

ФОТОННЫЕ КРИСТАЛЛЫ И МИКРОРЕЗОНАТОРЫ НА ОСНОВЕ АНИЗОТРОПНОГО МЕЗОПОРИСТОГО КРЕМНИЯ

Введение

Впервые пористый кремний (*por-Si*) был получен А. Улиром в 1956 г. в ходе исследования процесса электрохимической полировки поверхности кремния в водных растворах HF [1], но интенсивное изучение его уникальных свойств началось сравнительно недавно, лишь после обнаружения фотолюминесценции в видимом диапазоне спектра [2].

В настоящее время *por-Si* находит широкое применение во многих устройствах интегральной оптики, среди которых можно отметить: фотонные кристаллы (ФК) [3], микрорезонаторы [4], волноведущие структуры [1], фотодетекторы [5], сенсоры [6] и др.

Как известно, пленки *por-Si* можно изготовить при помощи анодного электрохимического травления пластин монокристаллического кремния [7]. При электрохимическом травлении твердых тел происходит рост пор нанометрового размера и формирование нанокристаллов. Благодаря этому, данный процесс стал одним из способов создания оптических сред с новыми свойствами. К числу преимуществ данной методики получения наноструктур следует отнести быстроту и контролируемость процесса, а также его невысокую стоимость. В том случае, когда характерные размеры пор и нанокристаллов много меньше длины волны, наноструктурированный материал можно рассматривать как однородную оптическую среду, обладающую некоторым эффективным показателем преломления, отличным от показателей преломления веществ, образующих наноструктуру (т.н. модель эффективной среды).

Выбирая параметры электрохимической обработки, возможно в широких пределах управлять оптическими свойствами (показателем преломления, величиной двулучепреломления) и толщиной пленок пористых материалов, чтобы создать оптические среды и устройства с требуемыми свойствами. Пористость P и эффективный показатель преломления $n_{eff} = \sqrt{\epsilon_{eff}}$ пористого кремния определяются плотностью тока электрохимического травления, таким образом,

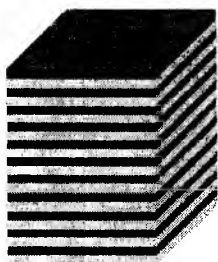


Рис.1

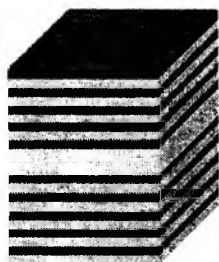


Рис. 2

периодически варьируя эту величину, мы можем получить структуру с чередующимися слоями различной пористости и, следовательно, различными показателями преломления. Таким образом, будет сформирован одномерный ФК (рис. 1), или как его еще принято называть распределенный Брегговский отражатель (РБО). Когда между двумя РБО находится полуволновой слой, получаем микрорезонатор (рис. 2).

Как показано в работе [7], слои мезопористого кремния с размерами пор приблизительно 10-30 нм, созданные на подложке монокристаллического кремния с низкой симметрией поверхности, обладают свойствами отрицательного одноосного кристалла с величиной двулучепреломления $\Delta n = n_o - n_e$ вплоть до 0.24 (здесь n_o и n_e – показатели преломления для обыкновенного и необыкновенного лучей соответственно). Как следует из результатов данной работы, величина наведенного двулучепреломления зависит от пористости материала. Увеличение пористости сопровождается уменьшением эффективных показателей преломления для обыкновенной и необыкновенной волн и увеличением их разности, что приводит к возрастанию величины двулучепреломления.

Таким образом, мезопористый кремний характеризуется значительной величиной анизотропии показателей преломления, что оказывает влияние на оптические характеристики уст-

роиств на его основе. Поэтому, представляется необходимым и актуальным теоретическое исследование данного влияния, что и является целью данной работы.

