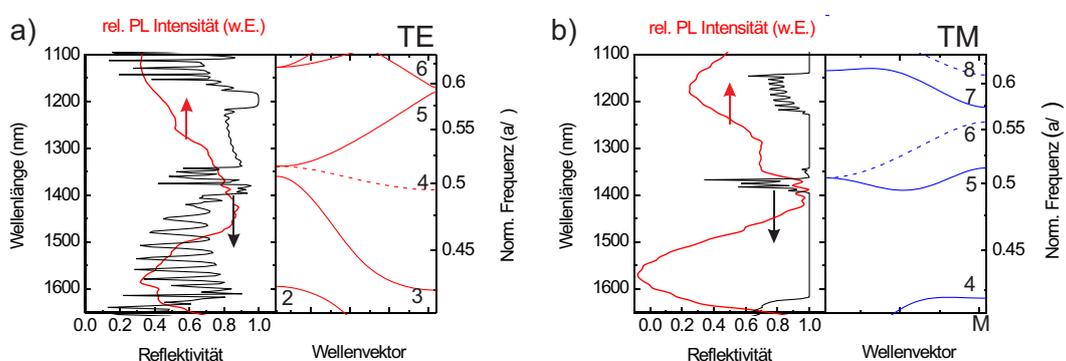


Abbildung 6.11: Vergleich der Photolumineszenzspektren und der Reflexionsberechnungen mit der zugehörigen Bandstruktur eines zweidimensionalen photonischen Kristalls mit einem r/a -Verhältnis von 0,36 in $\Gamma - M$ -Richtung für a) TE-Polarisation; b) TM-Polarisation.

In diesem Kapitel wurde beschrieben, daß sich 2D photonische Kristalle aus makroporösem Silizium mit internen Emittlern funktionalisieren lassen. Dazu wurde ein definierter Infiltrationsprozeß angewendet, bei dem HgTe-Quantenpunkt-Emitter, eingebettet in einer Polystyrolmatrix, an den Porenwänden positioniert werden. Ausgehend von Berechnungen der lokalen Zustandsdichte wurde eine Kopplung der Emission an Zustände der photonischen Bandstruktur nachgewiesen. Diese Kopplung unterscheidet sich von der einer äußeren ebenen Welle, da die HgTe-Quantenpunkte innerhalb des Kristalls als Dipole angesehen werden können. Damit ist eine experimentelle Untersuchung der Bandstruktur mit internen Emittlern möglich. So wurden der Bereich der fundamentalen Bandlücke sowie höhere Bänder der Bandstruktur mittels Photolumineszenz-Spektroskopie polarisationsabhängig charakterisiert.

7. Periodische Punktdefektstrukturen

7.1 Design und Herstellung

Die lithographische Vorstrukturierung während des Ätzprozesses ermöglicht ein gezieltes Auslassen von Poren. Eine fehlende Pore stellt aufgrund der Störung der Translationssymmetrie des Kristalls einen Defekt dar. Wie in Kapitel 2 beschrieben, entstehen dadurch innerhalb der photonischen Bandlücke energetisch isolierte Zustände. Die Feldverteilungen dieser Zustände weisen zudem eine starke Lokalisierung am Punktdefekt auf. Ein einzelner Punktdefekt führt jedoch dazu, daß der Wellenvektor \vec{k} keine gute Quantenzahl mehr darstellt, da die Translationssymmetrie des Kristalls gebrochen ist und eine Bandstruktur im strengen Sinne nicht mehr existiert.

Mit einer periodischen Anordnung von Punktdefekten ergeben sich mehrere Vorteile:

1. Die Berechnung der Bandstruktur ist mit der bisher verwendeten Methode der ebenen Wellen weiterhin möglich. Allerdings ist die 1. Brillouin-Zone im reziproken Raum um den Faktor n kleiner, wenn $D = n \cdot a$ der Abstand der Punktdefekte und a die Gitterkonstante des photonischen Kristalls ist.
2. Eine optische Messung an einer Bruchkante des Porenfeldes wird dahingehend vereinfacht, daß ein Punktdefekt einen maximalen Abstand D von einer beliebigen Bruchkante hat. Innerhalb der photonischen Bandlücke kann Licht, aufgrund des evaneszierenden Feldanteils, bis zu einer gewissen Tiefe in den Kristall eindringen bzw. sich über eine bestimmte Distanz im Kristall ausdehnen. Befindet sich nun innerhalb dieser Distanz ein Punktdefekt, so ist es möglich von außen an dessen Moden anzukoppeln bzw. Licht aus diesem Defekt auszukoppeln.
3. Eine Variation der Defektkonzentration und damit ihres Abstandes D erlaubt die Untersuchung einer Wechselwirkung zwischen den Punktdefekt, da diese durch den Überlapp der evaneszierenden Feldverteilungen miteinander interagieren können [93, 51].

Ein weiterer Aspekt, der die Struktur des einzelnen Punktdefektes bestimmt, ist die Realisierung interner Lichtmitter. Befindet sich ein solcher Emitter innerhalb der Kavität, so ist es möglich selektiv an die Defektmoden anzukoppeln, wodurch eine Modifikation seines Emissionsverhaltens hervorgerufen wird.

Abbildung 7.1 zeigt einen einzelnen Punktdefekt. Aufgrund des lithographisch-definierten Auslassens von Poren ist die Form des Defektes durch die Kristallsymmetrie vorgegeben. Dieser Punktdefekt besteht aus einem hexagonalen Ring von sechs ausgelassenen Poren um eine zentrale Pore. Ähnliche Strukturen wurden bereits untersucht [60, 47], jedoch handelt es sich dabei um einzelne Punktdefekte bzw. um lineare Anordnungen von Punktdefekten. Ein solches Hexagon von sieben fehlenden Poren wird in der Literatur als H2-Kavität (Seitenlänge 2 Gitterkonstanten) bezeichnet. Dieser Defekt unterscheidet sich jedoch durch die zentrale Pore von

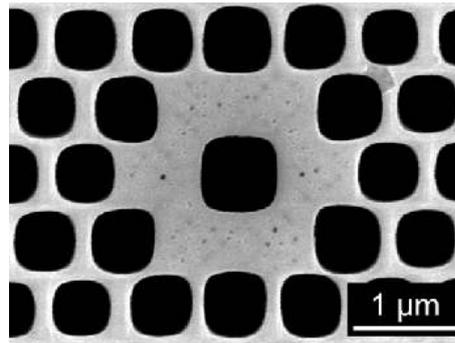


Abbildung 7.1: Rasterelektronenmikroskopische (REM) Aufnahme eines einzelnen hexagonalen Punktdefektes in einem hexagonalen, zweidimensionalen photonischen Kristalls (Gitterkonstante 700 nm)

der H2-Kavität.

Ein solcher Defekt erzeugt zwei unterschiedliche Störungen im Kristall. Die 6 fehlenden Poren verursachen zusätzliches Hochindexmaterial am jeweiligen Gitterplatz und entsprechen damit den in Kapitel 2 beschriebenen dielektrischen Defekten.

Der zweite Defekttyp wird durch den Ätzprozeß verursacht. Der in Kapitel 5 beschriebene Proximity-Effekt (zusätzliche freie Ladungsträger in der Umgebung fehlender Poren) führt zu einer Vergrößerung der Radii angrenzender Poren sowie der zentralen Pore. Ausmessungen der Porenradii anhand von REM-Bildern haben eine Vergrößerung um 10 Prozent für angrenzende Poren ergeben. Die zentrale Pore ist sogar um 30 Prozent größer als eine Pore im ungestörten Kristall, da sie die zusätzlichen freien Ladungsträger von 6 fehlenden nächsten Nachbarporen verkonsumieren kann. Die Vergrößerung der Randporen verursachen damit weniger Hochindexmaterial am jeweiligen Gitterplatz und entsprechen somit den beschriebenen (Kap.2) Luftdefekten.

Die lithografische Vorstrukturierung großflächiger Porenfelder erlaubt die Herstellung periodischer Überstrukturen im zweidimensionalen Kristall. Auf diese Weise lassen sich unterschiedliche Defektkonzentrationen durch eine Variation des Porenabstandes realisieren. Es wurden Defektkonzentrationen von $1.86 \cdot 10^4 \text{cm}^{-2}$ (entspricht einem Abstand von 13 Gitterkonstanten in Γ -K Richtung) bis $1.26 \cdot 10^5 \text{cm}^{-2}$ (entspricht einem Abstand 5 Gitterkonstanten in Γ -K Richtung) (Abb.7.2). Die Punktdefekte sind ebenfalls in einem hexagonalen Gitter angeordnet, um eine Symmetriebrechung und damit eine mögliche Aufspaltung entarteter Zustände zu vermeiden.

7.2 Strukturelle Eigenschaften periodischer Punktdefekte

Zur strukturellen Charakterisierung des Übergitters der Punktdefekte, eignet sich ein optisches Verfahren, das dem, aus der Festkörperphysik bekannten, rückwärtigen Laue-Verfahren entspricht. Ein kollimierter Laserstrahl fällt senkrecht auf das Oberflächengitter des zweidimensionalen photonischen Kristalls. Da die Wellenlänge des Lasers (488 nm) kleiner ist als die Oberflächengitterkonstante (700 nm), treten nach der Bragg-Gleichung

$$2a \sin \Theta_k = m \lambda_{\text{Laser}} \quad (7.1)$$

unter dem Winkel Θ_k rückwärtige Reflexe auf. Diese Reflexe werden auf einen ebenen Schirm projiziert (Abb.7.3). Für einen ungestörten Kristall ergibt sich ein um 90° gedrehtes hexagonales Gitter (Gitterkonstante a^*). Ein Vergleich mit der Fouriertransformation eines REM-Bildes

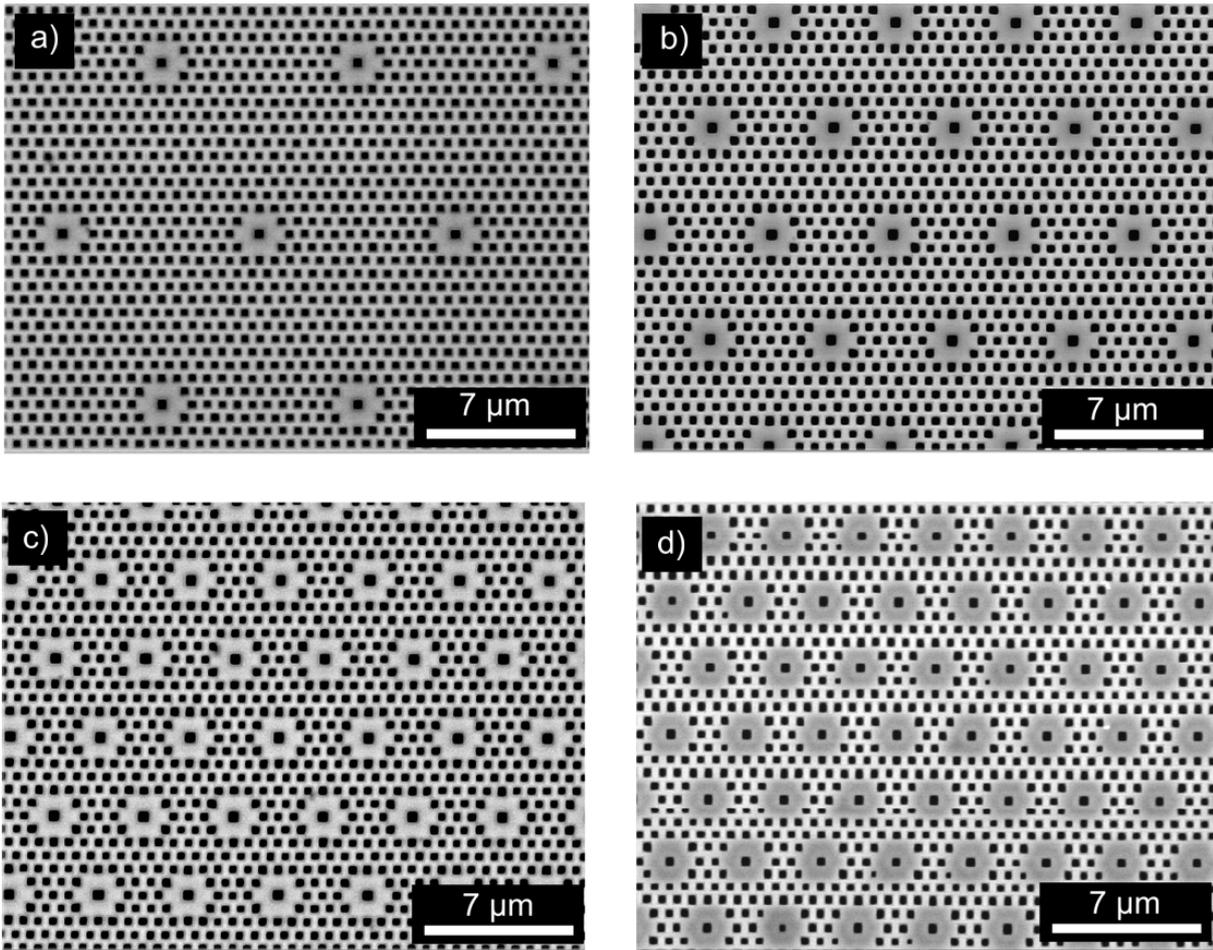


Abbildung 7.2: Variation der Defektkonzentration durch unterschiedliche Abstände in Γ -K Richtung; a) $1.86 \cdot 10^4 \text{cm}^{-2}$, 13 Gitterkonstanten; b) $4.91 \cdot 10^4 \text{cm}^{-2}$, 8 Gitterkonstanten; c) $8.73 \cdot 10^4 \text{cm}^{-2}$, 6 Gitterkonstanten; d) $1.26 \cdot 10^5 \text{cm}^{-2}$, 5 Gitterkonstanten.

zeigt, daß dieses Verfahren einer Abbildung des hexagonalen Gitters in den reziproken Raum entspricht. Bei der Oberflächenbeugung an einem photonischen Kristalls mit Punktdefekten (Defektabstand 8 Gitterkonstanten) entsteht ein zusätzliches hexagonales Muster zwischen den Reflexen des ungestörten Kristalls (Abb.7.4c). Der Abstand der Beugungsreflexe beträgt bei diesem Beispiel $a^*/8$. Diese Reflexe entsprechen damit im Realraum einem hexagonalen Gitter mit einer Gitterkonstante $8a$, dem Gitter der Punktdefekte. Die Verzerrung dieses Beugungsmusters, wie auch des ursprünglichen Beugungsbildes entsteht aufgrund der stereographischen Projektion auf einen ebenen Schirm. Das hexagonale Gitter wird dadurch auf eine Schar von Hyperbeln abgebildet [64].

Eine Abbildung auf eine Kugeloberfläche mit dem Radius, der dem Abstand zwischen Probe und Schirm entspricht, ermöglicht eine korrekte Darstellung des Beugungsmusters (Abb.7.4d). Die Beugungsbilder unterschiedlicher Defektstrukturen sind in Abbildung 7.5 dargestellt. Der Abstand der Reflexe des Defektübergitters beträgt a^*/n in Γ -K Richtung, für $D = n \cdot a$. Vergleicht man die Laserbeugungsreflexe mit der allgemeinen Beugungsgleichung für periodische Strukturen,

$$\rho = \frac{1}{V} \sum_{\alpha} e^{iG \cdot r_{\alpha}} \int \rho_{\alpha}(r') e^{iG \cdot r'} dr' = \frac{1}{V} \sum_{\alpha} e^{iG \cdot r_{\alpha}} \cdot f_{\alpha} \quad (7.2)$$

(V - Einheitsvolumen, G - reziproker Gittervektor, ρ_{α} - atomare Streudichte) [31], so entsprechen diese Reflexe dem Strukturfaktor der Streudichte ρ . Eine Größe analog zum Atomfaktor f_{α}

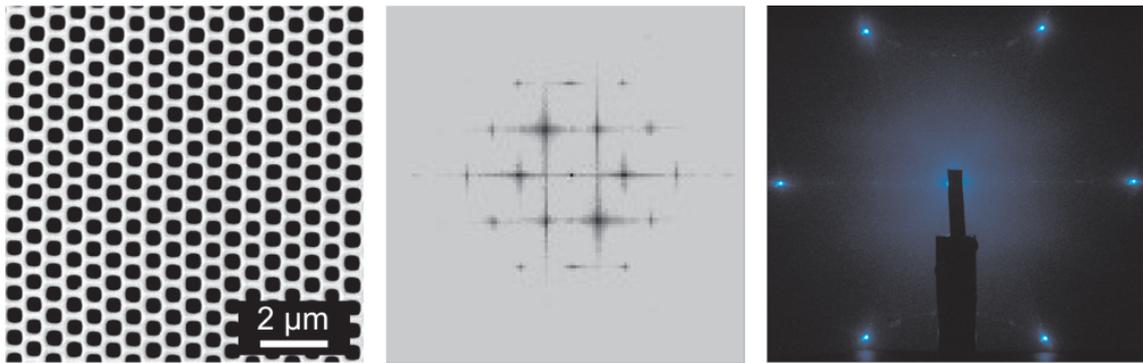


Abbildung 7.3: a) REM-Aufnahme eines ungestörten photonischen Kristalls; b) Fouriertransformation von a); c) rückwärtige Bragg-Reflexe des Lasers vom Oberflächengitter.

läßt sich prinzipiell auch ermitteln, da die Resonatoren mit der Laserwellenlänge auflösbar sind. Allerdings ist die räumliche Auflösung der hier verwendeten Kamera dafür nicht hoch genug. Somit läßt sich ein aus der Festkörperphysik bekanntes Verfahren zur strukturellen Charakterisierung photonischer Kristalle adaptieren. Mit dieser Methode ist eine Charakterisierung der Periodizität des Oberflächengitters möglich. Aussagen zur Struktur in der Tiefe können jedoch nicht getroffen werden, dafür muß die Beugung in einem Transmissionsaufbau betrachtet werden. Für photonische Kristalle aus Silizium ist dieser Aufbau jedoch nur für Gitterkonstanten $> 1,1 \mu\text{m}$ sinnvoll, da sonst aufgrund der Absorption des Siliziums kein Licht transmittiert wird.

