

Kapitel 2

Photonische Kristalle

2.1 Einführung

In den letzten 20 Jahren entwickelten sich die Photonischen Kristalle zu einem bevorzugten Gegenstand der Grundlagenforschung aber auch der angewandten Forschung und Entwicklung. Sehr intensiv wird nach Werkstoffen gesucht, die die Ausbreitung elektromagnetischer Wellen beeinflussen, gleich der Art und Weise wie in Halbleiterkristallen, in denen die Bewegung der Elektronen durch ein periodisches Potential und die Existenz von erlaubten und verbotenen Energiebändern bestimmt wird. Die Idee der Photonischen Kristalle wurde erstmalig 1987 von Yablonovich [Yab87] und John [Joh87] unabhängig voneinander theoretisch beschrieben. Es handelt sich hierbei um künstlich hergestellte, dielektrische Medien, in denen der Brechungsindex räumlich periodisch variiert. Die besondere Eigenschaft der Photonischen Kristalle besteht darin, dass sie in Analogie zur Ausbildung der elektronischen Bandstruktur bei Halbleitern eine photonische Bandstruktur besitzen. Diese Bandstruktur besitzt Bereiche, in denen elektromagnetische Wellen innerhalb des Kristalls nicht propagieren können. Diese Intervalle der verbotenen Frequenzen nennt man photonische Bandlücken (PBG = englisch *photonic bandgap*). Die Abwesenheit erlaubter propagierender Moden innerhalb der Struktur verspricht die Realisierbarkeit von optischen Phänomenen wie die Unterdrückung der spontanen Emission, hochreflektierende, omnidirektionale Spiegel oder die verlustarme Wellenführung. Man unterscheidet 1D-, 2D- und 3D-Photonische Kristalle in Abhängigkeit der möglichen Raumrichtungen, in denen der Brechungsindex variiert bzw. der Kristall beim Lichteinfall eine Bandlücke aufweist.

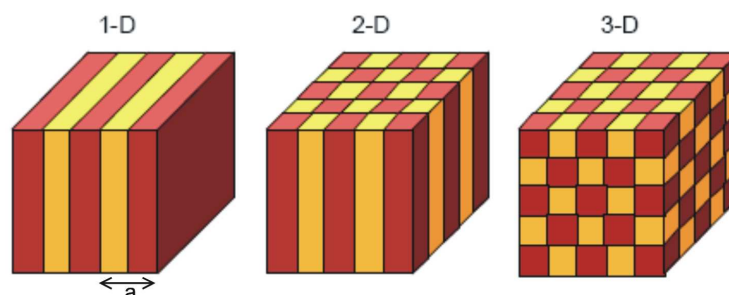


Abbildung 2.1: Beispiele für 1D-, 2D- und 3D-Photonische Kristalle, a -Gitterkonstante nach [Joa95]

Eine elektromagnetische Welle, die auf einen Photonischen Kristall trifft, wird aufgrund der Brechungsindexänderungen an den Grenzflächen gestreut. Ist die Wellenlänge viel größer als die Gitterkonstante des Kristalls, stellt der Kristall für die Welle ein effektives Medium mit

einem mittleren Brechungsindex dar. Wird jedoch die Wellenlänge der elektromagnetischen Strahlung vergleichbar oder kleiner als die Gitterkonstante, tritt Bragg-Streuung auf, und es kommt somit zur Interferenz der gestreuten Wellen.

Bereiche, denen man einer Frequenz einen Wellenvektor zuordnen kann, nennt man Bänder. Ist dies nicht möglich, so kann eine Welle der entsprechenden Frequenz im Kristall nicht propagieren und man spricht von einem Stopband bzw. einer Bandlücke. Aus den Maxwell-Gleichungen ist bekannt, dass sich die spektrale Position der Photonischen Bandlücke linear zur Gitterkonstante des Photonischen Kristalls verhält [Weh03].

2.2 Theoretische Grundlagen der Photonischen Kristalle

2.2.1 Maxwell-Gleichungen in periodisch dielektrischen Medien

Grundlage für die Beschreibung der Ausbreitung des Lichts in Photonischen Kristallen sind die Maxwell-Gleichungen. Diese müssen für eine Struktur mit periodisch variierenden Brechungsindex eines (für eine elektromagnetische Welle) transparenten Mediums betrachtet werden. Dies beschreibt die räumlich periodische Dielektrizitätsfunktion $\varepsilon(\vec{r}) = \varepsilon(\vec{r} + \vec{R})$. \vec{R} ist ein beliebiger Gittervektor im Kristall. Das zugehörige Eigenwertproblem setzt sich aus den Maxwell-Gleichungen

$$\nabla \times \vec{E}(\vec{r}, t) = -\mu_0 \frac{\partial \vec{H}(\vec{r}, t)}{\partial t} \quad (2.1)$$

$$\nabla \times \vec{H}(\vec{r}, t) = \varepsilon(\vec{r}) \varepsilon_0 \frac{\partial \vec{E}(\vec{r}, t)}{\partial t} \quad (2.2)$$