Следует отметить, что пористый кремний представляет собой «комплексную» диэлектрическую среду, диэлектрические свойства которой зависят как от структуры его решетки, так и от газа, абсорбированного в поры. При теоретическом моделировании подобных сред используют так называемую модель эффективной среды, которая позволяет заменить реальную структуру, содержащую расположенные случайным образом регионы с различными показателями преломления, средой с одним, эффективным, показателем преломления. Таким образом, при численном моделировании необходимо получить адекватную модель исследуемой среды, для этого чаще всего, применяют одну из трех моделей:

– модель Бруггемана [8]

$$(1-P) \frac{\epsilon_{Si} - \epsilon_{eff}}{\epsilon_{Si} + 2\epsilon_{eff}} + P \frac{\epsilon_{void} - \epsilon_{eff}}{\epsilon_{void} + 2\epsilon_{eff}} = 0; \quad (1)$$

– модель Максвелла-Гарнета [9]

$$(1-P) \frac{\epsilon_{Si} - \epsilon_{void}}{\epsilon_{Si} + 2\epsilon_{void}} = \frac{\epsilon_{eff} - \epsilon_{void}}{\epsilon_{eff} + 2\epsilon_{void}}; \quad (2)$$

– модель Лойенга [10]

$$\epsilon_{eff}^{1/3} = (1-P) \epsilon_{Si}^{1/3} + P \epsilon_{void}^{1/3}. \quad (3)$$

Модели (1) – (3) позволяют определить эффективную диэлектрическую проницаемость среды ϵ_{eff} на основании следующих, известных, величин: диэлектрической проницаемости кремния ϵ_{Si} , диэлектрической проницаемости газа заполняющего поры ϵ_{void} (в нашем случае поры заполнены воздухом) и пористости среды P .

В данной работе при расчете эффективной диэлектрической проницаемости пористого кремния использована модифицированная модель Бруггемана [11], которая учитывает форму кремниевых нанокристаллов и форму пор:

$$(1-P) \frac{\epsilon_{Si} - \epsilon_{eff}}{\epsilon_{eff} - L \left(\epsilon_{Si} - \epsilon_{eff} \right)} + P \frac{\epsilon_{void} - \epsilon_{eff}}{\epsilon_{eff} - L \left(\epsilon_{void} - \epsilon_{eff} \right)} = 0. \quad (4)$$

В (4) L – фактор деполяризации, зависящий от формы кремниевого нанокристалла и поляризации падающего излучения (в общем случае L представляет собой тензор). Сравнение экспериментальных данных [11] и результатов расчетов по формуле (4) демонстрирует хорошее совпадение для случая, когда кремниевые нанокристаллы и поры предполагаются имеющими форму эллипсоидов вращения. Для эллипсоидов вращения величина L определяется соотношением полуосей эллипсоида.

В данной работе представлена физико-математическая модель, описывающая одномерные микроструктуры оптического диапазона на основе анизотропного мезопористого кремния. При теоретическом моделировании был использован метод скаляризации электромагнитного поля [12], в результате чего исходная векторная задача дифракции электромагнитного поля была сведена к краевой задаче для двух скалярных потенциалов. Среди основных преимуществ метода скаляризации по сравнению с методами, основанными на технике исключения компонент поля (например, бескоординатный метод [13] и метод исключения компонент напряженностей электромагнитного поля, параллельных оси стратификации [14]), отметим, что векторы напряженностей электромагнитного поля в анизотропной среде удастся выразить через две скалярные величины – потенциалы. Существенно, что представление амплитуд элек-

ромагнитного поля через скалярные потенциалы, равно как и формулировка задачи для скалярных потенциалов, не зависит от специального выбора координатной системы, в которой определяются диады материальных параметров. Кроме того, нет необходимости в использовании матричного исчисления: искомые физические величины выражаются непосредственно через решения краевой задачи для скалярных потенциалов. Основным же достоинством данного метода является возможность единообразного рассмотрения однородных, кусочно-однородных и непрерывно-неоднородных плоскостойких анизотропных сред.