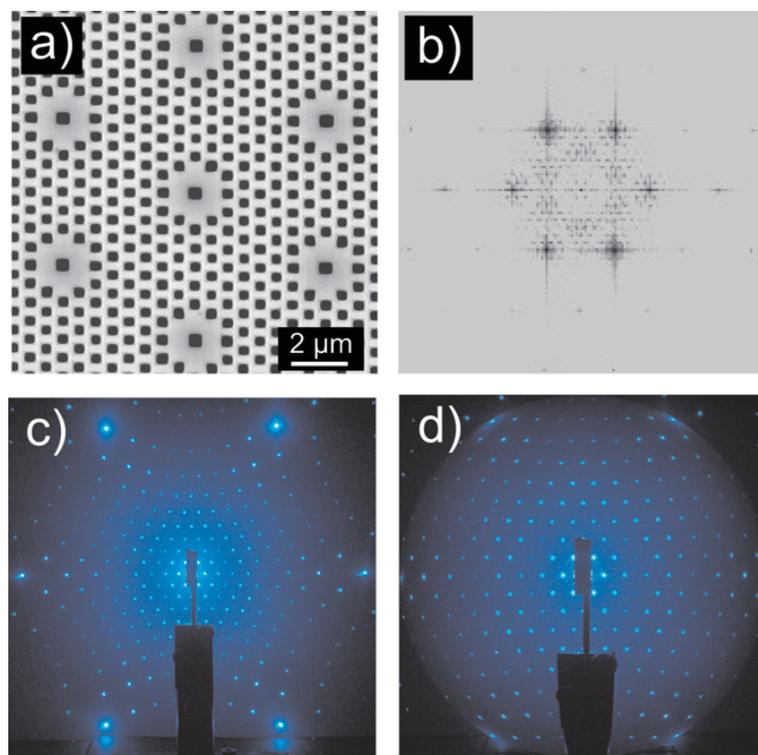


Abbildung 7.4: a) REM-Aufnahme eines photonischen Kristalls mit periodischen Punktdefekten (Abstand 8 Gitterkonstanten); b) Fouriertransformation von a); c) rückwärtige Bragg-Reflexe des Lasers vom Oberflächengitter; d) Projektion des ebenen Beugungsmusters auf eine Kugeloberfläche.

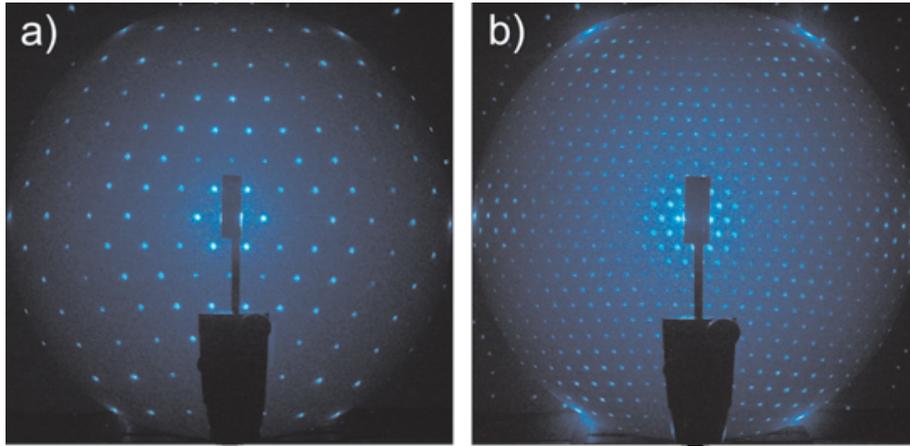


Abbildung 7.5: a) Projiziertes Laser-Beugungsbild eines photonischen Kristalls mit periodischen Punktdefekten (Abstand 6 Gitterkonstanten); b) wie a) (Abstand 13 Gitterkonstanten).

7.3 Theoretische Modellierung

Um die experimentellen Ergebnisse mit Bandstrukturrechnungen vergleichen zu können, ist es notwendig, die vorhandene Struktur so gut wie möglich in den Algorithmus zu implementieren. Das benutzte MIT-Package [38] geht dafür von einer Einheitszelle im Realraum aus, so daß sich durch geometrische Konstruktion der entsprechenden Einheitszelle die gewünschte Struktur berechnen läßt. Für den ungestörten hexagonalen Kristall wird ein Zylinder mit $\epsilon = 1$ in einem umgebenden Medium mit $\epsilon = 11.6$ periodisch fortgesetzt.

Das Übergitter der Punktdefekte läßt sich durch den Aufbau einer Superzelle modellieren (Abbildung.7.6). Die Größe einer solchen Superzelle entspricht dabei genau dem Abstand der Defekte in Γ -K Richtung. Dabei lassen sich Radius und Position jeder einzelnen Pore definieren, so daß auch die unterschiedlichen Radien der umgebenden und zentralen Poren berücksichtigt werden können. Durch eine periodische Fortsetzung entlang der Basisvektoren des hexagonalen Gitters, $\vec{b}_1 = (\sqrt{3}/2, 1/2)a$, $\vec{b}_2 = (\sqrt{3}/2, -1/2)a$ läßt sich die existierenden Punktdefektstrukturen exakt nachbilden. Für die Darstellung einer solchen Struktur im reziproken Raum existieren unterschiedlich große Brillouin-Zonen. Die erste Brillouinzone des ungestörten hexagonalen Kristalls endet am M-Punkt bei $\vec{k}_M = \pi/a$. Für das Punktdefektgitter befindet sich dieser Punkt jedoch bei $\vec{k}_M = \pi/n \cdot a$, wenn $D = n \cdot a$ der Abstand der Punktdefekte im Realraum ist. Die 1. Brillouin-Zone des Gitters der Punktdefekte ist also um den Faktor n kleiner.

Daraus ergibt sich ein Problem bei der Darstellung von Bandstrukturen. Abbildung 7.7 zeigt Bandstrukturen des ungestörten Kristall für unterschiedlich große Superzellen. Im reduzierten Zonenschema erfolgt am Rand der 1. Brillouin-Zone eine Zurückfaltung der Bänder (Subtraktion eines reziproken Wellenvektors). Aufgrund verschiedener Brillouin-Zonen entstehen nun unterschiedlich viele Bänder für die einzelnen Superzellen. Die Abbildung der Bänder in das reduzierte Zonenschema ist jedoch nicht eineindeutig und kann daher nicht uneingeschränkt umgekehrt ausgeführt werden. Da es sich jedoch um einen ungestörten Kristall handelt, dürfen sich die physikalischen Eigenschaften nicht ändern. Dies läßt sich sehr gut an der konstanten Lage der photonischen Bandlücke erkennen. Die Frequenzeigenwerte werden lediglich auf die Wellenvektoren \vec{k} abgebildet, welche die kleinere Brillouin-Zone bilden.

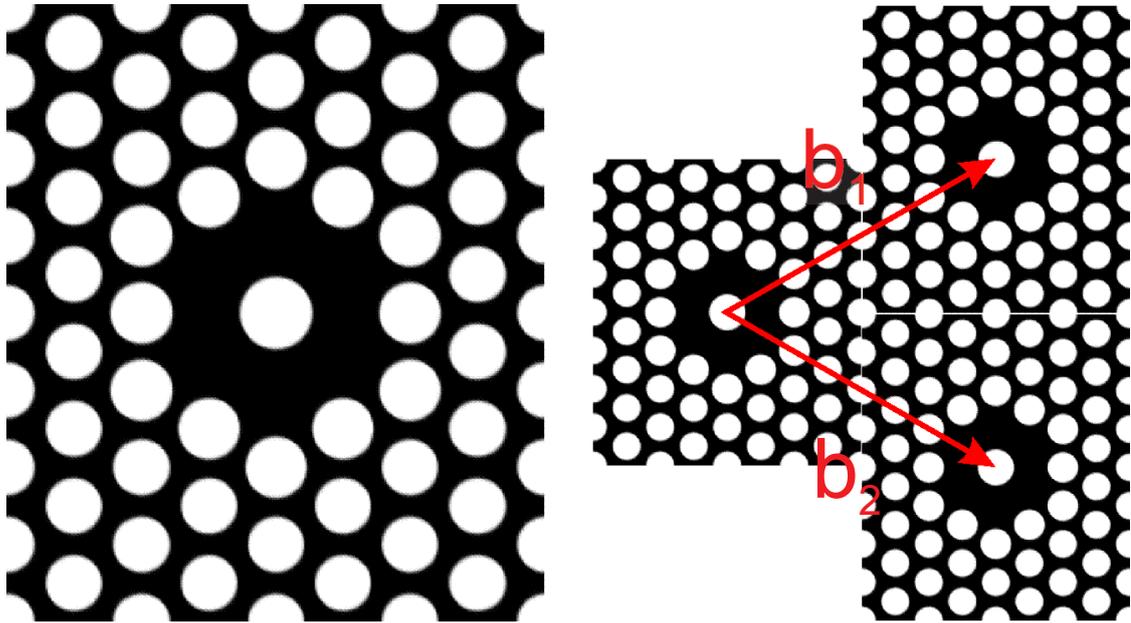


Abbildung 7.6: Superzelle eines Punktdefektgitters (Abstand 4 Gitterkonstanten) zur Berechnung der Bandstruktur bzw. der Feldverteilungen.

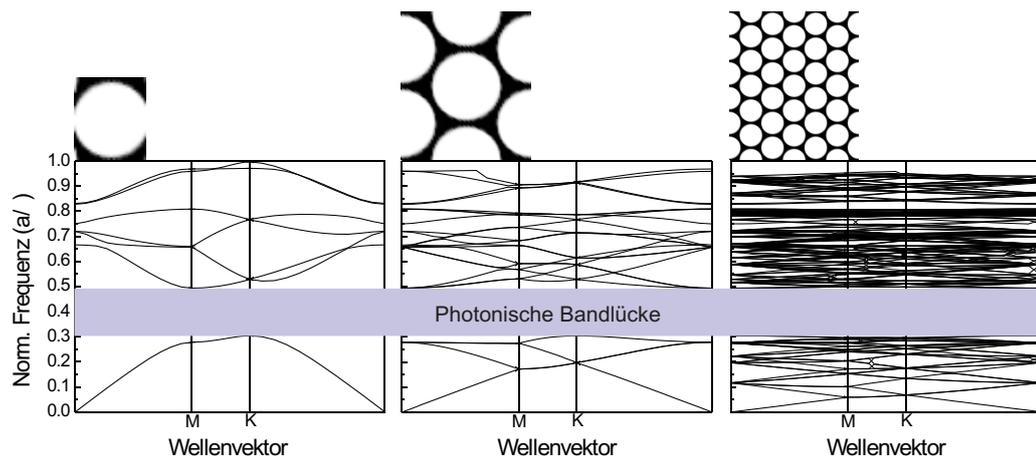


Abbildung 7.7: Bandstrukturen des ungestörten hexagonalen Kristalls für unterschiedlich große Superzellen.

7.4 Optische Eigenschaften periodischer Punktdefekte

Zur optischen Charakterisierung der Punktdefektstrukturen wurden, wie auch bei den ungestörten Kristallen, Reflexionsmessungen mit dem IR-Mikroskop und dem FTIR-Spektrometer durchgeführt.

Vergleicht man die Reflexionsspektren eines ungestörten Kristalls und eines Kristalls mit Punktdefekten niedriger Konzentration ($1.86 \cdot 10^4 \text{cm}^{-2}$, Abstand 13 Gitterkonstanten), so sind im Bereich hoher Reflektivität (fundamentale Bandlücke) Einbrüche zu erkennen. Eine Gegenüberstellung mit der entsprechenden Bandstruktur zeigt auf, daß diese Einbrüche eine spektrale Übereinstimmung mit Defektzuständen innerhalb der Bandlücke aufweisen. Diese Defektzustände sind diskrete Niveaus innerhalb der Bandlücke. Das in den Kristall eindringende Licht wird im Spektralbereich der fundamentalen Bandlücke nicht zwangsläufig reflektiert. Es koppelt an Resonatoren, die sich sehr dicht an der Bruchkante der Poren befinden. Die erhöhte Reflexion des Lichtes durch flache Bänder, aufgrund des hohen Brechungsindexkontrastes, trifft in diesem Fall nicht zu (Kapitel 5). Es handelt sich hier um die Kopplung evaneszierender Wellen an die Resonatoren innerhalb ihrer Eindringtiefe [60, 93].

Eine Erhöhung der Defektkonzentration auf $4.91 \cdot 10^4 \text{cm}^{-2}$ (Abstand 8 Gitterkonstanten) führt

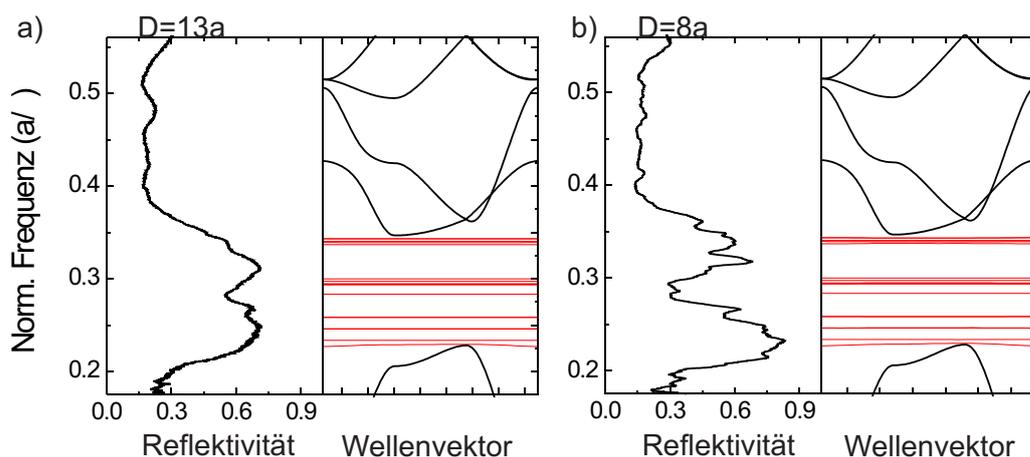


Abbildung 7.8: FTIR-Messungen an periodischen Defektstrukturen in photonischen Kristallen (TE-Polarisation, Γ -M Richtung) a) Defektabstand 13 Gitterkonstanten b.) Defektabstand 8 Gitterkonstanten.

zum Auftreten weiterer Einbrüche und zu einer Vertiefung der bereits bestehenden Einbrüche (Abb. 7.8). Auftreffendes Licht kann entlang der Bruchkante an mehr Resonatoren ankoppeln. Die Defektzustände sind nach wie vor diskrete Niveaus innerhalb der Bandlücke.

Nach einer weiteren Erhöhung der Defektkonzentration auf $1.26 \cdot 10^5 \text{cm}^{-2}$ (Abstand 5 Gitterkonstanten) sind im spektralen Bereich der fundamentalen Bandlücke separate Maxima der Reflexivität zu erkennen (Abb.7.9). Ein Vergleich zur Bandstrukturrechnung zeigt, daß sich aus den, bisher diskreten, Defektzuständen Bänder formieren.

Um dieses Verhalten zu extrapolieren, wurde eine Bandstruktur für eine Defektkonzentration $1.96 \cdot 10^5 \text{cm}^{-2}$ (Abstand 4 Gitterkonstanten) berechnet. Im Spektralbereich der Bandlücke haben sich aus den diskreten Niveaus Gruppen von Bändern formiert. Zwischen diesen Bändern existieren lediglich noch zwei kleinere Bandlücken (0,2475 - 0.2495 und 0,2985 - 0,3249). Außerhalb des Bereiches der fundamentalen Bandlücke formieren sich weitere Bandlücken (0,3588 - 0,3621; 0.3681 - 0.3741; 0,4027 - 0,4045).

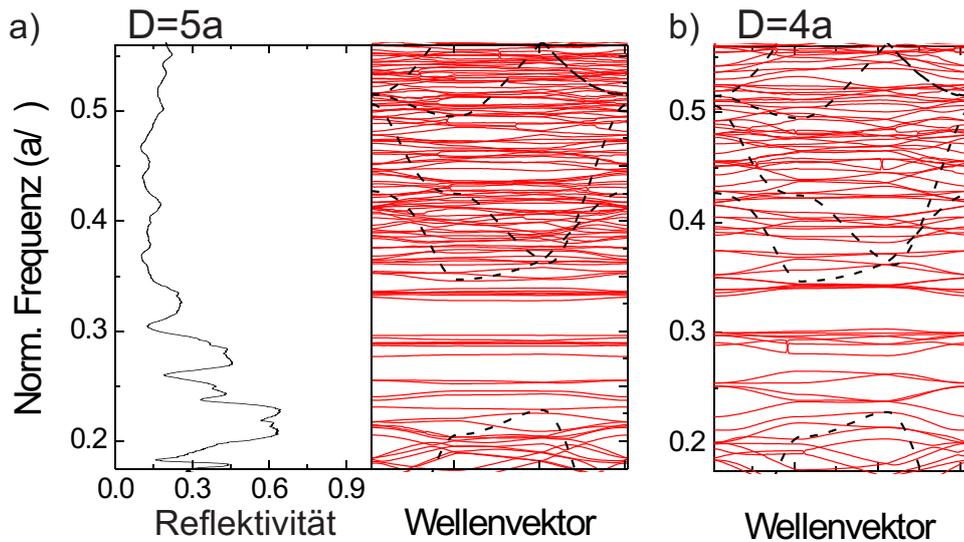


Abbildung 7.9: a) FTIR-Messung an einer periodischen Defektstruktur in einem photonischen Kristall (TE-Polarisation, Γ -M Richtung) Defektabstand 5 Gitterkonstanten b.) Bandstruktur für einen Defektabstand von 4 Gitterkonstanten.

Betrachtet man das, durch die schrittweise Erhöhung der Defektkonzentration, entstandene Gitter, so handelt es sich nicht mehr um Störungen durch isolierte Defekte. Die Gitterperiodizität weist starke Veränderungen gegenüber dem Ausgangsgitter auf. Aus zunächst diskreten Niveaus formieren sich bei einer Annäherung der Punktdefekte Bänder. Die resultierende Bandstruktur weist, anstelle der breiten Bandlücke (49 Prozent, TE-Polarisation), mehrere kleine Bandlücken auf. Diese Veränderung der Bandstruktur soll im nächsten Abschnitt quantitativ analysiert werden.

