Michael Flockert

Herstellung und Charakterisierung eines gittergekoppelten Hybrid - Moden - Sensors

Diplomarbeit im

Fachbereich Ingenieurwissenschaften
Studienbereich Physikalische Technik
Fachhochschule Wiesbaden

Bearbeitet am

Max-Planck-Institut für Polymerforschung, Mainz

Referent:	Prof. Dr. Uwe Langbein
Koreferent:	Dipl. Ing. Bernhard Menges

Januar 2008

Ich versichere, die vorliegende Arbeit selbständig unter der Anleitung des Referenten und des Koreferenten durchgeführt und nur die angegebenen Referenzen und Hilfsmittel benutzt zu haben.

Mainz, den 18.1.2008

Inhaltsverzeichnis

1. Einleitung 5

2. Grundlagen 7

2.1 Monochromatische elektromagnetische Wellen 7

2.2 Reflexion und Brechung an planaren Grenzflächen 8
2.2.1 Festlegung des Koordinatensystems 8
2.2.2 TM- und TE- polarisiertes Licht 9
2.2.3 Konstanz der x-Komponente des Wellenvektors k 9

2.3 Transfermatrixmethode 10

2.4 Wellenleitung 12
2.4.1 Geführte Moden in unsymmetrischen planaren Wellenleitern 12

2.5 Oberflächenplasmon 15
2.5.1 Anregung eines Oberflächenplasmons 17
2.5.2 Oberflächenplasmonen in symmetrischen Schichtsystemen 18
2.5.3 Oberflächenplasmonen in unsymmetrischen Schichtsystemen 19
2.5.5 Geltungsbereich der Plasmonen Bezeichnungen 20

2.6 Hybridmoden 21
2.6.1 Eindringtiefe des evaneszenten Feldes 21
2.6.3 Empfindlichkeit der Moden 22

3. Simulation und Design des Sensors 23

3.1 Sensorkonzept 23
3.1.1 Liste der simulierten Schichtsysteme 24

3.2 Unsymmetrische Schichtsysteme 25
3.2.1 System 1 PMMA-PS-Sensor 25
3.2.2 Änderung des Deckmediums Brechungsindex 29
3.2.3 System 2 Quarz-PS-Sensor 30

3.3 Vergleich verschiedener Schichtsysteme 32
3.3.1 Empfindlichkeit des nichtgekoppelten Oberflächenplasmon (TM0) 32
3.3.2 Empfindlichkeit der 1. Hybridmode (TM 1) 34
3.3.3 Empfindlichkeit der 2. Hybridmode (TM2) 35

3.4 Symmetrische Schichtsysteme 35
3.4.1 System 7 Moldflon-PS-Sensor 36

3.5 Zusammenfassung der Simulationen 39

4. Technologien 40

4.1 Profil-Messgerät 40

4.2 Reinigung der PMMA-Substrate 41

4.3 Spincoaten von Polystyrol PS 41

4.4 Heißprägen von Gitterstrukturen ... 43
4.4.1 Silanisieren der Masterstruktur ... 44
4.4.2 Prägen der Gitter auf Polymersubstrate ... 45
4.4.3 Prägen der Gitter auf Polymersubstrate mit PS-Wellenleiter ... 45
4.4.4 Prägen der Gitter auf Glassubstrate mit PS-Wellenleiter ... 46

4.5 Aufdampfen der Goldschicht ... 47

4.6 Optischer Messplatz ... 48
4.6.1 Messung des Winkelspektrums der Reflexion ... 49
4.6.2 Endfire - Messung ... 50

5. Messungen ... 51

5.1 Bestimmung verschiedener Materialkonstanten ... 51
5.1.1 Bestimmung der Gitterparameter ... 51
5.1.2 Bestimmung des Substrat-Brechungsindex ... 53
5.1.3 Bestimmung des Wellenleiter-Brechungsindex ... 54