Отметим, что для однородного произвольно анизотропного слоя, а также для слоя, материальные параметры которого непрерывно изменяются вдоль оси стратификации в соответствии с заданным законом, возможно аналитическое решение задачи рассеяния плоской волны. Нахождение и анализ такого решения могут оказаться достаточно трудоемкими. В этой связи представляется целесообразным разработка эффективных численных алгоритмов вычисления коэффициентов отражения и прохождения плоской волны. В настоящей работе предложен численный алгоритм на основе метода конечных разностей [15].

В качестве результата численного моделирования приведены спектральные характеристики для одномерных ФК и микрорезонаторов с учетом эффекта двулучепреломления.

Постановка задачи

Модель для исследования спектральных характеристик микроструктур на основе пористого кремния (рис. 3), представляет собой анизотропную плоскостойкую среду занимающую область: $-\infty < x, y < \infty$, $-b < z < 0$, помещенную на полубесконечную проницаемую для электромагнитного поля однородную подложку с материальными параметрами ϵ_c и $\mu_c = 1$

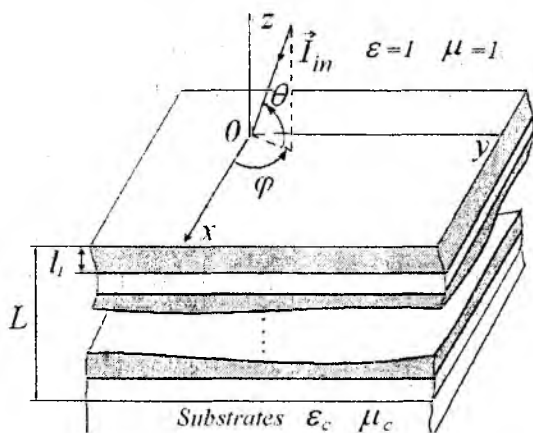


Рис. 3

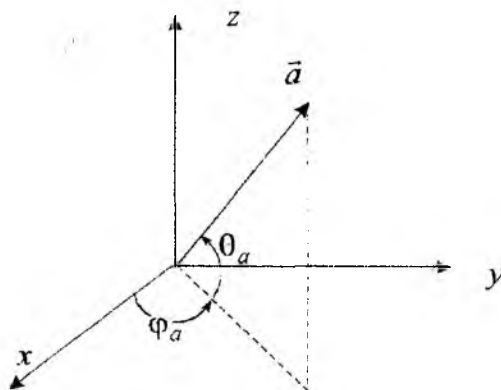


Рис. 4

Среда состоит из N слоев мезопористого кремния с произвольной пористостью P_j ($j = 1, 2, \dots, N$), каждый из слоев характеризуется толщиной h_j , а также диэлектрической и магнитной проницаемостями (причем $\mu_j = 1$). Будем считать, что в пределах каждого слоя анизотропный материал является одноосным с произвольной ориентацией оптической оси. В произвольной точке пространства диэлектрическая проницаемость материала определяется следующим образом:

$$\hat{\epsilon}(z) = \epsilon_{\perp}(z) \hat{I} + (\epsilon_{\parallel}(z) - \epsilon_{\perp}(z)) \bar{a} \bar{a}, \quad (5)$$

где \hat{I} – единичная диада; \bar{a} – единичный вектор в направлении оптической оси, в декартовой системе координат он имеет следующие компоненты:

$$\bar{a} \equiv \bar{a}(z) = (\cos \theta_a \sin \varphi_a, \cos \theta_a \cos \varphi_a, \sin \theta_a). \quad (6)$$