7.5 Lokalisierte Zustände

7.5.1 Lokalisierung der Felder

Um die Lokalisierung der Resonanzmoden darzustellen, wurde die Feldverteilung innerhalb der Supercelle berechnet. In Abbildung 7.10 sind die z-Komponenten des magnetischen Feldes (TE-Polarisation, Γ -Punkt) für einen Defektabstand von 8 Gitterkonstanten dargestellt.

Die 18 Resonanzmoden (Bandindex 65-83) innerhalb der Bandlücke sind eindeutig durch die Konzentration der Feldverteilung um den Punktdefekt zu erkennen. Außerhalb der photonischen Bandlücke entspricht die Feldverteilung einer ausgedehnten Welle über die ganze Supercelle. Das Licht kann damit im Kristall propagieren.

Einen Spezialfall stellt die Feldmode 64 dar, da das zugehörige Band nur für die Hochsymmetriepunkte M und K innerhalb der Bandlücke liegt. Am Γ -Punkt befindet sich die Bandfrequenz unterhalb der photonischen Bandlücke.

Um die Energielokalisierung quantitativ zu beschreiben, wurde der Anteil der Gesamtenergie $U = U_E + U_H = \int d\vec{r} \epsilon |E|^2 + |H|^2$ der Felder berechnet, der sich innerhalb des Resonators befindet. Das Volumen des Resonators erstreckt sich über die zentrale Pore, den Ring der sechs

H_z , Superzelle 8×8
 $r/a=0,36$, TE-Polarisation

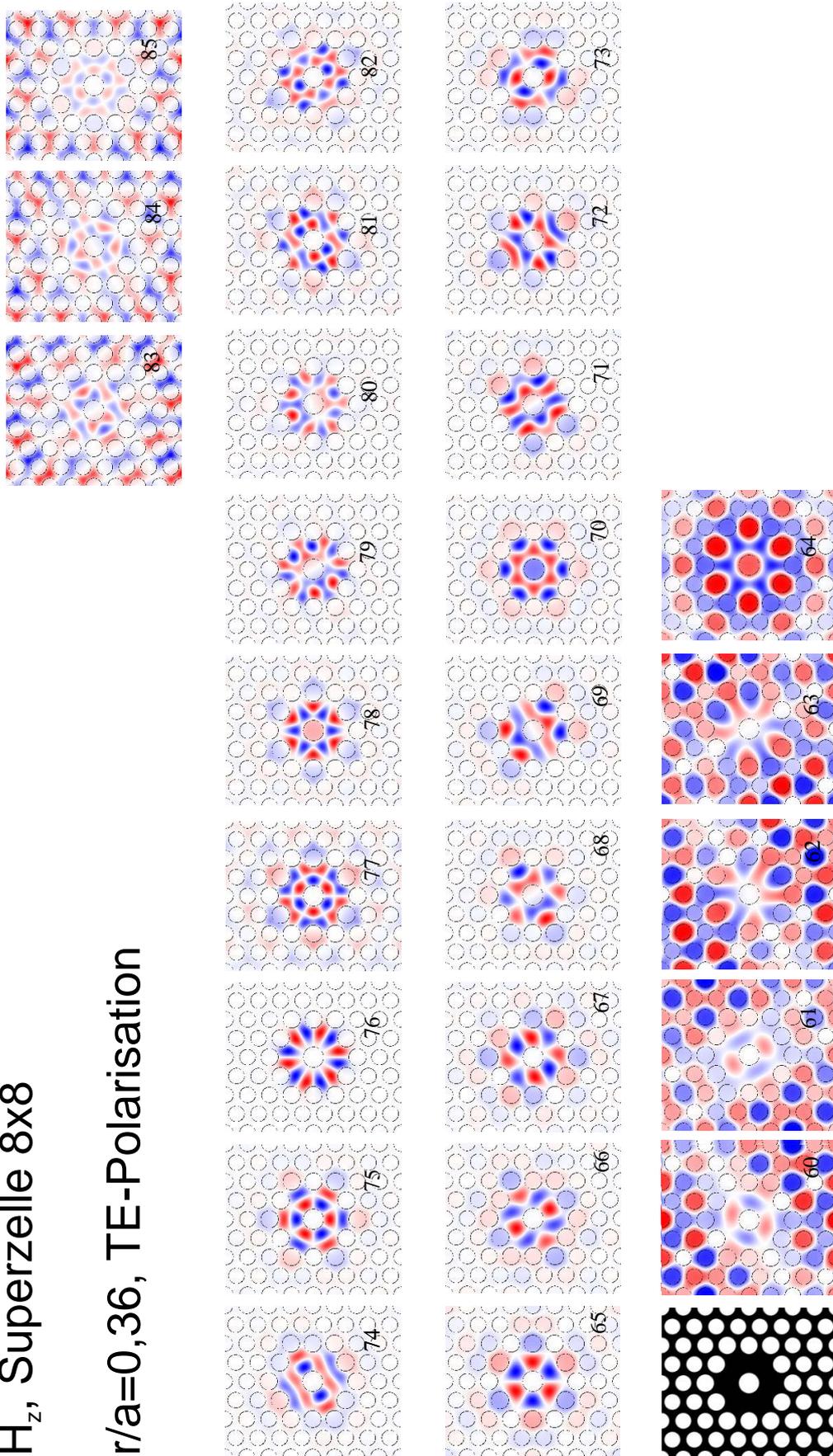


Abbildung 7.10: Feldverteilung des H-Feldes (z-Komponente, TE-Polarisation) entlang der Poren für Bänder im Bereich der photonischen Bandlücke (Berechnung der Feldverteilungen R. Hillebrand)

fehlenden Poren und den Ring der angrenzenden Poren, da diese ebenfalls Defektzustände verursachen. Das Integrationsvolumen wurde dabei mit einem Kreis (Radius $2a$) um die zentrale Pore angenähert. Die gesamte Feldenergie innerhalb der Superzelle ist auf 1 normiert. Abbildung 7.11 zeigt die Konzentration dieses Energieanteils innerhalb der photonischen Bandlücke, welche durch diese Berechnung eindeutig reproduziert wird. Um Vergleiche zu resonatorspe-

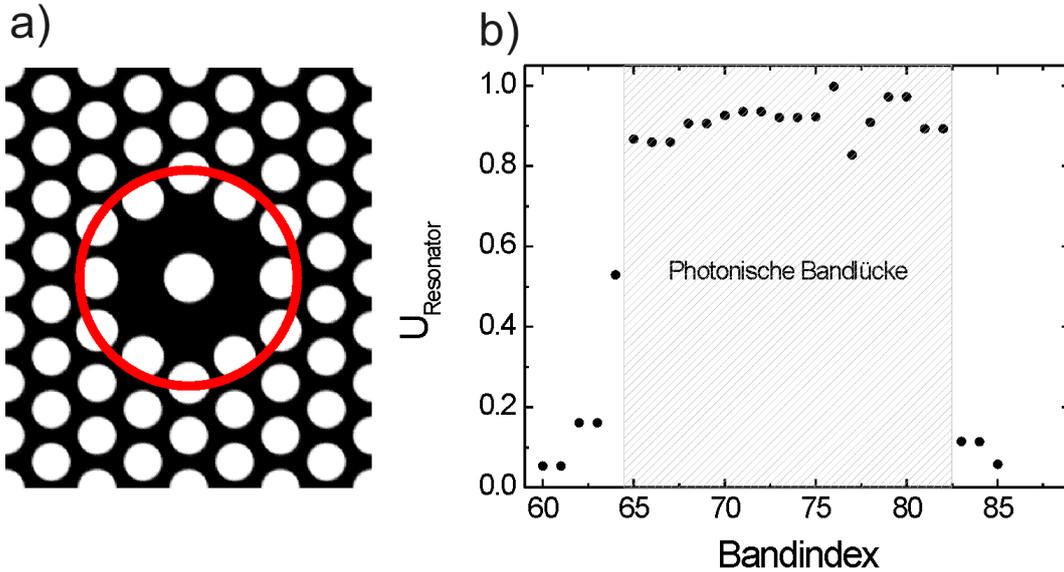


Abbildung 7.11: a) Integrationsvolumen innerhalb der Superzelle; b.) Feldenergie innerhalb des Integrationsvolumens des Resonators.

zifischen Größen ziehen zu können, kann man einen zeitunabhängigen Q-Faktor angeben. Der Q-Faktor ist als Verhältnis zwischen der im Resonator gespeicherten Energie U und dem Oberflächenstrom der Energie P definiert. Bei der durchgeführten Berechnung der Feldenergie für eine Superzellen handelt es sich um zeitlich gemittelte Werte. Für eine Superzelle kann jedoch angenommen werden, daß die über die Oberfläche des Resonators abfließende Energie der Energie außerhalb des Resonators entspricht. Der Q-Faktor ist somit durch das Verhältnis der Energieanteile innerhalb und außerhalb des Resonators angegeben werden (Gl. 7.3). Es handelt sich dabei um den Q-Faktor der einzelnen Superzelle. Eine solche Definition über zeitunabhängige Größen ist insofern sinnvoll, als das der Q-Faktor selber zeitunabhängig sein muß.

$$Q = \omega_0 \frac{U}{P} = \frac{U_{\text{Resonator}}}{U_{\text{außen}}} \quad (7.3)$$

Die Anteile der Feldenergie innerhalb bzw. außerhalb des Resonators sind dabei wie folgt definiert:

$$U_{\text{Resonator}} = \frac{1}{V_{\text{Resonator}}} \int_{V_{\text{Resonator}}} dV' U(\vec{r}) \quad (7.4)$$

$$U_{\text{außen}} = \frac{1}{V_{\text{außen}}} \int_{V_{\text{außen}}} dV' U(\vec{r}) \quad (7.5)$$

Dabei ist zu beachten, daß es sich hier um einen zweidimensionalen Q-Faktor handelt, da nur eine Energielokalisierung innerhalb der Periodizitätsebene erfolgt. Der Zusammenhang mit dem dreidimensionalen Q-Faktor ist

$$\frac{1}{Q_{3D}} = \frac{1}{Q_{2D}} + \frac{1}{Q_{\text{vert}}}, \quad (7.6)$$

mit dem vertikalen Q-Faktor Q_{vert} [88, 87].

Abbildung 7.12 zeigt diesen Q-Faktor für eine Superzelle, die einem Defektabstand von 8 Gitterkonstanten entspricht. Die photonische Bandlücke ist hierbei wiederum klar zu erkennen. Der höchste berechnete Q-Faktor beträgt 1379 für Bandindex 76. Die übrigen Q-Faktoren innerhalb der Bandlücke sind ca. 2 Größenordnungen kleiner.

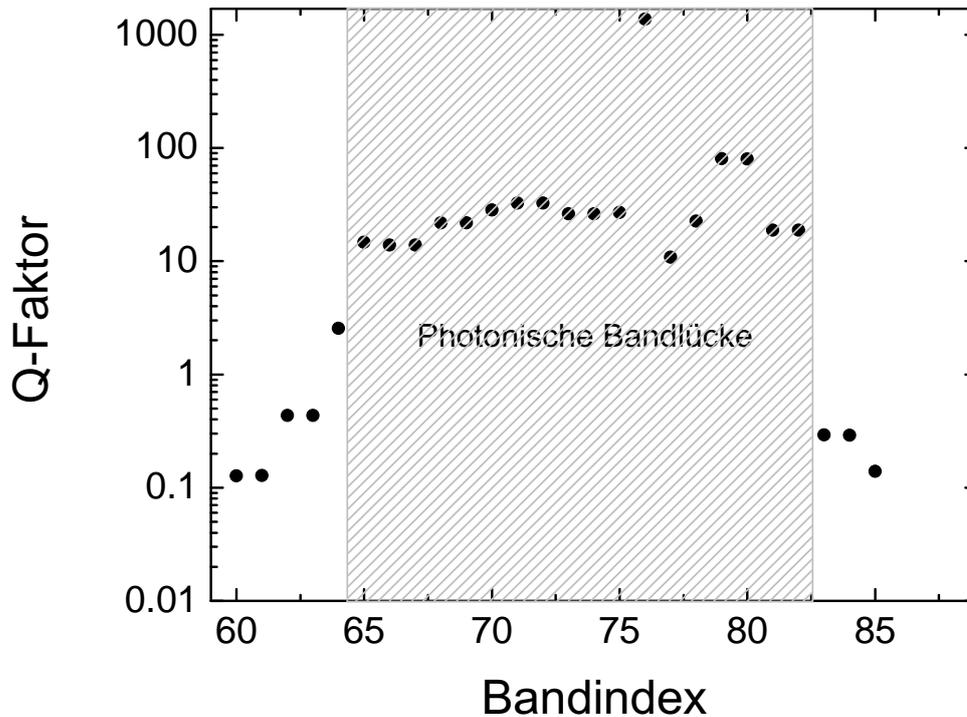


Abbildung 7.12: Q-Faktor innerhalb der Superzelle für einen Defektabstand von 8 Gitterkonstanten.

Die bisherigen Betrachtungen wurden für einen Defektabstand von 8 Gitterkonstanten durchgeführt. Die zugehörigen Resonatorniveaus der Bandstruktur sind diskret und weisen keine signifikante spektrale Breite auf.

Für geringere Defektabstände formen die Resonatorniveaus jedoch Bänder, was eine Wechselwirkung der Resonatoren und damit eine Ausbreitung von Photonen innerhalb dieser Bänder zur Folge hätte. Betrachtet man die im Resonator gespeicherte Feldenergie für geringere Defektabstände (Abb. 7.9), so ist zu erkennen, daß die Zustände innerhalb und außerhalb ein ähnliches Verhalten aufweisen. Während bei einem Abstand der Resonatoren von 8 Gitterkonstanten eine eindeutige Reproduktion der photonischen Bandlücke durch eine Konzentration der Feldenergie im Resonator gegeben war, ist dies für Defektabstände von 6 bzw. 5 Gitterkonstanten nicht mehr der Fall. Es kommt zu einer resonatorübergreifenden Ausbildung von ausgedehnten Wellenzügen. Diese ermöglicht die Propagation von Photonen innerhalb der ursprünglichen Bandlücke entlang der entstandenen Bänder.

Warum aber nimmt die Konzentration der Feldenergie für Bänder außerhalb der Bandlücke im Vergleich zu den Resonatormoden zu? Das Integrationsvolumen über den Resonator ist für einen großen Defektabstand im Bezug auf das Volumen der Superzelle kleiner als für geringere Defektabstände und damit kleinere Superzellen. Da die Feldenergie pro Superzelle auf 1 normiert wird, ist damit für geringe Abstände von vornherein ein größerer Anteil der Feldenergie

im Resonator gespeichert.

Dies wird jedoch bei der Berechnung des Q-Faktors berücksichtigt, da dieser mit den Integrationsvolumina des Resonators bzw. der Superzelle skaliert. Abbildung 7.13 zeigt die Q-Faktoren für verschiedene Defektabstände. Dabei ist zu erkennen, daß für einen großen Defektabstand von 8 Gitterkonstanten stark unterschiedliche Q-Faktoren innerhalb und außerhalb der photonischen Bandlücke existieren. Für einen Defektabstand von 5 Gitterkonstanten hingegen sind zum einen die Q-Faktoren ca. eine Größenordnung kleiner und zum anderen ist kein signifikanter Unterschied innerhalb und außerhalb der Bandlücke zu erkennen.

Je größer der Defektabstand ist, umso stärker wird Licht in den Defektzuständen an den Resonatoren lokalisiert.

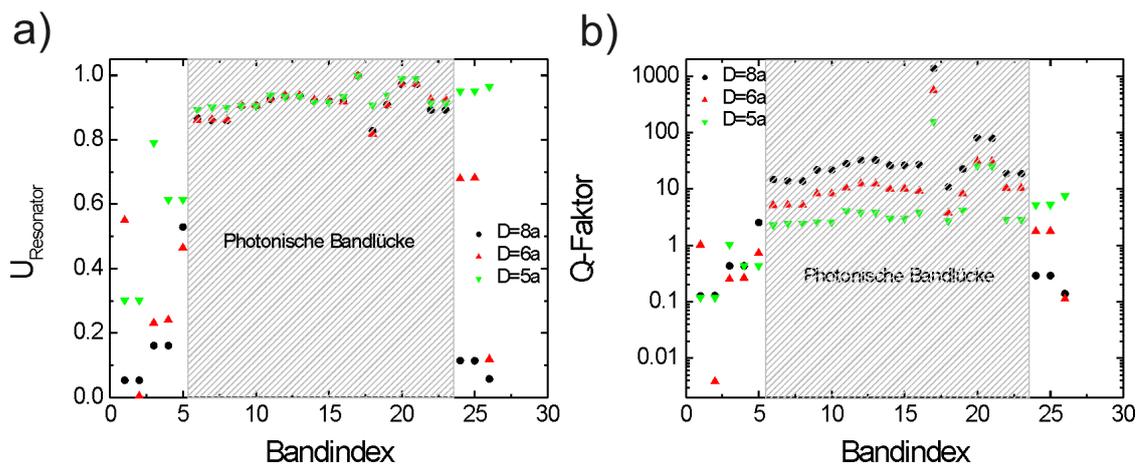


Abbildung 7.13: a) Feldenergie innerhalb des Resonators für unterschiedliche Defektabstände; b) Q-Faktor für unterschiedliche Defektabstände.

7.5.2 Klassifizierung der lokalisierten Zustände

Durch unterschiedliche Bedingungen stehender Wellen in der hexagonal ringförmigen Resonatorgeometrie existieren 18 Defektzustände (Abb.7.10) innerhalb der photonischen Bandlücke. Um eine Klassifizierung der lokalisierten Zustände hinsichtlich ihrer Symmetrie und energetischen Lage vornehmen zu können, ist es zweckmäßig gruppentheoretische Betrachtungen der Resonatormoden durchzuführen (genauere Beschreibung in Kapitel 5) [71, 28, 62].

Bei der Zuordnung der Darstellungen zu den Feldverteilungen einer Resonatormode an einem bestimmten Punkt der Brillouinzone ist darauf zu achten, daß für die einzelnen Punkte unterschiedliche Punktgruppen gelten, die Untergruppen der Punktgruppe des Kristalls sind. So ist die Symmetriegruppe des Γ -Punktes C_{6v} , während der K- bzw. M-Punkt der Gruppe C_{3v} bzw. C_{2v} genügt (Abb.5.3b).