zu

$$\nabla \times \left(\frac{1}{\varepsilon(\vec{r})} \nabla \times \vec{H}(\vec{r}, t) \right) = -\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{H}(\vec{r}, t)}{\partial t^2} \quad (2.3)$$

zusammen. Dabei ist \vec{E} das elektrische Feld, \vec{H} das magnetische Feld und c die Lichtgeschwindigkeit im Vakuum ($c = \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_0 \mu_0}}$). Die Zeitabhängigkeit lässt sich für einen unendlich ausgedehnten Kristall mit dem Ansatz harmonischer Wellen $\vec{H}(\vec{r}, t) = \vec{H}(\vec{r}, \omega) e^{i\omega t}$ separieren und man erhält

$$\nabla \times \left(\frac{1}{\varepsilon(\vec{r})} \nabla \times \vec{H}(\vec{r}, \omega) \right) - \frac{\omega^2}{c^2} \vec{H}(\vec{r}, \omega) = 0 \quad (2.4)$$

Im Gegensatz zu Elektronen in kristallinen Festkörpern wird dieses Eigenwertproblem nicht durch eine skalare Funktion (Schrödinger-Gleichung $\psi(\vec{r})$) sondern durch ein Vektorfeld $\vec{H}(\vec{r})$ beschrieben. Die Lösungen der Eigenwertgleichung (2.4) können auch hier, wie in der Festkörperphysik üblich, nach dem Bloch-Theorem zu

$$\vec{H}(\vec{r}, \omega) = e^{i\vec{k}\vec{r}} u_{n,\vec{k}}^H(\vec{r}) \quad (2.5)$$

mit

$$u_{n,\vec{k}}^H(\vec{r}) = u_{n,\vec{k}}^H(\vec{r} + \vec{R}) \quad (2.6)$$

gefunden werden.

Als direkte Folge von (2.5) können nur Lösungen für (2.4) auftreten, die sich aus einer ebenen Welle $e^{i\vec{k}\vec{r}}$ und einer gitterperiodischen Funktion $u_{n,\vec{k}}^H(\vec{r})$ zusammensetzen.

2.2.2 Kristallgitter und reziprokes Gitter

Ein Kristall zeichnet sich dadurch aus, dass seine Bausteine (i. a. Atome), aus denen er aufgebaut ist, räumlich periodisch angeordnet sind. Auch für die Beschreibung der Periodizität im Photonischen Kristall nutzt man Kristallgitter. Punkte, deren Koordinaten sich um einen Gittervektor \vec{R} unterscheiden, besitzen die gleichen Kristalleigenschaften. Dabei ist \vec{R} ein beliebiger Gittervektor im Kristall mit den primitiven Translationsvektoren \vec{a}_1 , \vec{a}_2 und \vec{a}_3 ($\vec{R} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3$). Aus dieser Definition geht klar hervor, dass man mit diesem Formalismus zunächst unendlich ausgedehnte Kristallsysteme betrachtet. Die kleinste Raumeinheit, die die vollständige Information über den Kristall enthält, heißt Wigner-Seitz-Zelle. Durch Aneinandersetzen von Wigner-Seitz-Zellen kann man den gesamten Kristall aufbauen. Anstatt das Kristallgitter im realen oder Ortsraum für die weitere Berechnung zu verwenden, ist es meist zweckmäßig, sich auf das zugehörige Gitter im reziproken Raum (\vec{k} -Raum) zu beziehen, das von den primitiven Vektoren \vec{b}_i aufgespannt wird. Diese ergeben sich aus den Translationsvektoren des Realraumgitters wie folgt:

$$\begin{aligned} \vec{b}_1 &= 2\pi \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)} \\ \vec{b}_2 &= 2\pi \frac{\vec{a}_3 \times \vec{a}_1}{\vec{a}_2 \cdot (\vec{a}_3 \times \vec{a}_1)} \\ \vec{b}_3 &= 2\pi \frac{\vec{a}_1 \times \vec{a}_2}{\vec{a}_3 \cdot (\vec{a}_1 \times \vec{a}_2)} \end{aligned}$$

Für das Produkt aus einem Gittervektor und einem reziproken Gittervektor \vec{G} gilt:

$$\vec{G} \cdot \vec{R} = m \cdot 2\pi \quad \text{mit} \quad m = 0, \pm 1, \pm 2 \dots \quad (2.7)$$

In Analogie zur Wigner-Seitz-Zelle definiert man die 1. Brillouin-Zone (1. BZ) als Elementarzelle des reziproken Gitters, auf die man die Lösung des Eigenwertproblems (2.4) beschränkt. Aufgrund der Periodizität im Ortsraum genügt es zur vollständigen Beschreibung, die erhaltene Dispersionsrelation für die \vec{k} -Vektoren in der ersten Brillouin-Zone ($\vec{k} \leq \frac{\pi}{a}$) zu bestimmen. \vec{k} -Vektoren, die außerhalb der Brillouin-Zone liegen, können mittels der reziproken Gittervektoren auf diese zurückgefaltet werden.