Для ясности угол скольжения θ_a и азимутальный угол φ_a , определяющие направление оптической оси, показаны на рис. 4, при этом:

$$-\pi/2 \leq \theta_a \leq \pi/2, \quad 0 \leq \varphi_a \leq 2\pi. \quad (7)$$

Также считаем, что падающая (s или p поляризованная) плоская волна приходит из свободного полупространства $z > 0$ в направлении единичного вектора \vec{l}_{in} , которое определяется углом скольжения θ и азимутальным углом φ (см. рис. 3):

$$\vec{l}_{in} = (\cos \theta \cos \varphi, \cos \theta \sin \varphi, -\sin \theta), \quad (8)$$

$$-\pi/2 \leq \theta \leq \pi/2, \quad 0 \leq \varphi \leq 2\pi.$$

При теоретическом моделировании был использован метод скаляризации электромагнитного поля [12] в комплексе с методом конечных разностей [15]. В результате была получена система линейных алгебраических уравнений, решая которую находим неизвестные коэффициенты прохождения и отражения для исследуемой структуры.

Для случая s - поляризации данная система имеет вид

$$\begin{cases} x_N \left(1 - ik_0 b \lambda_{ss}^{(a)} \right) - x_{N-1} - ik_0 b \lambda_{sp}^{(a)} y_N = f_{ss}, \\ -ik_0 b \lambda_{ps}^{(a)} x_N + y_N \left(1 - ik_0 b \lambda_{pp}^{(a)} \right) - y_{N-1} = 0; \\ A_j x_{j+1} + B_j x_j + C_j x_{j-1} + D_j y_{j+1} + F_j y_j + G_j y_{j-1} = 0, \\ P_j x_{j+1} + Q_j x_j + R_j x_{j-1} - K_j y_{j+1} - L_j y_j - M_j y_{j-1} = 0, \\ (j=1, 2, \dots, N-1); \end{cases} \quad (9)$$

$$\begin{cases} x_1 - x_0 \left(1 + ik_0 b \lambda_{ss}^{(u)} \right) - ik_0 b \lambda_{sp}^{(u)} y_0 = f_{ss}, \\ y_1 - y_0 \left(1 + ik_0 b \lambda_{pp}^{(u)} \right) - ik_0 b \lambda_{ps}^{(u)} y_0 = 0. \end{cases}$$

В (9) использованы следующие обозначения: k_0 – волновое число в вакууме; b – толщина микроструктуры; x_0, \dots, y_N – неизвестные, $A_j, \dots, M_j, f_{ss}, \lambda_{ss}^{(a)}, \dots, \lambda_{pp}^{(u)}$ – комплексные величины, зависящие от: $k_0, b, \hat{\varepsilon}(z), \mu_j, \theta_a, \varphi_a, \theta, \varphi$.

Для p - поляризации система уравнений имеет подобный вид (9).

Неизвестные коэффициенты прохождения и отражения получаем из данной системы следующим образом:

– p поляризация:

$$R_{pp} = y_{N-1}, R_{sp} = x_N, T_{pp} = y_0, T_{sp} = x_0. \quad (10)$$

– s поляризация:

$$R_{ss} = x_{N-1}, R_{ps} = y_N, T_{ss} = x_0, T_{ps} = y_0. \quad (11)$$

В формулах (10), (11) введены комплексные коэффициенты отражения $R_{\nu\xi}$ и прохождения $T_{\nu\xi}$ ($\nu, \xi = p, s$). Они зависят от частоты падающего излучения, углов θ и φ , а также прочих геометрических параметров задачи. Коэффициенты с совпадающими индексами ($\nu = \xi$) описывают преобразование падающей волны в волну с той же поляризацией, а коэффициенты с разноименными индексами ($\nu \neq \xi$) – в волну ортогональной поляризации. В принятой нами записи $R_{\nu\xi}, T_{\nu\xi}$ левый индекс ν отвечает отраженной или прошедшей

волне, а правый ξ – падающей. Заметим, что присутствие “перекрестных” коэффициентов отражения R_{sp}, R_{ps} и прохождения T_{sp}, T_{ps} , которые ответственны за деполяризацию падающей волны s - или p -поляризованной волны, является характерной особенностью анизотропных материалов [13].