Für das H-Feld (z-Komponente, TE-Polarisation) der Resonatormoden am Γ -Punkt sind die irreduziblen Darstellung in Abbildung 7.14 aufgelistet.

Vergleicht man die Darstellungen mit der zugehörigen normierten Frequenz am Γ -Punkt, so stellt man fest, daß die zweidimensionalen Darstellungen E_1 und E_2 jeweils paarweise auftreten und gleiche Frequenzen besitzen (Abb.7.14). Diese Defektzustände sind entartet. Ihre Linearkombination ergibt somit den allgemeinen Zustand.

Die eindimensionalen Darstellungen der Resonatormoden entsprechen nicht entarteten Defektzuständen. Anhand der Charaktertafel und Abbildung 7.10 erkennt man, daß die Moden der

Bandindex	Darstellung	Norm. Frequenz
65	B2	0.2337
66	E2	0.246
67	E2	0.246
68	E1	0.2584
69	E1	0.2584
70	A1	0.2835
71	E1	0.2937
72	E1	0.2937
73	E2	0.2946
74	E2	0.2946
75	B1	0.2973
76	A2	0.2999
77	B2	0.3369
78	A1	0.3402
79	E1	0.3396
80	E1	0.3404
81	E2	0.3434
82	E2	0.3435

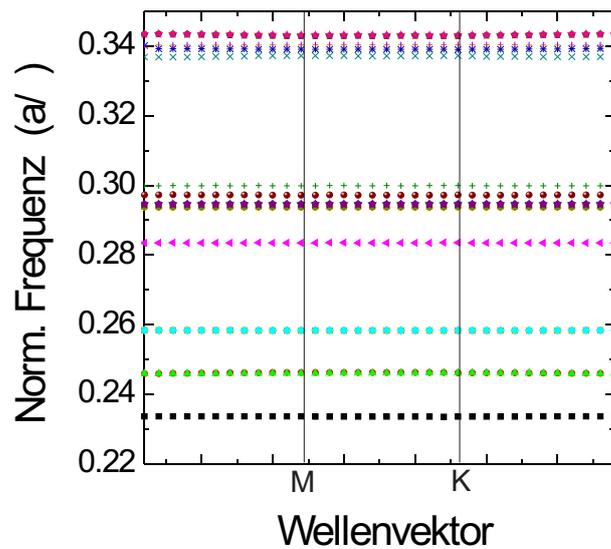


Abbildung 7.14: Irreduzible Darstellungen des H-Feldes (z-Komponente, TE-Polarisation) der Defektzustände (Defektabstand 8 Gitterkonstanten) (Gruppentheoretische Analyse W. Hergert, M. Däne, Martin-Luther-Universität Halle/Wittenberg) [28].

A_1 Darstellung (Bandindex 70, 78) unter allen Symmetrioperationen invariant sind. Für die A_2 -Darstellung (Bandindex 76) ergibt sich eine Invarianz bezüglich der Drehungen, Spiegelungen hingegen verursachen eine Inversion der Feldverteilung. Die Darstellungen B_1 und B_2 (Bandindex 75 und 65, 77) sind invariant unter einer dreizähligen Drehung und jeweils einer Spiegelung, die anderen Operationen verursachen Inversionen.

Wie in [47] beschrieben, entsprechen die Moden 70 und 76 der H2-Kavität ohne zentrale Pore. Die Moden 65 und 76 erfüllen die Bedingung stehender Wellen entlang des Umfangs des Resonators, ähnlich den "Whispering-Gallery-Moden". An den Moden 65 und 75 ist eine Bedingung für stehende Wellen entlang des Radius zu erkennen.

7.5.3 Die Wechselwirkung lokalisierter Zustände

Die Lokalisierung der Resonanzmoden um den Punktdefekt läßt sich mit Elektronen vergleichen, die an einem Störatom (Akzeptor) gebunden sind. Zur Beschreibung von Elektronen, die an einem Kristallgitterplatz lokalisiert sind, eignet sich das, aus der Festkörperphysik bekannte, Modell stark gebundener Elektronen (Tight-Binding-Model). Der Hamiltonoperator eines Elektrons in einem atomaren Potential wird durch ein schwaches gitterperiodisches Potential gestört. Dabei wird von atomaren Eigenfunktionen der Elektronen ausgegangen. Diese werden um einen gitterperiodischen Anteil erweitert. Unter Annahme der Wellenfunktion eines s-Orbitals (kugelsymmetrisch) und der Berücksichtigung einer Wechselwirkung mit nächsten Nachbarn (n.N), liefert die Störungstheorie erster Ordnung die Energieeigenwerte [2]

$$E(\vec{k}) = E_0 + A + B \sum_{n.N} e^{i\vec{k}\vec{R}}. \quad (7.7)$$

Mit dem Parameter A wird eine Verschiebung des Energieniveaus berücksichtigt (core level shift). Der Parameter B beschreibt die Formation von Bändern aus diskreten Niveaus und entspricht einer spektralen Bandbreite.

Da auch Resonatormoden lokalisierte Zustände darstellen, kann dieses Modell auf photonische Kristalle übertragen werden [51, 93].

$$\omega(\vec{k}) = A + B \sum_{n.N.} \cos(\vec{k}\vec{R}). \quad (7.8)$$

Unter der Annahme einer starken Lokalisierung der Moden am Punktdefekt, kann Gleichung 7.8 auf die Defektzustände in der photonischen Bandlücke angewendet werden.

Wie im vorigen Abschnitt dargestellt weisen die Resonatormoden der isolierten Punktdefekte eine starke Lokalisierung um den Punktdefekt auf. Ein Fit der berechneten Bandstruktur mit dem Tight-Binding-Modell zeigt eine gute Übereinstimmung (Abb. 7.15). Der Parameter A entspricht dabei der mittleren Frequenz des Bandes, der Parameter B der Bandbreite.

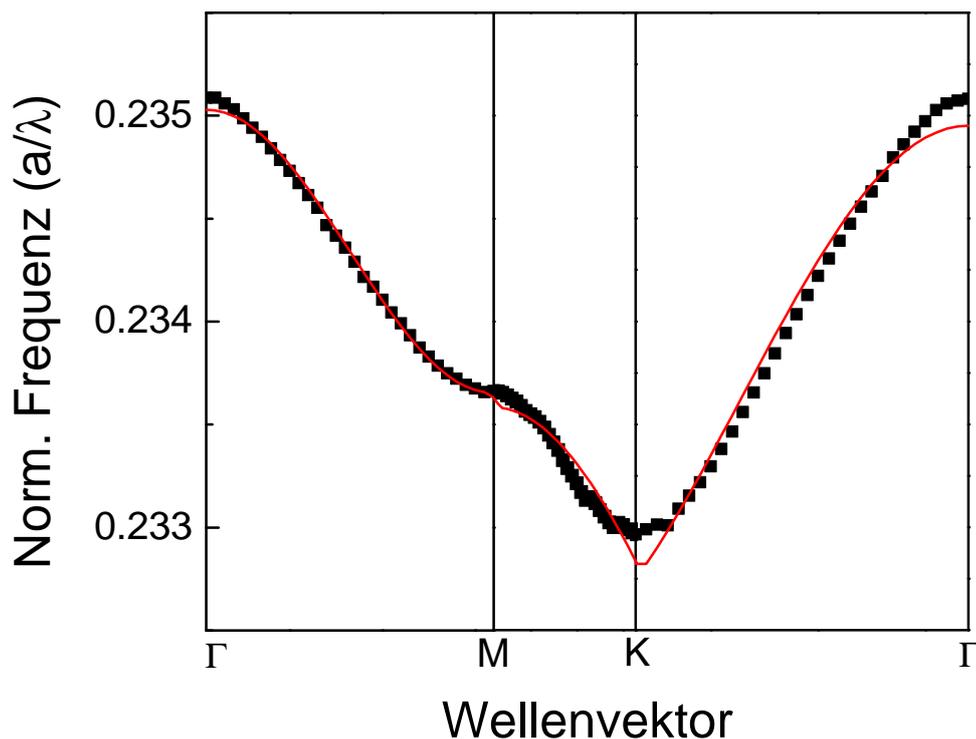


Abbildung 7.15: Anpassung des Tight-Binding-Modells (rot) auf die Bandstrukturechnung eines Defektzustand (schwarz, Band 41, Defektabstand 6 Gitterkonstanten).

Diese Anpassung des Tight-Binding-Modells kann nun für alle Defektzustände durchgeführt werden.

Aufgrund der Vergrößerung der Bandbreite bei einer Verringerung des Defektabstandes, läßt sich der Parameter B als ein Maß für die Wechselwirkung der Defektzustände auffassen. Stellt man den Parameter B, gemittelt über alle Defektzustände, in Abhängigkeit vom Abstand dar, so

stellt man ein rasches Abklingen mit zunehmender Entfernung fest, welches in doppelt logarithmischer Darstellung als exponentielles Abfallen beschrieben werden kann. Ein entsprechender Fit der Form

$$B = y_0 + B_0 \cdot e^{-\frac{D}{\gamma}} \quad (7.9)$$

ergibt Abklingkonstanten $\gamma = 0,828a$ bzw. $\gamma = 0,81a$ für die Γ -M Richtung bzw. die Γ -K Richtung. Damit läßt sich Wechselwirkung der Punktdefekte für beide Kristallrichtungen quantitativ beschreiben.

Es bleibt aber anzumerken, daß dieses Modell aus einer Störungsrechnung hervor geht. Die Bandstruktur hingegen beruht auf einer exakten Berechnung, die auf den Maxwell-Gleichungen beruht. Dieses Modell hingegen erlaubt die Charakterisierung der Wechselwirkung von Punktdefekten im photonischen Kristall.

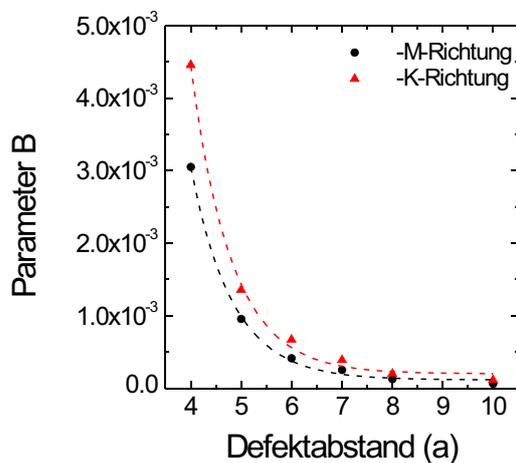


Abbildung 7.16: Fitparameter B der Defektzustände in Abhängigkeit vom Defektabstand.

Während frühere Publikationen [5, 60] lineare Anordnungen von Resonatoren behandelte, wurde hier eine mehrdimensionale periodische Anordnung von Punktdefekten behandelt, was die Anwendung des „Tight-Binding“-Modells für die Bandstruktur in der gesamten 1. Brillouin-Zone erlaubt.

7.5.4 Gruppengeschwindigkeiten der Defektzustände

Wie im vorhergehenden Abschnitt beschrieben, wird durch die Wechselwirkung der Resonatoren eine Formation von Bändern aus diskreten Niveaus hervorgerufen. Entlang dieser Bänder kann sich das Licht im Kristall ausbreiten. Die Ausbreitungsgeschwindigkeit ist also abhängig von der Entfernung benachbarter Punktdefekte. Die Gruppengeschwindigkeit innerhalb des Kristalls ist durch den Anstieg der Bänder definiert,

$$c_g = \frac{\partial \omega}{\partial k}. \quad (7.10)$$

Je höher die Defektkonzentration ist, desto größer ist die Bandbreite der Defektbänder. Die maximale Gruppengeschwindigkeit des Bandes nimmt zu.

Abbildung 7.17 zeigt die Gruppengeschwindigkeit (Defektabstand 6 Gitterkonstanten) im Vergleich zum zugehörigen Defektband. Die Gruppengeschwindigkeit ist dabei auf die Vakuumlichtgeschwindigkeit bezogen. An den Rändern der Brillouinzone beträgt die Gruppengeschwindigkeit 0. Da dieses Band eine monoton fallende Funktion darstellt, nimmt die Gruppengeschwindigkeit innerhalb der Brillouinzone negative Werte an. Der maximale Betrag der Gruppengeschwindigkeit beträgt $4.7 \cdot 10^{-4}c$. Das Kriterium des maximalen Betrages der Gruppengeschwindigkeit ist insofern sinnvoll, als daß damit das Band durch die maximal erreichbare Gruppengeschwindigkeit charakterisiert wird.

Aus den Bandstrukturen der unterschiedlichen Defektkonzentrationen wurden die maximalen

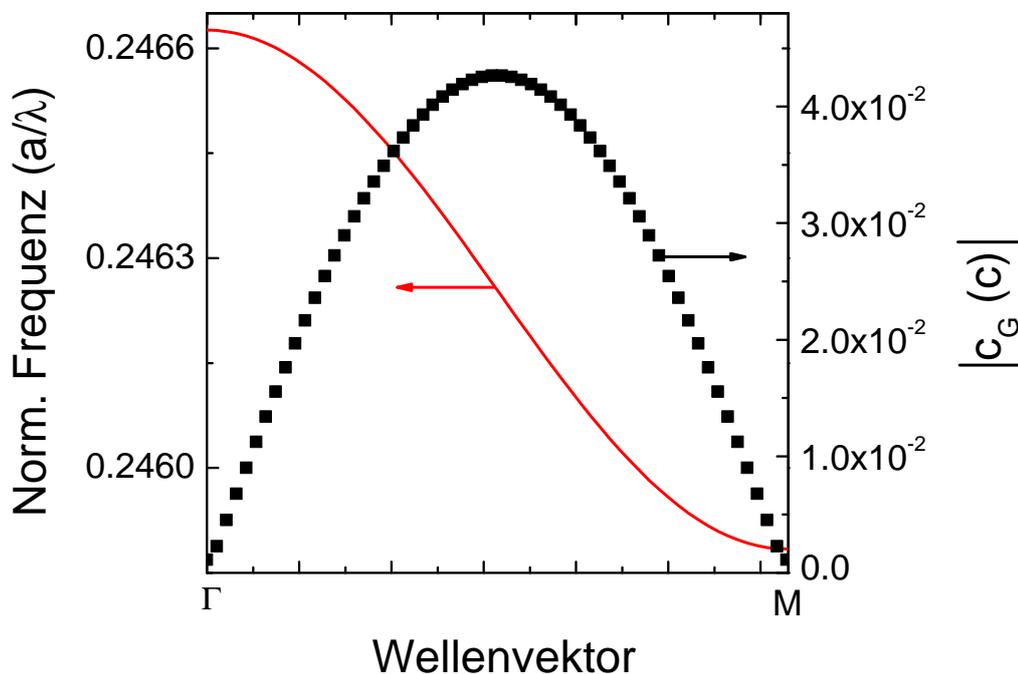


Abbildung 7.17: Berechnung der Gruppengeschwindigkeit eines Defektbandes für einen Defektabstand von 3 Gitterkonstanten.

Beträge der Gruppengeschwindigkeit für die Hochsymmetrierichtungen bestimmt (Abb. 7.18). Dabei sind Verringerungen der Gruppengeschwindigkeiten in den einzelnen Bändern um mehr als 2 Größenordnungen bei einer Vergrößerung des Defektabstandes von 4 auf 8 Gitterkonstanten festzustellen. Die Geschwindigkeit des sich ausbreitenden Lichtes im Kristall beträgt dabei zwischen $c_G = 1,3 \cdot 10^{-4}c$ und $c_G = 5,8 \cdot 10^{-2}c$.

Für einen Defektabstand von 10 Gitterkonstanten wurden maximale Gruppengeschwindigkeiten zwischen $c_G = 4,5 \cdot 10^{-4}c$ und $c_G = 0$ ermittelt (Abb. 7.19). Eine Gruppengeschwindigkeit gleich 0 bedeutet, das Licht ist am Resonator lokalisiert und kann im Kristall nicht propagieren. Diese Werte wurden im Bereich der Rechengenauigkeit der Simulationsrechnungen ($\Delta a/\lambda = 10^{-7}$) bestimmt [38].

Anhand dieser Bestimmung der Gruppengeschwindigkeiten der Resonatormoden konnte gezeigt werden, daß bei einer Vergrößerung des Defektabstandes um einen Faktor zwei die Grup-

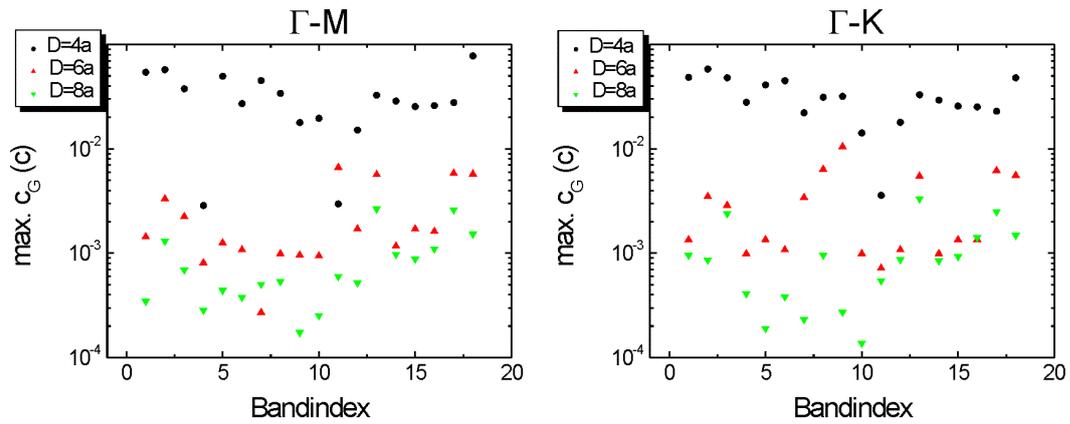


Abbildung 7.18: Berechnung der Gruppengeschwindigkeit entlang der Kristallrichtungen $\Gamma - M$ und $\Gamma - K$ für Defektabstände von 4, 6 und 8 Gitterkonstanten.