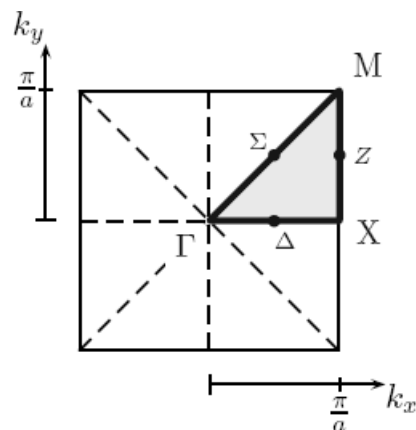


Abbildung 2.2: Brillouin-Zone für ein Quadratgitter mit Hochsymmetriepunkten. Die markierte Dreiecksfläche entspricht der irreduziblen BZ. Die Berechnung der Bandstruktur erfolgt für die \vec{k} -Werte entlang der fett gedruckten Linien nach [Sak01].

In zwei- und dreidimensionalen Photonischen Kristallen treten neben der Translationssymmetrie zusätzlich noch Rotationssymmetrien auf. Mit ihnen kann der Bereich der verwendeten \vec{k} -Vektoren noch weiter eingeschränkt werden. Den kleinsten Bereich, aus dem durch Symmetrieoperationen alle \vec{k} -Vektoren gewonnen werden können, bezeichnet man als irreduzible Brillouin-Zone. In Abbildung 2.2 entspricht diese der markierten Dreiecksfläche. Man beschränkt sich bei der Darstellung auf \vec{k} -Werte, die auf den Linien zwischen Hochsymmetriepunkten liegen. Im Quadratgitter sind dies die Punkte Γ , X und M. Dies ermöglicht die im Anhang A in Abbildung A.1 dargestellte eindimensionale Auftragung der Bandstruktur [Die03]. Da die Bandstrukturberechnung für diese Arbeit nicht unmittelbar genutzt wird, sei auf den Anhang A verwiesen.

2.2.3 Symmetrien und Polarisation im 2D-Kristall

2D-Kristalle bestehen meistens aus parallel angeordneten, in eine Richtung unendlich ausgedehnten Zylindern (Abbildung 2.3) bzw. aus einer Struktur, bei der Poren in ein Substrat eingelassen wurden. Für zweidimensionale Kristalle kommt es aus Symmetrieüberlegungen zu einer Entkopplung der Polarisationsfreiheitsgrade.

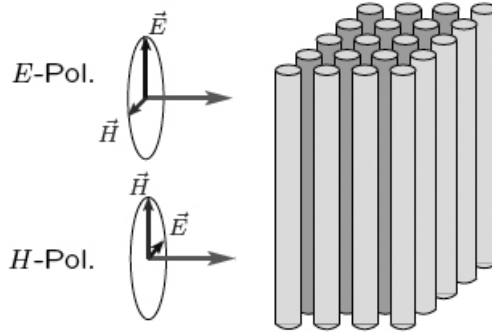


Abbildung 2.3: E- und H-Polarisation für einen 2D-Kristall nach [Die03]

Zur Definition der H- und E-Polarisation wird ein Photonischer Kristall betrachtet, der aus Zylindern aufgebaut ist. Die Zylinder seien parallel zur y-Achse unendlich ausgedehnt. Die Propagation findet in der x-z-Ebene ($y = 0$) statt. Damit existieren für dieses System zwei verschiedene Polarisationen:

- H-Polarisation: $\vec{H} = (0, H_y, 0)^T$ parallel zu den Zylindern, $\vec{E} = (E_x, 0, E_z)^T$ in der Propagationsebene
- E-Polarisation: $\vec{E} = (0, E_y, 0)^T$ parallel zu den Zylindern, $\vec{H} = (H_x, 0, H_z)^T$ in der Propagationsebene

Die Argumentation beruht darauf, dass ein in der x-z-Ebene liegendes Feld aufgrund der auftretenden Streuung immer eine longitudinale Komponente bezüglich des einfallenden \vec{k} -Vektors (ebenfalls in der x-z-Ebene) entwickelt. Ein parallel zu den Zylindern ausgerichtetes Feld steht jedoch immer senkrecht auf dem einfallenden \vec{k} -Vektor und behält seine Transversalität bei.

Für beide Polarisationen ergibt sich eine eigene Bandstruktur, die Bandlücken aufweisen kann. Wenn die Bandlücken von H- und E-Polarisation überlappen, spricht man von vollständiger 2D-Bandlücke. Elektromagnetische Wellen mit einer Frequenz innerhalb dieser kompletten Bandlücke können sich damit nicht im 2D-Kristall parallel zur x-z-Ebene ausbreiten. Befindet

man sich mit der gewählten Frequenz in einem Stoppband genügt es, die Richtung der einfallenden Welle zu ändern, um Propagation zu erreichen. In einer Bandlücke hingegen muss man hierfür die Orientierung der Felder ändern. In vollständigen Bandlücken gibt es keine Möglichkeit, für eine gegebene Frequenz Propagation zu erreichen.