Численные результаты

В данной части работы приведены результаты численного моделирования, иллюстрирующие влияние анизотропии и неоднородности материала слоев исследуемых структур на закономерности дифракции нормально падающей плоской электромагнитной волны.

Были исследованы два типа структур – фотонный кристалл и микрорезонатор на основе мезопористого кремния. Первая структура состоит из шести пар анизотропных слоев. Строительным блоком являются два слоя с пористостью 80 и 70 % соответственно. Эффективные показатели преломления структуры, отвечающие данной пористости, получены из (4) и составляют: $n_1 = 1,39$, $n_2 = 1,58$. Физическая толщина слоев выбиралась таким образом, чтобы оптическая толщина была равной $\lambda_c/4$, где λ_c – Брегговская длина волны, которая совпадает с центром ФЗЗ при нормальном падении ($\theta = 90^\circ$). В нашем случае $\lambda_c = 800$ нм. Величины анизотропии показателей преломления для данного случая составляют $\Delta n_1 = 0.07$ и $\Delta n_2 = 0.08$ соответственно [16]. Расчеты проведены для случая, когда оптические оси всех слоев структуры ориентированы в одном и том же направлении (при расчетах использовано значение угла скольжения $\theta_a = 45^\circ$).

Микрорезонатор образован двумя РБО (состоящими из 6 пар слоев каждый), разделенных между собой слоем с оптической толщиной $\lambda_c/2$.

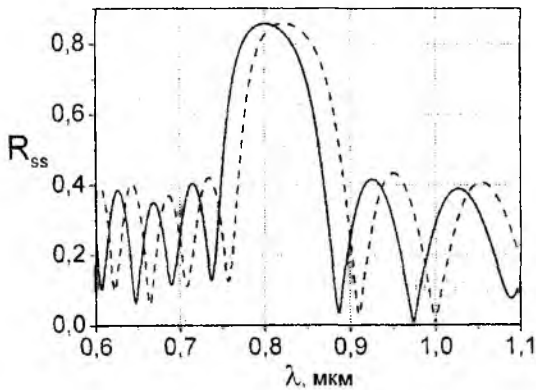


Рис. 5

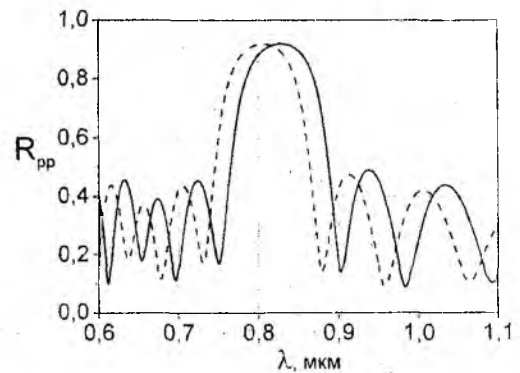


Рис. 6

Как было указано, физико-математическая модель взаимодействия плоской электромагнитной волны с исследуемыми структурами исчерпывающим образом может быть описана в терминах амплитудных коэффициентов прохождения и отражения. Причем одна из важных особенностей явлений дифракции плоских волн в слоистых анизотропных средах заключается в том, что линейно поляризованные волны при отражении и прохождении приобретают поперечную эллиптическую поляризацию.

На рис. 5 – 7 представлены спектры отражения s - и p -поляризованных плоских волн от фотонного кристалла (рис. 5 – 6) и микрорезонатора (рис. 7) для случаев, когда азимутальный угол φ_a , определяющий положение оптической оси, принимает значения 0° (сплошные кривые на рисунках) и 90° (пунктирные кривые).