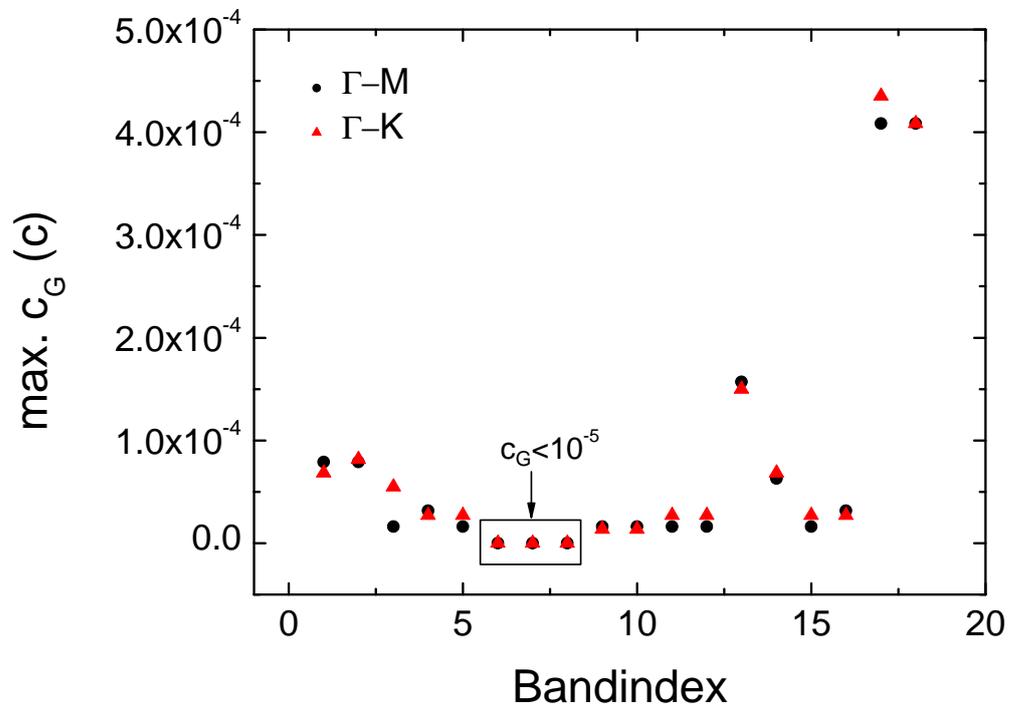


Abbildung 7.19: Berechnung der Gruppengeschwindigkeit entlang der Kristallrichtungen $\Gamma - M$ und $\Gamma - K$ für einen Defektabstand von 10 Gitterkonstanten.

pengeschwindigkeit des sich ausbreitenden Lichtes um mehrere Größenordnungen verringert werden kann. Außerdem kommt es bei sehr großen Abständen zu einer Lokalisierung des Lichtes im Resonator.

Dieser, aus der Festkörperphysik bekannte, Formalismus läßt sich konsequent fortsetzen. So ergibt sich aus der reziproken zweiten Ableitung der Bänder ein Ausdruck analog zur effektiven Masse der Elektronen im Festkörper [2]

$$\frac{1}{m_{ij}^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E(\vec{k})}{\partial k_i \partial k_j} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial^2 \omega}{\partial k_i \partial k_j}. \quad (7.11)$$

Angewandt auf photonische Kristalle oder auch Lichtleiter, ist dieser Ausdruck als Dispersionskoeffizient

$$D(\omega) = 2\pi \frac{1}{\frac{\partial^2 \omega}{\partial k^2}}. \quad (7.12)$$

bekannt. Er beschreibt das spektrale Verhalten eines Wellenpaketes beim Durchlaufen einer photonischen Struktur.

7.6 Interne Emittter in Punktdefekten

Bei der Charakterisierung von Resonatoren ist die interne Lichtemission von besonderem Interesse. Ebenso wie bei den ungestörten zweidimensionalen photonischen Kristallen lassen sich die periodischen Punktdefektstrukturen mit HgTe/Polymer-Nanoröhren als interne Emittter funktionalisieren. Dazu ist wiederum ein spektraler Überlapp der Emission und der photonische Bandlücke und damit der lokalisierten Resonatormoden notwendig.

Die Punktdefektstrukturen wurden, wie in Kapitel 5 beschrieben, von einem r/a-Verhältnis von 0,36 auf 0,45 aufgeweitet (Abb.7.20). Dabei ist zu beachten, daß das r/a-Verhältnis 0,45 nur für die ungestörten Poren gilt. Die an den Defekt angrenzenden Poren haben aufgrund ihres 10 Prozent größeren Durchmessers ein r/a-Verhältnis von 0,49. Das bedeutet, die Porenwände zwischen den angrenzenden Poren sind nur noch sehr dünn, ca. 10 nm. Damit ist die Aufweitung der Poren limitiert, da es sonst zu einer Zerstörung der Struktur kommt. Die zentrale Pore (30 Prozent größer) hat einen Durchmesser von 820 nm.

Die optische Charakterisierung anhand von FTIR-Reflektionsspektren zeigt eine Verschiebung und Aufweitung der fundamentalen Bandlücke in TE-Polarisation von $a/\lambda = 0,24 - 0,34$ auf $a/\lambda = 0,303 - 0,49$. Dadurch beträgt die Breite der Bandlücke 49 Prozent. Die Anzahl der auftretenden Defektzustände innerhalb der Bandlücke erhöhte sich von 18 auf 33 (Abb.7.21).

7.6.1 Lokale Zustandsdichte-Kopplungsbedingung der Emittter

Insbesondere bei Resonatoren ist die lokale Zustandsdichte von Bedeutung, da durch sie die Kopplung von Emitttern innerhalb des Resonators vorgegeben wird. Abbildung 7.22 zeigt die Berechnung der dreidimensionalen lokalen Zustandsdichte eines Punktdefektes als Querschnitt entlang der Γ -M bzw. Γ -K Richtung. Während im Bereich der ausgelassenen Poren starke Erhöhungen der LDOS bis zu einem Faktor 8 erkennbar sind, treten in der zentralen Pore sowohl Abschwächungen (um einen Faktor 6) als auch Erhöhungen der LDOS auf. Ein Vergleich

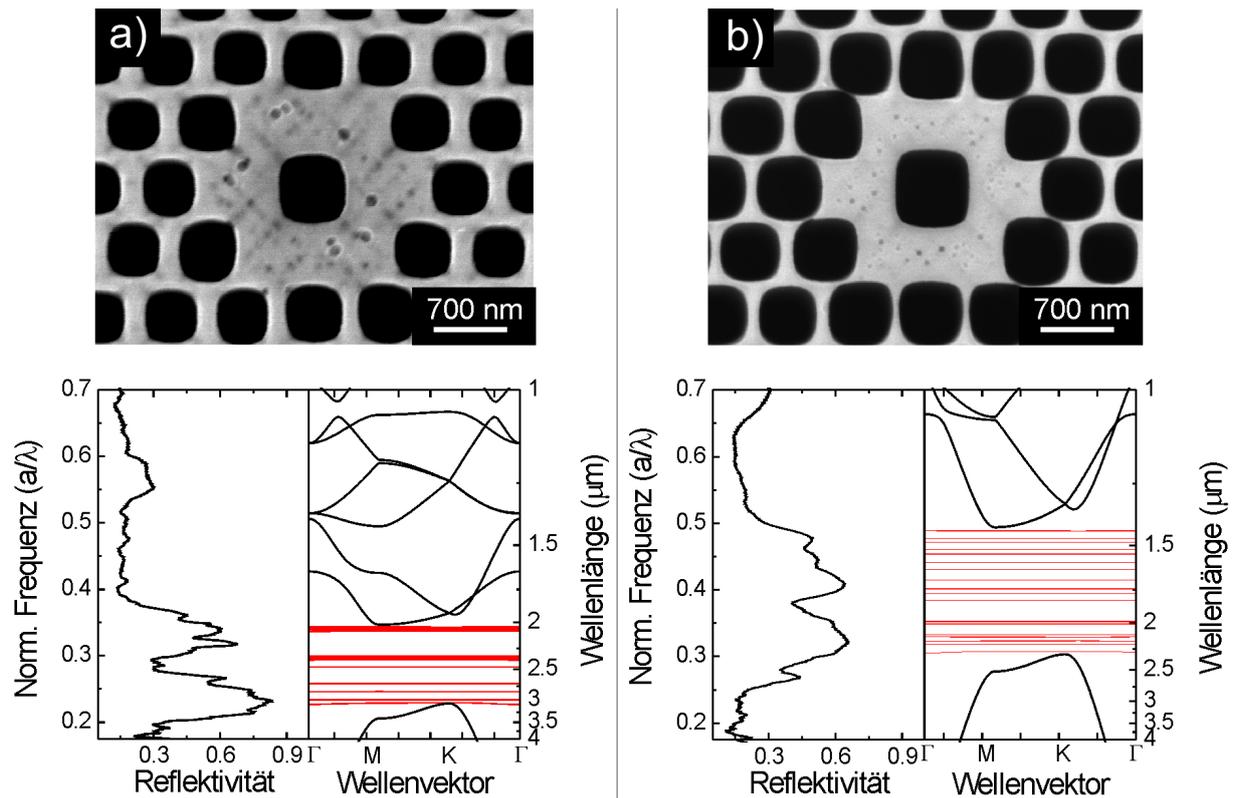


Abbildung 7.20: a) REM-Aufnahme eines Punktdefektes $r/a=0,36$ und FTIR Reflektionsspektrum im Vergleich zur zugehörigen Bandstruktur (TE-Polarisation); b) wie a) für $r/a=0,45$.

mit einer entsprechenden Bandstrukturrechnung zeigt, daß die Erhöhungen der LDOS im Resonator energetisch den Defektzuständen entsprechen. Für einen internen Emitter bedeutet dies eine effiziente Kopplung der Emission an die Resonatormoden, wenn er sich sowohl räumlich als auch energetisch im Bereich solcher Zustandsdichteerhöhung befindet.

Da an den Wänden der zentralen Pore und der umgebenden Poren solche Erhöhungen auftreten, ist eine Kopplung der Emission von infiltrierten HgTe-Quantenpunkten an die Resonatormoden dort möglich.

Um Aussagen zur Kopplungseffizienz der einzelnen Resonatormoden treffen zu können, wurde, analog zum vorhergehenden Abschnitt, die Gesamtenergie im Bereich der zentralen Pore und des äußeren Porenringes berechnet. Wie aus Abbildung 7.23 ersichtlich sind für die Resonatormoden zwischen 53,7 und 74,7 Prozent der Feldenergie im Resonator lokalisiert. Dabei ist die Gesamtenergie innerhalb der Superzelle auf 1 normiert. Befinden sich HgTe-Emitter im gesamten Kristall, so sollten insbesondere die in den umgebenden Poren und in der zentralen Pore befindlichen Emitter an Resonatormoden anknüpfen können.

Da nur ein partieller Überlapp zwischen photonischer Bandlücke, HgTe-Lumineszenz und spektralem Detektionsbereich des Photolumineszenzsystems (blau dargestellt) besteht, ist jedoch nur ein Teil der Resonatormoden für die Lumineszenzuntersuchungen zugänglich. Diese Moden sind in Abbildung 7.24a in Abhängigkeit von der Wellenlänge dargestellt. Der Energieanteil dieser Moden im Resonator beträgt zwischen 58,3 und 68,2 Prozent. Allerdings befinden sie sich zum Teil spektral sehr dicht bei einander. Die zweifach entarteten Zustände (2x) sind dabei entsprechend gekennzeichnet.

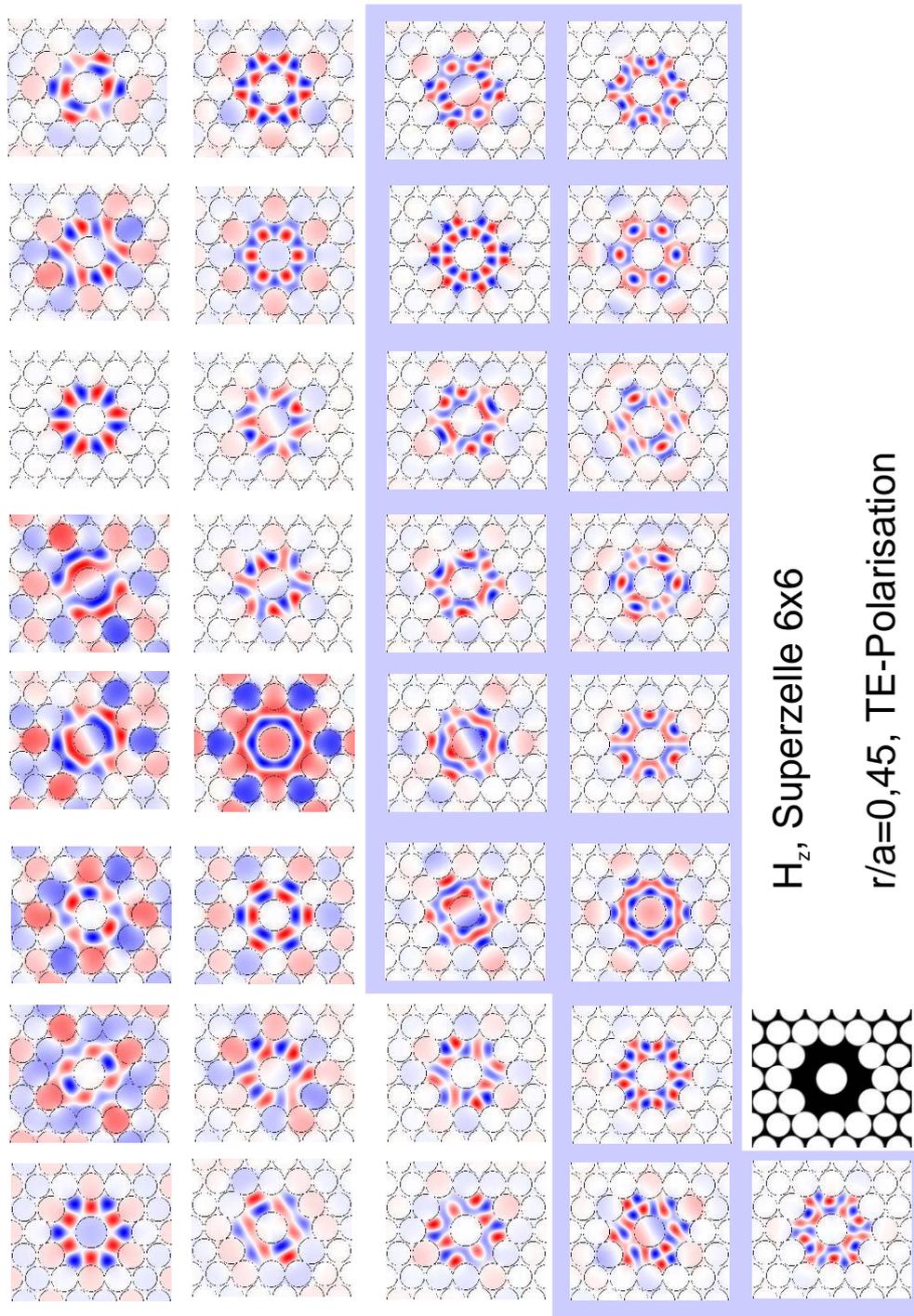


Abbildung 7.21: H-Feldverteilung (z-Komponente) der Resonatormoden für $r/a=0,45$, Defektabstand $6a$ (Berechnung der Feldverteilungen R. Hillebrand).

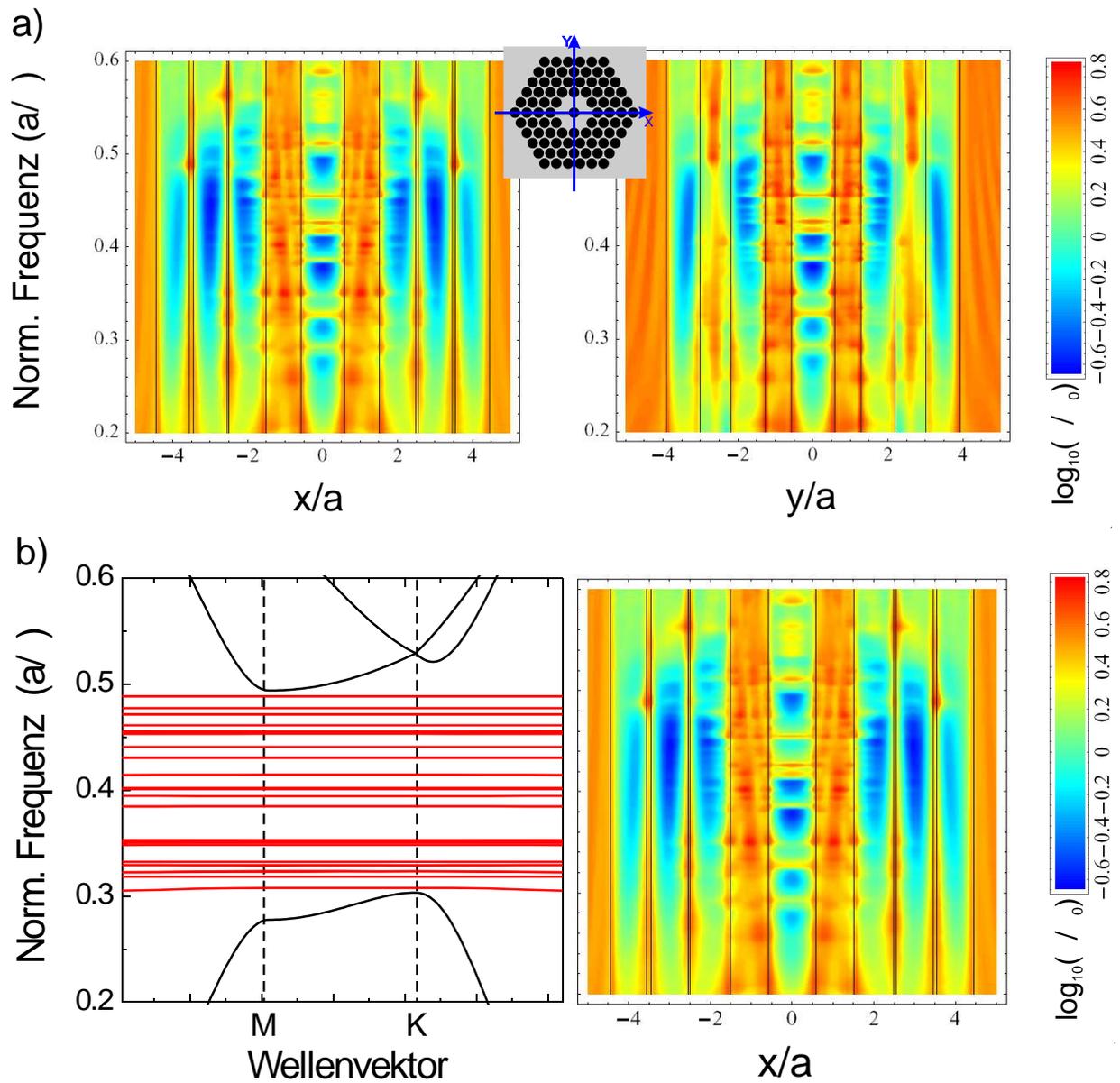


Abbildung 7.22: a) Querschnitt der lokalen Zustandsdichte (farbkodiert) eines Punktdefektes ($r/a=0,45$) entlang der Γ -K Richtung (links) und der Γ -M Richtung (rechts); b) Vergleich der Bandstruktur ($r/a=0,45$) und des LDOS-Querschnittes in Γ -K Richtung (LDOS-Berechnungen D. Fussell, University of Sydney).