5.2 Asymmetrisches Schichtsystem ... 56
5.2.1 Deckmedium Luft ... 56
5.2.2 Verhalten bei verschieden Deckmedien ... 58

5.3 Symmetrisches Schichtsystem ... 62

6. Zusammenfassung ... 67

7 Anhang ... 70

7.1 Literaturverzeichnis ... 70

7.2 Abbildungsverzeichnis ... 73

7.3 Tabellenverzeichnis ... 74

7.4 Danksagungen ... 75

7.5 Lebenslauf ... 76

Abstract:

Development and characterisation of a grating coupled hybrid plasmon sensor device

A new sensor device which combines a surface plasmon resonator with planar waveguide structure is introduced. In this structure a waveguide coupelt surface plasmon mode, called hybrid mode, can exist. The modes are excited through the substrate by a diffraction grating coupler. Hybrid modes are detected by measuring the intensity spectra of the reflection by the incoming laser light under various angles.

A variation of different combinations of materials for the sensor is analyzed by simulating the layer system with a numerical mode solver program. The sensor was fabricated with a thermoplastic polymer layer system. The coupler grating is integrated into the waveguide layer by a hot embossing process. A measurement setup was used to study the Hybrid modes on air - metal and air - liquid interfaces. The results of the measurements have been compared to the simulation. It could be demonstrated that the simulation and measurement agree. This concept might be a possibility for the fabrication of sensitive and cost - efficient biosensor chips.

1. Einleitung

In einigen Gebieten Nanotechnologie, Biologie und Chemie sind Messmethoden, die die kleinsten Veränderungen detektieren, sehr wichtig geworden. In den letzten Jahren wurden spezielle Verfahren entwickelt, die mittels Laserlicht arbeiten. So konnten Wechselwirkungsvorgängen in Zellen sowie die Entschlüsselung des menschlichen Genoms [1] durchgeführt werden. Es gibt heute eine Vielzahl von Methoden, um kleinste Veränderungen an Schichten mit Hilfe von Laserlicht zu detektieren [33,35].
Eine dieser Methoden ist die Oberflächenplasmonresonanz-Spektroskopie SPR [2]. Bei der SPR wird an einer dünnen metallischen Schicht ein Oberflächenplasmon angeregt. Oberflächenplasmonen OP sind, vereinfacht dargestellt, Schwingungen des Elektronengases an der Grenzfläche zwischen Metall und Dielektrikum. Durch das OP bilden sich ein evaneszentes Feld aus, das in das angrenzende Dielektrikum hinein reicht. Durch das evaneszente Feld ist die Oberflächenplasmonenmode für kleinste Änderungen ihrer Umgebung sensitiv [3]. Änderungen können beispielsweise das Aufwachsen einer Schicht oder das Quellen einer Schicht sein [32]. Durch Veränderungen im Schichtsystem ändert sich der Anregungswinkel der Mode.

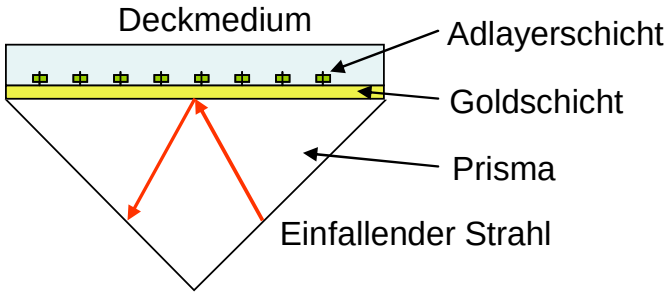

Abb. 1: Kretschmann-Konfiguration zur Oberflächenplasmonen-Anregung.