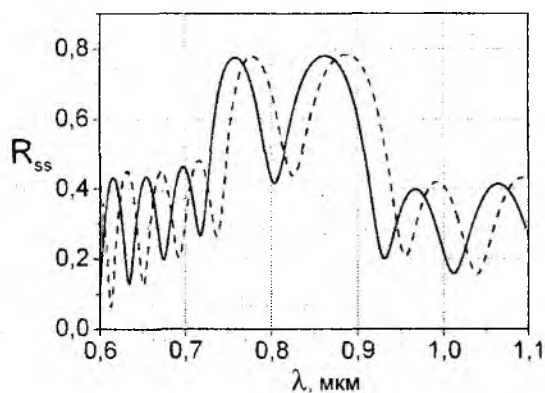


Рис. 7

На рис. 7 представлены спектры отражения s -поляризованной волны от микрорезонатора. В данном случае наблюдается ФЗЗ с коэффициентом отражения 0,79 в диапазоне длин волн 720 (735) – 931 (955) нм и наличием микрорезонаторной моды на длине волны 803 (824) нм.

Как следует из данных зависимостей, спектральное положение краев ФЗЗ, а также положение пиков пропускания в фотонных запрещенных зонах изменяются при изменении положения оптической оси структуры по отношению к плоскости падения s - (или p -) поляризованной плоской волны, что и обуславливается анизотропией среды. Наибольший сдвиг достигается при азимутальном угле $\varphi_a = 90^\circ$ и составляет порядка 20 нм, что согласуются с результатами экспериментальной работы [16].

На рис. 8 представлены спектры отражения s - (сплошная кривая) и p - (пунктирная кривая) поляризованного излучения от микрорезонатора. Данный рисунок соответствует азимутальному углу $\varphi_a = 0^\circ$. Спектры отражения демонстрируют наличие фотонных запрещенных зон и микрорезонаторных мод внутри ФЗЗ для обеих поляризаций. Как следует из рисунка, изменение поляризации падающего излучения приводит к сдвигу микрорезонаторной моды внутри фотонной запрещенной зоны и этот сдвиг может достигать 30 нм. Данный эффект также является проявлением двулучепреломления и может быть использован для разделения поляризаций падающего излучения.

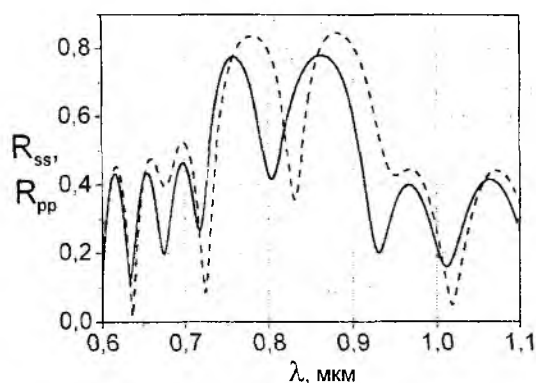


Рис. 8

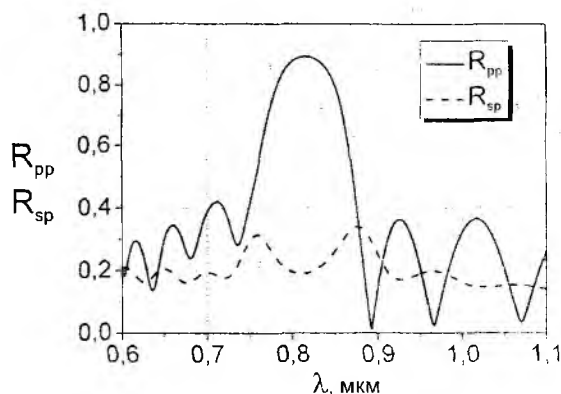


Рис. 9

Рис. 9 содержит спектры отражения p -поляризованного излучения от ФК для случая, когда азимутальный угол φ_a , определяющий положение оптической оси в каждом из слоев структуры, удовлетворяет соотношению $\varphi_a \neq m \cdot \pi/2$, ($m = 0, 1, 2, 3, 4$). В данном случае имеет место преобразование падающей плоской волны как в волну с той же поляризацией, так и в волну с ортогональной поляризацией, что является еще одним проявлением эффекта дву-

лучепреломления. При расчетах выбрано значение угла $\varphi_a = 45^\circ$, при котором наблюдается максимальное преобразование падающей волны.