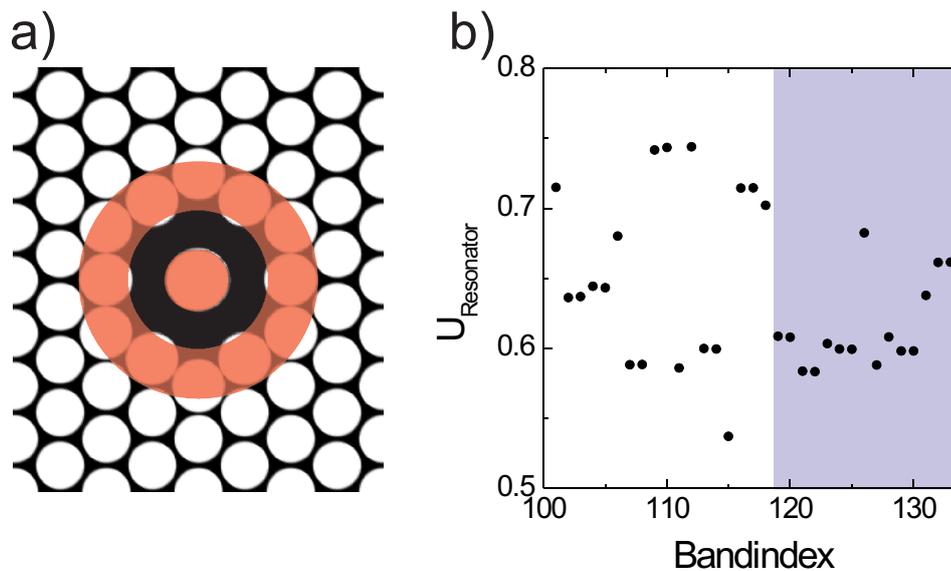


Abbildung 7.23: a) Integrationsvolumen innerhalb der Superzelle; b.) Feldenergie innerhalb des Integrationsvolumens des Resonators, blau: PL-Detektionsbereich.

7.6.2 Lumineszenzuntersuchungen an Punktdefekten

Die Lumineszenzuntersuchungen der HgTe-Quantenpunktemitter in den Punktdefektstrukturen wurden analog zu den Lumineszenzuntersuchungen der ungestörten photonischen Kristalle durchgeführt. Die HgTe-Emission innerhalb der Periodizitätsebene wird nach der Auskopplung aus einer Bruchkante spektral aufgelöst detektiert (siehe Abb.6.6). Die angeregte Fläche wird durch den Strahldurchmesser des Lasers vorgegeben und beträgt $0,5 \cdot 0,5 \text{ mm}^2 = 0,25 \text{ mm}^2$. Abbildung 7.24b zeigt ein PL-Spektrum der HgTe-Quantenpunkte in einer komplett gefüllten Punktdefektstruktur (Defektabstand 5 Gitterkonstanten) im Bereich der Defektzustände innerhalb der photonischen Bandlücke im Vergleich zum Emissionsspektrum der HgTe-Quantenpunkte im freien Raum. Dabei ist eine starke Modifikation des PL-Spektrums der Punktdefektstrukturen festzustellen. Es treten Intensitätsmaxima und -plateaus im Bereich der photonischen Bandlücke auf. Die niederenergetische Seite des ursprünglichen PL-Spektrums wird abgeschwächt. Um die Intensitätsmaxima zu identifizieren, wurden ebenfalls die Resonatormoden abhängig von ihrer Energiekonzentration im Resonator und ihrer Wellenlänge dargestellt. Dadurch wird erkennbar, daß dort, wo es zur Ausbildung von Intensitätspeaks bzw. -plateaus kommt auch Resonatormoden auftreten.

Normalerweise würde man für jeden Defektzustand einen Peak im PL-Spektrum erwarten. Da mit dem Laser jedoch eine, verglichen mit der Gitterkonstante, sehr große Fläche angeregt wird, kommt es zu einer Integration des PL-Signals über die, auf dieser Fläche befindlichen, Resonatoren. So wird beispielsweise bei einem Defektabstand von 13 Gitterkonstanten (Defektdichte $1.86 \cdot 10^4 \text{ cm}^{-2}$) über 2325 Resonatoren integriert. Bei einem Defektabstand von 5 Gitterkonstanten (Defektdichte $1.26 \cdot 10^5 \text{ cm}^{-2}$) beträgt die Anzahl der detektierten Resonatoren 15750. Obwohl der photonische Kristall aus hochgeordneten Makroporen besteht, kann nicht davon ausgegangen werden, daß die einzelnen Resonatoren identisch sind. Da jedoch die energetische Lage der Resonatormoden sehr sensitiv von der Form des Resonators abhängt, ist es wahrscheinlich, daß es bei einer Detektion sehr vieler Resonatoren zu einer spektralen Verschmierung der einzelnen Resonatormoden kommt [63, 87].

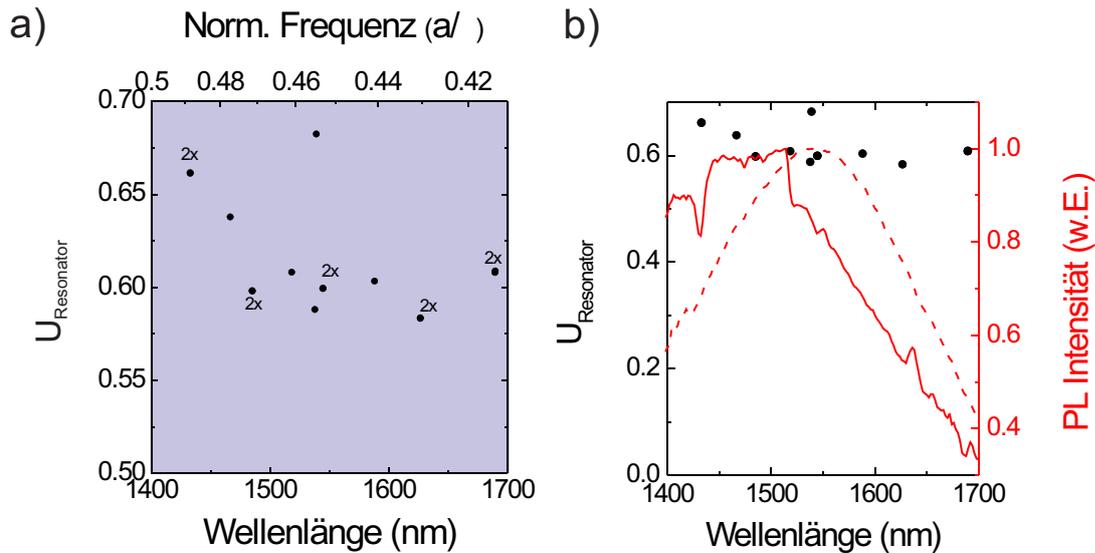


Abbildung 7.24: a) Feldenergie innerhalb des Integrationsvolumens des Resonators für die Moden innerhalb des Detektionsbereiches, 2x - zweifach entartete Zustände; b.) PL-Spektrum der HgTe-Emitter in der Punktdefektstruktur (rot durchgehend) und im freien Raum (rot gestrichelt) im Vergleich zur spektralen Lage der Resonatormoden (schwarz).

Um die spektrale Auflösung einzelner Resonatormoden zu erreichen, wäre es notwendig identische Resonatoren herzustellen. Da sich die Geometrie der einzelnen Resonatoren aufgrund des elektrochemischen Ätzprozesses und der anschließenden Aufweitung nicht kontrollieren läßt, muß die Anzahl der koppelnden Resonatormoden reduziert werden. Dazu ist es zweckmäßig die HgTe-Emitter nur in bestimmten Bereiche des Resonators zu infiltrieren, da aufgrund der LDOS die Kopplungsbedingungen lokal verschieden sind.

7.6.3 Selektives Infiltrieren in die Punktdefekte

Die Berechnung der lokalen Zustandsdichte für die Punktdefektstruktur prognostiziert eine erhöhte LDOS für einige Resonatormoden innerhalb der zentralen Pore. Um eine Kopplung interner Emittter mit diesen Resonatormoden zu ermöglichen, ist es notwendig, diese selektiv in die zentrale Pore zu infiltrieren.

Dazu wurde eine Beschichtung mit SiO_2 mittels Elektronenstrahlbedampfung vorgenommen. Das SiO_2 lagert sich dabei auf den Stegen zwischen den Poren ab. Mit zunehmender Schichtdicke wird die Porenfläche immer mehr abgedeckt. Aufgrund unterschiedlicher Porenradien werden zuerst die ungestörten Poren geschlossen. Dies ermöglicht bei geeigneter Wahl der Schichtdicke eine verbleibende Öffnung der Zentralporen, da deren Radius um ca. 30 Prozent größer ist. Dazu wurde bei einer Gitterkonstante von 700 nm eine kritische Schichtdicke von 365 nm gewählt. Die verbleibende Öffnung der zentralen Pore beträgt ca. 100 nm (Abb.7.25). Alle übrigen Poren sind geschlossen.

Diese Öffnung ist hinreichend groß, um eine Infiltration mit einer HgTe/PS-Lösung vorzunehmen. Auf diese Weise werden die Nanoröhren (Kap.6) nur in der zentralen Pore erzeugt.

Nach der Verfestigung der Nanoröhren wird der HgTe/PS-Oberflächenfilm mit organischen Lösungsmitteln entfernt. Die SiO_2 -Schicht wird durch einen kurzen Ätzschritt mit HF beseitigt. Das PS schützt die eingeschlossenen HgTe-Quantenpunkte während des Ätzschrittes

vor einer möglichen Beschädigung. Auf diese Weise wird die Oberflächenemission der HgTe-Quantenpunkten minimiert.

Unter Ausnutzung des zwangsläufig auftretenden Proximity-Effektes wurde somit eine selektive Infiltration der Emittter in den Punktdefekt ermöglicht.

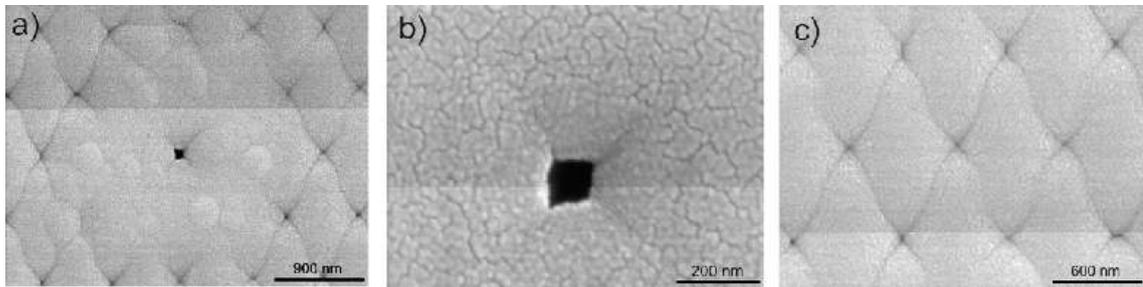


Abbildung 7.25: Abdeckung der Punktdefekte mit einer SiO_2 -Schicht (365 nm) a) REM-Aufnahme eines abgedeckten Punktdefektes; b) Vergrößerte Aufnahme der zentralen Pore zur Bestimmung der verbleibenden Öffnung; c) Vergrößerte Aufnahme der umgebenden Poren.

7.6.4 Lumineszenzmessung der Resonatormoden

Um das Infiltrieren der HgTe/Polymer-Lösung in die zentrale Pore zu verifizieren, wurden ortsaufgelöste Lumineszenzmessungen durchgeführt. Abbildung 7.26 zeigt die spektral integrierte HgTe-Emission entlang der Poren. Diese wurde mit einer InGaAs APD (Avalanche Photo Diode) auf einer Fläche von $10 \cdot 10 \mu\text{m}^2$ detektiert. Anhand dieser Untersuchungen wird ersicht-

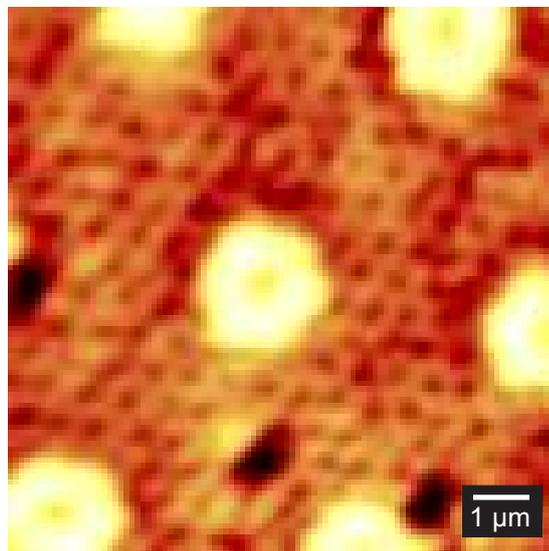


Abbildung 7.26: Ortsaufgelöstes, spektral integriertes Bild eines Lumineszenzmikroskops der selektiv infiltrierten Punktdefekte, Defektabstand 8 Gitterkonstanten (Aufnahme von B. Buchler, F. Koenderink, ETH Zürich)

lich, daß die Emission nur von den HgTe-Emitttern innerhalb der Punktdefekte stammt.

Durch die Infiltration der Emittter in die zentrale Pore des Punktdefektes wird die Kopplungseffizienz einzelner Moden verändert, da nur noch solche Moden koppeln, die einen signifikanten Anteil der Feldenergie im Zentrum des Resonators besitzen. Dieser Anteil beträgt zwischen

0,03 und 8,9 Prozent, so daß die Kopplungsbedingungen für die einzelnen Moden stark unterschiedlich sind (Abb. 7.27).

Aufgrund der selektiven Infiltration sind gegenüber einer kompletten Infiltration nur noch we-

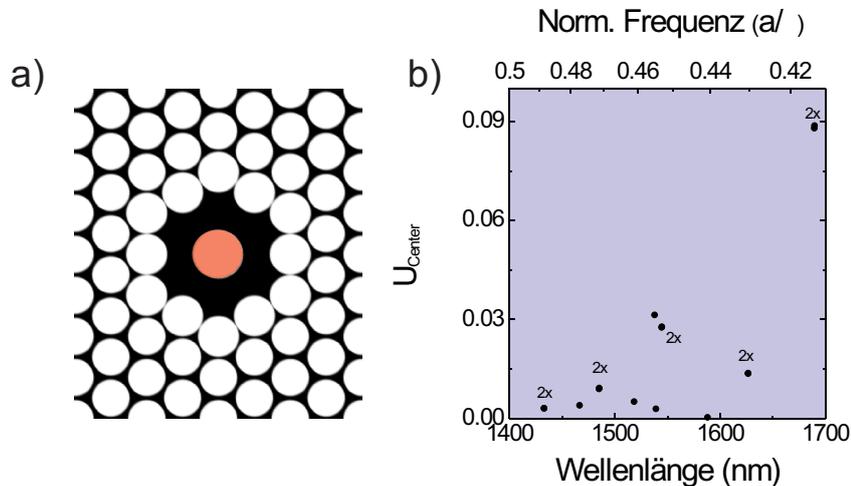


Abbildung 7.27: a) Integrationsvolumen (zentrale Pore) innerhalb der Superzelle; b.) Feldenergie innerhalb der zentralen Pore, 2x - zweifach entartete Zustände.

nige Poren mit Emittlern präpariert. Für einen Defektabstand von 8 Gitterkonstanten ist nur noch eine der bisher 58 Poren der Superzelle gefüllt. Entsprechend nimmt die absolute PL-Intensität mit dem Defektabstand ab. Dies kann durch Erhöhung der Integrationszeit und durch eine Vergrößerung der spektralen Auflösung (ca. 2 nm) kompensiert werden.

Abbildung 7.28 zeigt die Emissionsspektren der HgTe-Quantenpunkte in den zentralen Poren der periodischen Punktdefektstrukturen für Defektabstände von 8 bzw. 6 Gitterkonstanten. Gegenüber der Emission im freien Raum (gestrichelt dargestellt) ist eine starke Modifikation durch diskrete Maxima im Spektralbereich der Resonatormoden erkennbar. Ein Vergleich mit den berechneten Resonatormoden ist eine gute spektrale Übereinstimmung festzustellen. Insbesondere Abbildung 7.28b zeigt ebenso die Entsprechung der Kopplungseffizienz (Feldenergie in der zentralen Pore) und der gemessenen PL-Intensität.

Allerdings sind mehr Maxima als berechnete Resonatormoden vorhanden. Die Ursache dafür sind Unterschiede in der Modellierung der Superzelle und der tatsächlich vorhandenen Struktur. Während die Berechnung von perfekt runden Poren ausgeht haben die Poren der realen Struktur die Form abgerundeter Quadrate (Abb.7.20). Wie in [73] beschrieben verursachen quadratische Poren in einem hexagonalen Gitter eine Reduktion der Symmetrie von einer sechszähligen auf eine zweizählige Symmetrie. Dadurch kommt es zu einer Aufspaltung von Zuständen in der Bandstruktur. Die Abweichungen der realen Struktur von der Kreisform ist durch die (100)-Vorzugsrichtung des Ätzprozesses bedingt. Insbesondere bei kleinen Gitterkonstanten, $\sim 500 - 700$ nm, sind diese Abweichungen beobachten.