Die Oberflächenplasmonenmoden werden für Untersuchungen in der Biotechnologie häufig in Kretschmann-Konfiguration angeregt. Hierbei wird die Metallschicht auf ein Prisma aufgebracht [4] und das Reflexionsspektrum aufgenommen (Abb. 1). Ein großer Vorteil dieser Konfiguration ist, dass man als Deckmedium beliebige Medien verwenden kann. Ein Nachteil ist der große Aufwand, um das Prisma zu justieren. Deshalb wurde unter anderem in der Arbeit von Ursula Schröter [5] versucht, das Oberflächenplasmon mittels Gitter in ähnlicher Konfiguration anzuregen. Es stellte sich jedoch heraus, dass dies mit sinusförmigen Gittern nicht ohne weiteres möglich ist. Mit dickenmodulierten Gittern sollte dies zwar möglich sein, jedoch ist die Herstellung dieser Gitter zu aufwendig, um eine Alternative für die Prismenkopplung zu sein.
Schon 1990 wurde von Wolfgang Lukosz ein Konzept für einen integrierten Plasmonen-Sensor mit Wellenleiter-Kopplung vorgestellt [6]. Danach wurden weitere Konzepte für integrierte Plasmonen-Sensoren (Abb. 2) vorgestellt und verwirklicht [7,8]. Die meisten dieser Konzepte bestimmen die Plasmonen-Resonanz, in dem sie die Wellenlänge des einfallenden Lichtstrahls verändern. Der Nachteil dabei ist, dass man für die Auswertung das Verhalten aller beteiligter Materialien im kompletten Wellenlängenbereich kennen muss.

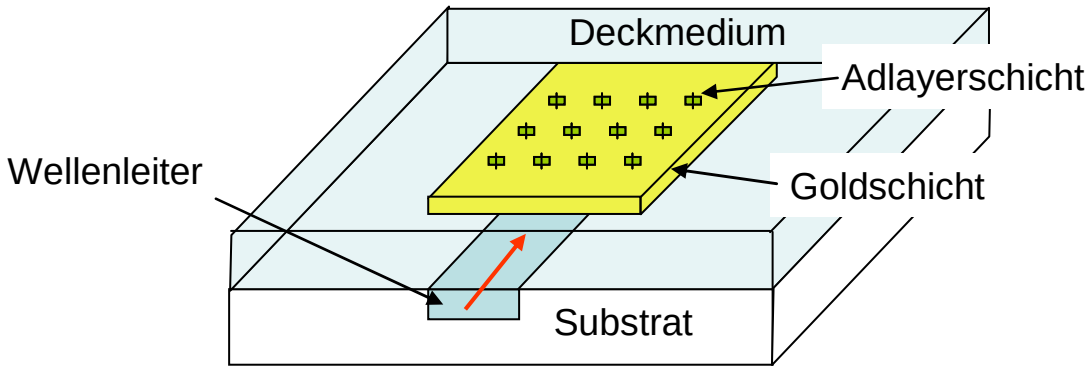

Abb. 2: Schema eines integrierten Plasmonen Sensors mit Wellenleiterkopplung[7].

Im Rahmen der Diplomarbeit von Peter Stöcker [9] wurde ein weiteres Konzept zur Wellenleiter-Oberflächenplasmonen-Kopplung mittels Gitteranregung vorgestellt. Diese Hybridmoden sollten zur Anregung von mehreren Plasmonen zur gleichzeitigen Bestimmung von Dicke und Brechungsindex einer angelagerten Schicht in einer Messung erfolgen.
In dieser Arbeit wurde das Sensorkonzept mit Hybridmoden aufgegriffen, um es als gittergekoppelter Sensor für die Oberflächenplasmonresonanz-Spektroskopie in Reflexionsmessung weiterzuentwickeln. Zur Simulation des Sensors wurde das Schichtsystem mittels eines Transfermatrix-Programm mit Modesolver für planare Schichtsysteme untersucht.
Das Schichtsystem des Sensors besteht aus einem Substrat, einer Wellenleiterschicht, einer Metallschicht und einem Koppelgitter (Abb. 3). Die Anregung der Moden soll durch das Substrat erfolgen, damit der einfallende Lichtstrahl nicht von den Eigenschaften des Deckmediums beeinflusst wird. Als Deckmedium werden für viele Anwendungen Wasser und Lösungen auf Wasserbasis verwendet. Daher wurde für die Simulationen immer Wasser als Deckmedium eingesetzt.