Выводы

Проведено теоретическое исследование спектральных характеристик одномерных фотонных кристаллов и микрорезонаторов на основе анизотропного мезопористого кремния и выявлены закономерности дифракции плоских волн на таких структурах.

Полученные результаты могут быть использованы при проектировании устройств интегральной оптики на основе мезопористого кремния. В частности, такие структуры могут быть использованы:

- как полуволновые и четвертьволновые фазовые пластинки;
- спектрально- и поляризационно-селективные элементы (фильтры);
- электрически перестраиваемые фильтры – в этом случае требуется заполнение пор жидкими кристаллами;

Список литературы: 1. *A. Uhler.* // Bell Syst. Tech. J. 1956. Vol. 35. P. 333. 2. *L.T. Canham.* // Appl. Phys. Lett. 1990. Vol. 57. P. 1046. 3. *Joannopoulos, J. D., R. D. Meade, and J. N. Winn.* Photonic Crystals, Molding the Flow of Light. Princeton University Press. 1995. 4. *N. Samuoliene, E. Šatkovskis.* Reflectivity Modelling of All-Porous-Silicon Distributed Bragg Reflectors and Fabry-Perot Microcavities // Nonlinear Analysis: Modelling and Control. 2005. Vol. 10, No. 1, PP. 83–91. 5. *J. P. Zheng K. L. Jiao, W. P. Shen, W. A. Anderson, H. S. Kwok.* Highly Sensitive Photodetector Using Porous Silicon // Applied Physics Letters, 1992. Vol. 61. P. 459 – 461. 6. *S. Chan, S. R. Horner, P. M. Fauchet, and B. L. Miller.* Identification of Gramnegative Bacteria Using Nanoscale Silicon Microcavities // Journal of the American Chemical Society. 2001. Vol. 123. PP. 11797 – 11798. 7. *D. Kovalev, G. Polisski, J. Diener, H. Heckler, N. Künzner, V. Yu. Timoshenko, and F. Koch.* Strong In-plane Birefringence of Spatially Nanostructured Silicon // Applied Physics Letters., 2001. Vol. 78, P. 916. 8. *D.A.G. Bruggeman.* Berechnung Verschiedener Physikalischer Konstanten von Heterogenen Substanzen // Ann. Phys. (Leipzig). 1935. Vol. 24. P. 636 – 679. 9. *J. C. Maxwell Garnett* // Phil.Trans. R. Soc. Lond. 203. 1904. PP. 385 – 420. 10. *H. Looyenga.* // Physica. 1965. Vol. 31. PP. 401 – 406. 11. *Spanier J.E., Heman I.P.* // Phys. Rev. B. 2000 Vol. 61. No. 10. P. 437. 12. *S.N. Shulga and other.* Calculation of the Coefficients of Reflection and Transmission of a Plane Electromagnetic Wave for an Inhomogeneous Gyrotropic Layer by the Finite-Difference Method // Journal of Communications Technology and Electronics. 2000. Vol. 45. No. 6. PP. 662 – 669. 13. *Федоров М.И.* Оптика анизотропных сред. Минск: Изд. АН БССР, 1958. 380 с. 14. *Berreman D.W.* Optics in stratified and anisotropic media: 4×4-matrix formulation // J. Opt. Soc. Am. 1972. Vol. 62, No. 4. P. 502 – 510. 15. *Самарский А.А., Гулин А.В.* Численные методы. М.: Наука, 1989. 432 с. 16. *Aktsipetrov O.A., Dolgova T.V., Soboleva I.V. and Fedyanin A A.* Anisotropic Photonic Crystals and Microcavities Based on Mesoporous Silicon // Physics of the Solid State. 2005. Vol.47, No.1, PP. 156-158.

Харьковский национальный
университет радиоэлектроники
Харьковский национальный университет
им. В.Н. Каразина

Поступила в редколлегию 18.06.2009