Diese Symmetriereduktion verursacht zusätzliche Zustände in der Bandstruktur und damit zusätzliche Resonatormoden. Für ein r/a -Verhältnis von 0,36 entstehen so anstelle der bisher 18 Resonatormoden 43 Zustände innerhalb der ursprünglichen photonischen Bandlücke. Anhand dieser Symmetriereduktion kann das Auftreten zusätzlicher Defektresonanzen in den PL-Spektren erklärt werden.

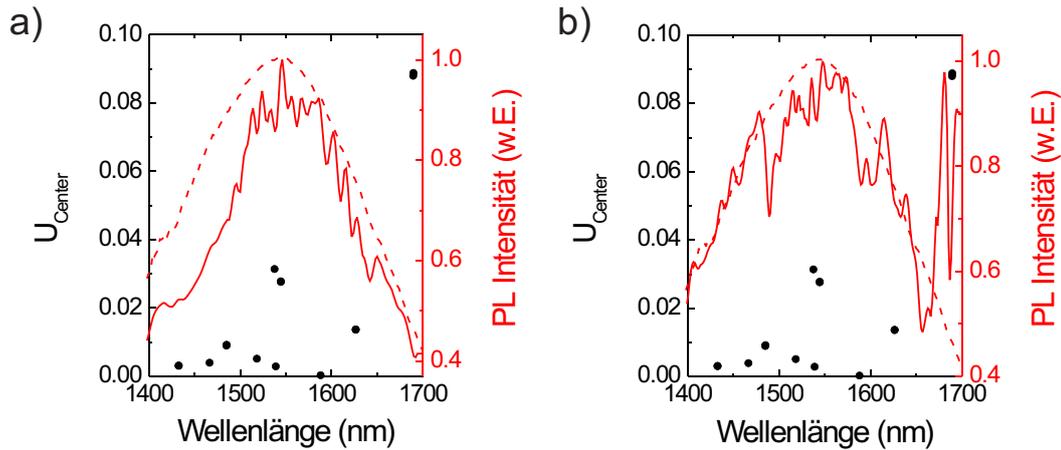


Abbildung 7.28: PL-Spektrum der HgTe-Emitter in der selektiv gefüllten Punktdefektstruktur (rot durchgehend) und im freien Raum (rot gestrichelt) im Vergleich zur spektralen Lage der Resonatormoden (schwarz) a) Defektabstand 8 Gitterkonstanten; b) Defektabstand 6 Gitterkonstanten.

Dieses Kapitel beschreibt, wie durch das Einbringen von Punktdefekten (bzw. Resonatoren) in das hexagonale Gitter des makroporösen Siliziums Eigenschaften photonischer Kristalle anhand dieses Modellsystems untersucht wurden. Die Punktdefekte selbst wurden ebenfalls in einem periodischen Gitter angeordnet, welches der Symmetrie des umgebenden Kristalls entspricht. Dadurch ist es möglich, eine genaue theoretische Modellierung der existierenden Struktur vorzunehmen und die Bandstruktur eines photonischen Kristalls mit Punktdefekten zu berechnen. Bisher wurden nur eindimensionale Anordnungen von Punktdefekten experimentell untersucht [5, 60]. In dieser Arbeit wird erstmalig eine mehrdimensionale Anordnung solcher Punktdefekte in einem photonischen Kristall hergestellt, theoretisch modelliert und experimentell charakterisiert.

Zur strukturellen Untersuchung der Periodizität der Punktdefekte wurde die Oberflächenbeugung eines senkrecht einfallenden Laserstrahls (ähnlich der Röntgen bzw. Elektronenbeugung an atomaren Kristallen) genutzt.

Im Resonator bilden sich bei einem r/a -Verhältnis von 0,36 18 Moden aus. Zur Klassifizierung dieser vergleichsweise großen Anzahl von Moden wurde analog zu Kapitel 5 eine gruppentheoretische Betrachtung durchgeführt, wodurch das Auftreten entarteter Zustände aufgrund der hexagonalen Kristallsymmetrie erklärt werden konnte. Weiterhin wurden, aufgrund der ringförmigen Struktur des Resonators, Feldverteilungen ähnlich den „Whispering Gallery“-Moden identifiziert.

Der Vergleich von Reflexionsmessungen mit Bandstrukturberechnungen für unterschiedliche Defektkonzentrationen zeigt eine Formierung von Bändern (hohe Defektkonzentration) aus diskreten Niveaus (niedrige Defektkonzentration). Dies wird durch den zunehmenden Überlapp der Resonatormoden bei geringeren Defektabständen verursacht. Eine solche Wechselwirkung der Resonatormoden läßt sich mit einem Modell beschreiben, daß dem Modell stark gebundener Elektronen entspricht und auf die photonischen Kristalle übertragen wurde [51, 93]. Es ermöglicht die quantitative Beschreibung der Wechselwirkung. Daraus ergibt sich ein exponentielles Abklingen des Wechselwirkungsparameters B und damit auch der Resonatormoden.

Durch Formierung von Bändern aus den Resonatorniveaus innerhalb der gesamten 1. Brillouinzone ist die Untersuchung der Gruppengeschwindigkeit insbesondere bei flachen Bändern von großem Interesse [3]. So wird bei Vergrößerung des Defektabstandes um einen Faktor 2 die

Gruppengeschwindigkeit um zwei Größenordnungen reduziert. Eine Variation des Defektabstandes erlaubt somit die Einstellung der Gruppengeschwindigkeit innerhalb der Defektbänder. Die in Kapitel 6 beschriebene Funktionalisierung des photonischen Kristalls aus makroporösem Silizium mit HgTe-Quantenpunktemittern läßt sich auch auf die Defektstrukturen anwenden. Dies wird insbesondere durch die zentrale Pore begünstigt. Wie Berechnungen der lokalen Zustandsdichte zeigen, können Emitter innerhalb dieser zentralen Pore sehr gut an die Resonatormoden koppeln. Eine Infiltration der HgTe-Quantenpunktemitter in alle Poren ergab jedoch, daß durch die große Anzahl Resonatormoden und die Integration über mehrere tausend Resonatoren die einzelnen Moden nicht mehr spektral aufgelöst werden können. Um die Anzahl der koppelnden Moden zu reduzieren, wurde ein selektiver Infiltrationsprozeß entwickelt. Dadurch befinden sich die HgTe-Emitter ausschließlich in der zentralen Pore jedes Resonators. Auf diese Weise ist es gelungen die HgTe-Lumineszenz einzelner Resonatormoden spektral aufzulösen.

8. Zusammenfassung und Ausblick

8.1 Zusammenfassung

Makroporöses Silizium, bestehend aus einem hexagonalen Gitter hoch geordneter, quasiunendlich tiefer Löcher in einem Dielektrikum, eignet sich hervorragend als Modellsystem eines zweidimensionalen photonischen Kristalls. Reflexionsmessungen des Lichtes innerhalb der Periodizitätsebene zeigen eine exakte Übereinstimmung mit der ab-initio berechneten Bandstruktur. Dafür war es notwendig die symmetriebedingten Kopplungsbedingungen einer ebenen Welle an die Bänder zu analysieren.

Bisher waren die optischen Eigenschaften des makroporösen Siliziums jedoch nur durch Transmissions- bzw. Reflexionsmessungen des, von außen auf den Kristall auftreffenden, Lichtes zugänglich [26, 9, 73]. Die Lichtemission im Kristall ist insofern interessant, als daß nicht nur die elektromagnetische Welle an sich, sondern auch das emittierende System durch die veränderte photonische Zustandsdichte des Kristalls beeinflusst wird [36, 89, 57]. Die Einbettung von Emittlern im Silizium selbst gestaltet sich jedoch relativ schwierig. Der elektrochemische Ätzprozeß erlaubt nicht die vorherige Einbettung von Lichtemittern und Silizium selbst ist als Lichtemitter ungeeignet. Eine dreidimensionale Berechnung der lokalen Zustandsdichte hat gezeigt, daß an den Porenwänden eine Kopplung von Emittlern (als Dipole angenommen) an die Zustände des photonischen Kristalls möglich ist. Deshalb ist es sinnvoll, Emitter durch einen Infiltrationsprozeß in den Poren zu positionieren. Zur Auswahl geeigneter Emitter waren einige Kriterien zu beachten. Zum einen sollte die Emission eine ausreichende spektrale Bandbreite aufweisen. Zum anderen gibt die elektronische Bandlücke des Siliziums die obere Grenze des zugänglichen Spektralbereiches vor, da nur für Energien unterhalb der Bandlücke die Absorption vernachlässigt werden kann. HgTe-Nanokristalle haben sich als geeignete Emitter erwiesen. Als elektronische Quantenpunkte ist deren Bandlücke durch das Quanten-Confinement vergrößert und somit ein direkter strahlender Übergang möglich. Die Größenverteilung der Nanokristalle führt zu einer Verbreiterung der Lumineszenz (Halbwertsbreite ca. 0,16 eV).

Der notwendige spektrale Überlapp von photonischer Bandstruktur und HgTe-Lumineszenz wird durch die Wahl einer geeigneten Gitterkonstante des hexagonalen Gitters ($a = 700$ nm) sowie durch einen Aufweitungsprozeß der Poren (Radius $r = 0,45 a$) mittels thermischer Oxidation und chemischen Ätzens eingestellt.

Um eine definierte Infiltration vorzunehmen, wurden die HgTe-Nanokristalle in Polymer-Nanoröhren eingebettet, die mit einem Benetzungsprozeß [81] des makroporösen Siliziums hergestellt wurden. Die HgTe-Nanokristalle (mittl. Durchmesser $D = 3,5$ nm) befinden sich so innerhalb der ca. 15 nm starken Wand der Nanoröhre am Rand der Poren. Das Spektrum der HgTe-Lumineszenz wird dabei nicht durch das umgebende Polymer beeinflusst.

Zur spektroskopischen Untersuchung der Lumineszenz der HgTe-Quantenpunkte im photonischen Kristall wurde ein optischer Aufbau realisiert, der es erlaubt, nur das Licht innerhalb der Periodizitätsebene spektral aufgelöst zu detektieren.

Die Messungen im Bereich der fundamentalen Bandlücke zeigen eine Unterdrückung der Emis-

sion innerhalb der Bandlücke und damit das theoretisch erwartete, komplementäre Verhalten zu den Reflexionsmessungen.

Durch die Veränderung des Porenradius und damit der photonischen Bandstruktur war es möglich, den Bereich höherer Bänder zu untersuchen. Die Unterschiede in symmetriebedingten Kopplungsbedingungen von einer äußeren ebenen Welle und einem internen Emitter konnten gezeigt werden. Während die ebene Welle, symmetriebedingt, nur an bestimmte Bänder koppelt, gilt diese Einschränkung für die internen Emitter nicht.

Es besteht ein wesentlicher Unterschied zwischen Reflexions- und Lumineszenzmessung. Bei Reflexionsmessungen kann das Licht innerhalb der photonischen Bandlücke nicht von außen in den Kristall eindringen, es wird reflektiert. Es kommt also zu einer spektralen Selektion des von außen auf den Kristall auftreffenden Lichtes.

Für Emitter mit einer Emissionswellenlänge innerhalb der photonischen Bandlücke wird die Emission in der Periodizitätsebene abgeschwächt, weil es keine Zustände des elektromagnetischen Feldes gibt, an die sie koppeln können. Allerdings ist zu beachten, daß es sich um einen zweidimensionalen photonischen Kristall handelt. Die HgTe-Quantenpunkte können entlang der Poren frei abstrahlen. Es kann somit nicht zu einer vollständigen Unterdrückung der Emission kommen. Dies wird durch die dreidimensionale Berechnung der lokalen Zustandsdichte verdeutlicht. Sie prognostiziert eine Erhöhung bzw. Abschwächung von lediglich einer Größenordnung. Weiterhin handelt es sich nicht um einen unendlichen Kristall, da die Messungen an einer Bruchkante durchgeführt wurden. Emitter, die sich dicht an der Bruchkante befinden können also auch im Spektralbereich der fundamentalen Bandlücke innerhalb der Periodizitätsebene emittieren.

Somit ist festzustellen, daß die dargestellte Funktionalisierung von zweidimensionalen photonischen Kristallen mit HgTe-Quantenpunktemittern eine optische Charakterisierung von photonischen Kristallen ermöglicht. Der auftretenden Modifizierung des Emissionsspektrums liegt die Beeinflussung des emittierenden Systems selbst zugrunde.

Anhand des makroporösen Siliziums als Modellsystem für photonische Kristalle lassen sich durch Veränderungen des Systems die Eigenschaften photonischer Kristalle untersuchen. Ebenso wie in der Festkörperphysik verursachen Punktdefekte im Kristallgitter zusätzliche Zustände in der Bandstruktur. Durch einen einzelnen Punktdefekt entstehen diskrete Defektzustände innerhalb der Bandlücke. Allerdings bricht ein einzelner Punktdefekt auch die Translationssymmetrie des Kristallgitters. Streng genommen ist die Berechnung einer Bandstruktur somit nicht mehr möglich.

Die Herstellung des makroporösen Siliziums erlaubt die Definition jeder einzelnen Porenposition. Somit ist es möglich Poren auszulassen und somit Defektstrukturen im Kristall zu erzeugen. Bei den, in der vorliegenden Arbeit betrachteten, periodischen Punktdefektgittern wurde diese Eigenschaft des makroporösen Siliziums als Modellsystem genutzt. Gleichzeitig erlaubt die periodische Anordnung der Punktdefekte die Berechnung einer Bandstruktur. Die Methode der ebenen Wellen ist weiterhin anwendbar.

Zur strukturellen Untersuchung der periodischen Punktdefekte wurde die Oberflächenbeugung eines senkrecht einfallenden Laserstrahls genutzt. Dieses Verfahren ist ähnlich zur Röntgen- bzw. Elektronenbeugung an Kristallen und wurde hier für einen photonischen Kristall adaptiert.

Durch den Vergleich von Reflexionsmessungen und Bandstrukturberechnungen für unterschiedliche Defektkonzentrationen wurde die Wechselwirkung der Defektzustände innerhalb der photonischen Bandlücke nachgewiesen. Bei einer Annäherung der Punktdefekte kommt es durch die Überlappung der evaneszierenden Resonatormoden zur Ausbildung von Bändern aus diskreten Zuständen. Die Ausbildung von Bändern läßt sich mit einem Modell beschreiben, daß

dem Modell stark gebundener Elektronen entspricht. Dieses Modell wurde hier erstmals auf einen realen mehrdimensionalen photonischen Kristall angewendet. Eine solche quantitative Beschreibung der Wechselwirkung der Punktdefekte ergibt ein exponentielles Abklingen der Resonatormoden mit dem Defektabstand.

Das Auftreten flacher Bänder innerhalb der kompletten 1. Brillouinzone für große Defektabstände ist im Hinblick auf die maximale Gruppengeschwindigkeit in diesen Bändern interessant. So konnte gezeigt werden, daß sich die Gruppengeschwindigkeit, bei einer Vergrößerung des Abstandes der Punktdefekte, gegenüber der Vakuumlichtgeschwindigkeit um mehrere Größenordnungen verringert. Die Gruppengeschwindigkeit ist somit durch eine Variation des Defektabstandes einstellbar.

Die ringförmige Geometrie des einzelnen Punktdefektes mit einer zentralen Pore ermöglichte, wie im Fall der ungestörten photonischen Kristalle, die Infiltration von internen Emitttern. Ausgehend von der lokalen Zustandsdichte, wurde die Kopplung der Emitter an die einzelnen Resonatormoden untersucht. Durch die große Anzahl der Resonatormoden und die Integration über mehrere tausend Resonatoren war bei einer kompletten Infiltration des photonischen Kristalls die spektrale Auflösung einzelner Moden nicht möglich. Die Entwicklung eines selektiven Infiltrationsprozesses ermöglichte das gezielte Füllen der zentrale Pore jedes Punktdefektes. Damit konnten die Emitter nur noch an die Moden koppeln, die einen ausreichend hohen Anteil der Feldenergie innerhalb der zentralen Pore haben. Durch die Reduzierung der Anzahl koppelnder Moden war eine spektrale Auflösung einzelner Moden möglich.

Die vorliegende Arbeit demonstrierte anhand des Modellsystems des makroporösen Siliziums die Modifikation der Lichtemission durch einen photonischen Kristall sowie die Anwendung von festkörperphysikalischen Formalismen auf photonische Kristalle.

8.2 Ausblick

Um an die dargestellten Ergebnisse konsequent anzuknüpfen, ist es notwendig das zeitliche Verhalten der Lichtemission im photonischen Kristall zu betrachten. Anhand der lokalen Zustandsdichte wird für den ungestörten Kristall innerhalb der Bandlücke eine Verlängerung der Lebensdauer des angeregten Emitterzustandes prognostiziert, während die Resonatormoden eine erhöhte Zustandsdichte und damit eine geringere Lebensdauer für den angeregten Emitterzustand aufweisen.

In diesem Zusammenhang ist insbesondere die Untersuchung dreidimensionaler photonischer Kristalle interessant. Der Nachweis der Unterdrückung der spontanen Emission durch einen dreidimensionalen photonischen Kristall mit vollständiger Bandlücke stellt nach wie vor eine Herausforderung dar. Das makroporöse Silizium bietet jedoch ein gutes Potential, um diesen Nachweis zu erbringen, da sich nicht nur zweidimensionale sondern auch dreidimensionale Strukturen erzeugen lassen.

Eine mögliche Anwendung der periodischen Punktdefekte im photonischen Kristall wäre deren Einsatz als Verzögerungskomponenten in photonischen Schaltkreisen, da die Gruppengeschwindigkeit in den Resonatorbändern durch den Abstand der Punktdefekte einstellbar ist. Ebenso eignen sich die periodischen Punktdefekte aufgrund der flachen Bänder als Dispersionskompensatoren [30].

Literaturverzeichnis

- [1] Asano, T., B. Song, Y. Tanaka, and S. Noda. *Appl. Phys. Lett.* **83**, 407 (2003).
- [2] Ashcroft, N. and N. Mermin. *Solid State Physics*. Brooks/Cole, Thomson Learning (1976).
- [3] Astratov, V., R. Stevenson, I. Culshaw, D. Whittaker, M. Skolnick, T. Krauss, and R. De La Rue. *Appl. Phys. Lett.* **77**, 178 (2000).
- [4] Baba, T. *IEEE J. Quantum Electronics* **38**, 909 (2002).
- [5] Bayindir, M., B. Temelkuran, and E. Ozbay. *Phys. Rev. B* **61**, 11855 (2000).
- [6] Bell, P., J. Pendry, L. Moreno, and A. Ward. *Comput. Phys. Commun.* **85**, 306 (1995).
- [7] Benisty, H., C. Weisbuch, D. Labilloy, M. Rattier, C. Smith, T. Krauss, R. Delerue, R. Houdre, U. Oesterle, C. Jouanin, and D. Cassagne. *J. Lightwave Techn.* **17**, 2063 (1999).
- [8] Bimberg, D., O. Madelung, K. Hellwege, H. Landolt, and R. Börnstein. *Physics of group IV elements and III-V compounds*. Springer (1982).
- [9] Birner, A. *Optische Wellenleiter und Resonatoren in zweidimensionalen photonischen Kristallen aus makroporösem Silizium*. Ph.D. thesis, Martin-Luther-Universität Halle (2000).
- [10] Birner, A., U. Grüning, S. Ottow, A. Schneider, F. Müller, V. Lehmann, H. Föll, and U. Gösele. *Phys. Stat. Sol. (a)* **165**, 111 (1998).
- [11] Blanco, A., E. Chomski, S. Grabtchak, M. Ibsate, S. John, S. Leonard, C. Lopez, F. Mesguier, H. Miguez, J. Mondia, G. Ozin, O. Toader, and H. van Driel. *Nature* **405**, 438 (2000).
- [12] Boroditsky, M., R. Vrijen, T. Krauss, R. Coccioli, R. Bhat, and E. Yablonovitch. *J. Lightwave Tech.* **17**, 2096 (1999).
- [13] Boscolo, S., M. Midrio, and T. Krauss. *Opt. Lett.* **27**, 1001 (2002).
- [14] Broser, I., O. Madelung, K. Hellwege, H. Landolt, and R. Börnstein. *Physics of II-VI and I-VII compounds, semimagnetic semiconductors*. Springer (1982).
- [15] Busch, K., S. Mingaleev, A. Garcia-Martin, M. Schillinger, and D. Hermann. *J. Phys. Cond. Mat.* **15**, 1233 (2003).
- [16] Campbell, S. and H. Lewerenz. *Semiconductor Micromachining*, Vol. 1. John Wiley & Sons (1982).
- [17] Chew, W. *Waves and Fields in Inhomogeneous Media*. IEEE Press (1995).
- [18] de Dood, M. *Silicon Photonic Crystals and Spontaneous Emission*. Ph.D. thesis, Universität Utrecht (2002).
- [19] de Dood, M., A. Polman, and J. Fleming. *Phys. Rev. B* **67**, 115106 (2003).
- [20] Dowling, J., M. Scalora, M. Bloemer, and C. Bowden. *J. Appl. Phys.* **75**, 1896 (1994).

- [21] *Fleming, J. and S. Lin.* Opt. Lett **24**, 49 (1999).
- [22] *Fussell, D., R. McPhedran, C. de Sterke, and A. Asatryan.* Phys. Rev. E **66**, 045601 (2003).
- [23] *Gaponik, N., D. Talapin, A. Rogach, A. Eychmüller, and H. Weller.* Nanolett. **2**, 803 (2002).
- [24] *Gerard, J., B. Sermage, B. Gayral, B. Legrand, E. Costard, and V. Thierry-Mieg.* Phys. Rev. Lett **81**, 1110 (1998).
- [25] *Gorodetsky, M., A. Savchenkov, and V. Ilchenko.* Opt. Lett. **21**, 453 (1996).
- [26] *Grüning, U., V. Lehmann, S. Ottow, and K. Busch.* Appl. Phys. Lett. **68**, 747 (1996).
- [27] *Harrison, M., S. Kershaw, M. Burt, A. Rogach, A. Kornowski, A. Eychmüller, and H. Weller.* Pure Appl. Chem. **72**, 295 (2000).
- [28] *Hergert, W. and M. Däne.* Phys. Stat. Sol. (a) **197**, 621 (2003).
- [29] *Ho, K., C. Chan, and C. Soukoulis.* Phys. Rev. Lett. **65**, 3152 (1990).
- [30] *Hosomi, K. and T. Katsuyama.* IEEE J. Quantum Electronics **38**, 825 (2002).
- [31] *Ibach, H. and H. Lüth.* Festkörperphysik. Springer (1990).
- [32] *Inui, T., Y. Tanabe, and Y. Onodera.* Group Theory and Its Applications in Physics. Springer (1996).
- [33] *Jamois, C., R. Wehrspohn, L. Andreani, C. Hermann, O. Hess, and U. Gösele.* Photonics and Nanostruct. **1**, 1 (2003).
- [34] *Jamois, C., R. Wehrspohn, J. Schilling, F. Müller, R. Hillebrand, and W. Hergert.* IEEE Quantum Electron. **38**, 805 (2002,).
- [35] *Joannopoulos, J., R. Meade, and J. Winn.* Photonic crystals: Molding the flow of light. Princeton University Press (1995).
- [36] *John, S.* Phys. Rev. Lett. **58**, 2486 (1987).
- [37] *John, S. and J. Wang.* Phys. Rev. B **43**, 12772 (1991).
- [38] *Johnson, S.* The MIT-Photonic-Bands Manual. Massachusetts Institute of Technology.
- [39] *Johnson, S., S. Fan, P. Villeneuve, and J. Joannopoulos.* Phys. Rev. B **60**, 5751 (1999).
- [40] *Johnson, S. and J. Joannopoulos.* Photonic crystals: The Road from Theory to Practice. Kluwer Academic Publishers (2002).
- [41] *Koenderink, A., L. Bechger, A. Lagendijk, and W. L. Vos.* Phys. Stat. Sol. (a) **197**, 648 (2003).
- [42] *Koenderink, F.* Emission and Transport of Light in Photonic Crystals. Ph.D. thesis, Universität Amsterdam (2003).
- [43] *Kosaka, H., T. Kawashima, T. Tomita, M. Notomi, T. Tamamura, T. Sato, and S. Kawakami.* Phys. Rev. B **58**, 10096 (1998).
- [44] *Kramper, P., M. Agio, C. Soukoulis, A. Birner, F. Müller, R. Wehrspohn, U. Gösele, and V. Sandoghdar.* Phys. Rev. Lett (92), 113903–1 (2004).
- [45] *Labilloy, D., H. Benisty, C. Weisbuch, T. Krauss, R. Delerue, V. Bardinal, R. Houdre, U. Oesterle, D. Cassagne, and C. Jouanin.* Phys. Rev. Lett. **79**, 4147 (1997).
- [46] *Labilloy, D., H. Benisty, C. Weisbuch, T. Krauss, R. Houdre, and R. Oesterle.* Appl. Phys. Lett. **71**, 738 (1997).

- [47] *Le Vassor d Yerville, M., D. Cassagne, and C. Jouanin.* Phys. Stat. Sol. **138**, 17 (2000).
- [48] *Lee, R., O. Painter, B. D'Urso, A. Scherer, and A. Yariv.* Appl. Phys. Lett. **74**, 1522 (1999).
- [49] *Lehmann, V. J.* Electrochem. Soc. **140**, 2836 (1993).
- [50] *Lehmann, V. and H. Föll.* J. Electrochem. Soc. **137**, 653 (1990).
- [51] *Lidorikis, E., M. M. Sigalas, E. N. Economou, and C. M. Soukoulis.* Phys. Rev. Lett. **81**, 1405 (1998).
- [52] *Loncar, M., T. Yoshie, and A. Scherer.* Appl. Phys. Lett **81**, 2680 (2002).
- [53] *Masumoto, Y. and K. Sonobe.* Phys. Rev. B **56**, 9734 (1997).
- [54] *Maxwell, J.* A Dynamical Theory of the Electromagnetic Field. Proceedings of the Royal Society of London **13**, 531 (1991).
- [55] *Meade, R., K. Brommer, A. Rappe, and J. Joannopoulos.* Appl. Phys. Lett. **61**, 495 (1992).
- [56] *Megens, M., J. Wijnhoven, A. Lagengijk, and W. Vos.* Phys. Rev. A **59**, 4727 (1999).
- [57] *Meystre, P. and M. Sargent.* *Elements of Quantum Optics.* Springer (1999).
- [58] *Müller, F., A. Birner, J. Schilling, R. Wehrspohn, and U. Gösele.* Adv. Sol. State Physics **40**, 545 (2000).
- [59] *Noda, S., K. Tomoda, N. Yamamoto, and A. Chutinan.* Science **289**, 604 (2000).
- [60] *Olivier, S., C. Smith, M. Rattier, H. Benisty, C. Weisbuch, T. Krauss, R. Houdre, and U. Osterle.* Opt. Lett. **26**, 1019 (2001).
- [61] *Painter, O., R. Lee, A. Yariv, A. Scherer, J. O'Brien, P. Dapkus, and I. Kim.* Science **284**, 1819 (1999).
- [62] *Painter, O., K. Srinivasan, and P. Barclay.* Phys. Rev. B **68**, 035214 (2003).
- [63] *Painter, O., K. Srinivasan, J. O'Brien, A. Scherer, and P. Dapkus.* J. Opt. A **3**, 161 (2001).
- [64] *Physik. C. Gerthsen and H.O. Kneser and H. Vogel.* Springer (1989).
- [65] *P.Lambropoulos, G. Nikolopoulos, T. Nielsen, and S. Bay.* Rep. Prog. Phys **63**, 455 (2000).
- [66] *Purcell, E.* Phys. Rev. **69**, 681 (1946).
- [67] *Rayleigh, J.* Phil. Mag. **27**, 100 (1914).
- [68] *Rogach, A., M. Harrison, S. Kershaw, A. Kornowski, M. Burt, A. Eychmüller, and H. Weller.* Phys. Stat. Sol. (b) **242**, 153 (2001).
- [69] *Rogach, A., S. Kershaw, M. Burt, M. Harrison, A. Kornowski, A. Eychmüller, and H. Weller.* Adv. Mater. **11**, 552 (1999).
- [70] *Rowson, S., A. Chelnokov, C. Cuisin, and J.-M. Lourtioz.* J. Opt. A: Pure Appl. Opt. **1**, 483 (1999).
- [71] *Sakoda, K.* *Optical Properties of Photonic Crystals.* Springer (2001).
- [72] *Scherer, A., O. Painter, B. D'Urso, R. Lee, and A. Yariv.* J. Vac. Sci. Technol. B **16**, 3906 (1996).
- [73] *Schilling, J.* *Herstellung und optische Eigenschaften von 2D- und 3D- photonischen Kristallen aus makroporösem Silizium.* Ph.D. thesis, Martin-Luther-Universität Halle (2002).

- [74] Schilling, J., F. Müller, S. Matthias, R. Wehrspohn, U. Gösele, and K. Busch. *Appl. Phys. Lett.* **78**, 1180 (2001).
- [75] Schilling, J., R. Wehrspohn, A. Birner, F. Müller, R. Hillebrand, U. Gösele, S. Leonard, J. Mondia, F. Genereux, H. van Driel, P. Kramper, V. Sandoghdar, and K. Busch. *J. Opt. A: Pure Appl. Opt.* **3**, 121 (2001).
- [76] Schriemer, H., H. van Driel, A. Koenderink, and W. Vos. *Phys. Rev. A* **63**, 011801–1 (2000).
- [77] Searson, P., J. Macaulay, and F. Ross. *J. Appl. Phys.* **72**, 253 (1992).
- [78] Sigalas, M. M., R. Biswas, K. Ho, and C. Soukoulis. *Phys. Rev. B* **58**, 6791 (1998).
- [79] Slusher, R., B. Eggleton, and Q. Wang. *Nonlinear Photonic Crystals*. Springer (2003).
- [80] Solovyev, V., S. Romanov, C. S. Torres, M. Müller, R. Zentel, N. Gaponik, A. Eychmüller, and A. Rogach. *J. Appl. Phys.* **94**, 1205 (2003).
- [81] Steinhart, M., J. H. Wendorff, A. Greiner, R. Wehrspohn, K. Nielsch, J. Schilling, J. Choi, and U. Gösele. *Science* **296**, 1997 (2002).
- [82] Sun, H., S. Matsuo, and H. Misawa. *Appl. Phys. Lett.* **64**, 786 (1999).
- [83] Vats, N., S. John, and K. Busch. *Phys. Rev. A* **65**, 043808–1 (2002).
- [84] Vernoy, D., V. Ilchenko, H. Mabuchi, E. Streed, and H. Kimble. *Opt. Lett.* **23**, 247 (1998).
- [85] Vlasov, Y., X. Bo, J. Sturm, and D. Norris. *Nature* **414**, 290 (2001).
- [86] von Freymann, G., W. Koch, D. Meisel, M. Wegener, M. Diem, A. Garcia-Martin, S. Pereira, K. Busch, J. Schilling, R. Wehrspohn, and U. Gösele. *Appl. Phys. Lett.* **83**, 614 (2003).
- [87] Vuckovic, J., M. Loncar, H. Mabuchi, and A. Scherer. *Phys. Rev. E* **665**, 016608 (2002).
- [88] Vuckovic, J., M. Pelton, A. Scherer, and Y. Yamamoto. *Phys. Rev. A* **A**, 023808 (2002).
- [89] Yablonovitch, E. *Phys. Rev. Lett.* **58**, 2059 (1987).
- [90] Yablonovitch, E., T. Gmitter, and K. Leung. *Phys. Rev. Lett.* **67**, 2295 (1991).
- [91] Yariv, A. *Optical Electronics*. Holt, Rinehart and Winston (1985).
- [92] Yariv, A. *Quantum Electronics*. John Wiley and Sons, New York (1988).
- [93] Yariv, A., Y. Xu, R. K. Lee, and A. Scherer. *Opt. Lett.* **24**, 711–713 (1999).
- [94] Zhang, X. *J. Electrochem. Soc.* **138**, 3750 (1991).

Danksagung

Prof. Ulrich Gösele danke ich für die Möglichkeit, hier am Max-Planck-Institut für Mikrostrukturphysik promovieren zu können sowie für anregende Diskussionen, die nicht zwangsläufig wissenschaftlicher Natur sein mußten.

Bei Dr. Margit Zacharias bedanke ich mich für die Möglichkeit, ein solch interessantes Thema bearbeiten zu können, wobei mir eine angenehme Freiheit gelassen wurde aber auch der notwendige Nachdruck ausgeübt worden ist.

Prof. Ralf B. Wehrspohn danke ich für viele aufschlußreiche Diskussionen sowie für die umfangreiche Unterstützung von ihm und seiner gesamten (ehemaligen) Arbeitsgruppe. Auch wenn man nicht immer einer Meinung ist, kann man ihm doch in unkomplizierter Art und Weise seine Meinung sagen.

Ein besonderer Dank gilt Dr. Reinald Hillebrand, der eine große Anzahl von Berechnungen durchführte und mit sehr viel Sorgfalt den Überblick über eine Unmenge von Daten behalten hat.

Bei Dr. Johannes Heitmann bedanke ich mich für eine sehr angenehme und kreative Zusammenarbeit.

Dr. Stefan Schweizer, Sven Matthias und Kornelia Sklarek danke ich für die Probenherstellung, was sich manchmal als eine recht frustrierende Aufgabe erwiesen hat.

Den Kollegen der Haustechnik, Bernd Ernst, Daniel Wagner, Gerhard Reidl und Rene Kunze danke ich für die schnelle und flexible Hilfe, die in vielen Fällen das Arbeiten sehr erleichtert hat.

Bei Jürgen Schöneck bedanke ich mich für die schnelle Hilfe, wenn schnelle Hilfe gebraucht wurde.

Cecile Jamois danke ich für die vielen Berechnungen, ohne die ein Weiterarbeiten oft verzögert worden wäre.

Bei Dr. Martin Steinhart und Dr. Herbert Hofmeister möchte ich mich für die Hilfe bei der Herstellung und Charakterisierung der Polymer-Nanoröhren bedanken.

David P. Fussell danke ich für die Berechnungen der lokalen Zustandsdichte.

Dr. Nikolai Gaponik und Dr. Andrey Rogach danke ich für die Bereitstellung der HgTe-Nanokristalle.

Prof. Dr. Wolfram Hergert und Markus Däne danke ich für die Durchführung der gruppentheoretische Analyse.

Dr. Jörg Schilling, Dr. Frank Müller, Sven Matthias und Florian Kolb möchte ich für die vielen Diskussionen danken, die mir einen enormen Erkenntnisgewinn vermittelten und mich auf neue Ideen brachten.

Dr. Pierre Laveant danke ich für die Gastfreundschaft während meines Aufenthaltes in Zürich sowie die sehr interessanten Filmprojekte.

Nicht zuletzt möchte ich meinen Eltern, meiner Schwester und vielen Freunden für die Unterstützung außerhalb des Institutes danken, indem sie immer wieder Interesse am Fortschreiten meiner Arbeit bekundeten und somit auch einen Teil zum Gelingen beigetragen haben.

Lebenslauf

PERSÖNLICHE DATEN

Name: Richter
Vorname: Stefan
Adresse: Zimmerstr.37, 06366 Köthen
Geburtsdatum: 07. November 1975
Geburtsort: Dresden

BILDUNGSWEG

Sept. 1982 - Juli 1983: Polytechnische Oberschule „Theodor Körner“ in Dresden
Sept. 1983 - Juli 1986: 110. Polytechnische Oberschule in Dresden
Sept. 1986 - Juli 1990: Polytechnische Oberschule „Otto Grotewohl“ in Köthen
Sept. 1990 - Juni 1994: Ludwigsgymnasium Köthen
Juni 1994: Abitur
Aug. 1994 - Okt. 1995: Zivildienst im Kreiskrankenhaus Köthen
Okt. 1995 - Sept. 1996: Physikstudium an der Technischen Universität Dresden
Okt. 1996 - Nov. 1999: Physikstudium an der Otto-von-Guericke Universität Magdeburg
Dez. 1999 - Dez. 2000: Diplomarbeit mit dem Thema: „Ortsaufgelöste Lumineszenzuntersuchungen an nitridischen LED-Strukturen“
Dez. 2000: Diplom in Physik
Jan. 2001 - Februar 2004: Doktorarbeit am Max-Planck-Institut für Mikrostrukturphysik in Halle

Stefan Richter

Eidesstattliche Erklärung

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

Stefan Richter

Halle (Saale), den 09. Februar 2004