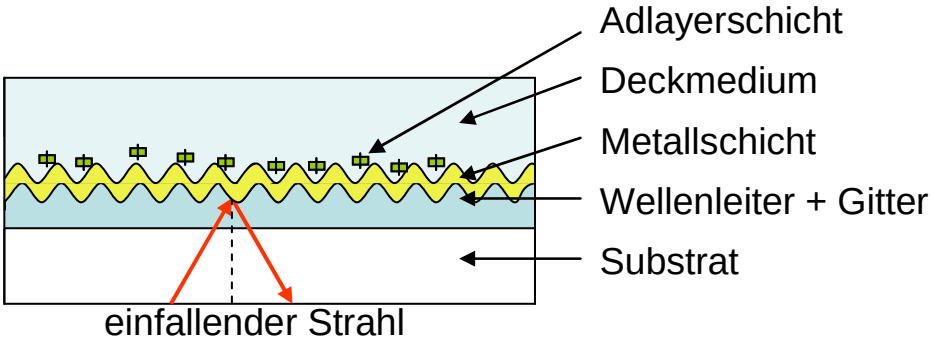

Abb. 3: Schema des Sensorschichtsystems mit Adlayerschicht.

Ziel der Arbeit war es, eine realisierbare Sensorkonfiguration zu ermitteln und dann im Experiment zu erproben. So wurden erst verschiedene Schichtsysteme simuliert und auf ihre Eigenschaften untersucht. Danach wurden einfache Sensoren aus einem Materialverbund von Polymethylmethacrylat (PMMA), Polystyrol (PS) und Gold hergestellt und die Funktionalität des Sensorkonzeptes nachgewiesen. Dabei wurden ermittelte experimentelle Daten mit den Simulationen verglichen.
Das verwendete Sensorschichtsystem für die Experimente bestand aus PMMA Substrat, PS - Wellenleiter, 50 nm Goldschicht. Es wurden Luft, Wasser und Ethanol als Deckmedium für die Experimente verwendet. Die Gitter wurden mittels Heißprägeverfahren in die Wellenleiterschicht eingebracht.
Im Simulationsteil wurden verschiedene Schichtsysteme auf ihre Sensitivität bezüglich einer angelagerten Adlayerschicht untersucht. Es wurden 3 Schichtsysteme näher beschrieben, um den Einfluss der einzelnen Schichtparameter zu erklären.

2. Grundlagen

In diesem Kapitel sollen die theoretischen Grundlagen und Grundbegriffe erläutert werden, die für das Verständnis späterer Kapitel notwendig sind. Auf eine vollständige theoretische Beschreibung wird hierbei verzichtet und sich nur auf für das Verständnis wesentliche Punkte beschränkt, denn ausführlichere Beschreibungen findet man in folgender Literatur [10 - 12].Weiter sollen hier einige für diese Arbeit geltende Definitionen gemacht werden, um die Simulationen und die Experimente besser beschreiben zu können.

2.1 Monochromatische elektromagnetische Wellen

Wir verwenden ein Modell, bei dem Licht wird als eine monochromatische elektromagnetische Welle, die eine harmonische Zeitabhängigkeit des elektrischen Feldes $\vec{E}$ und magnetischen Feldes $\vec{H}$ hat, betrachtet.

$$\vec{E}(\vec{r},t) = \vec{E}(\vec{r})\, e^{j\omega t} \qquad (2.1\ a)$$

$$\vec{H}(\vec{r},t) = \vec{H}(\vec{r})\, e^{j\omega t} \qquad (2.1\ b)$$

Hierbei ist $\vec{r}$ der Vektor der x,y,z-Koordinate im Raum, t die Zeit und $\omega = 2\pi f = \frac{2\pi}{\lambda_0}$ die Kreisfrequenz (f :Frequenz; λ_0 :Wellenlänge von Licht im Vakuum; c: Lichtgeschwindigkeit). Die Wechselwirkung und Ausbreitung von elektromagnetischen Wellen in wird durch die Maxwell-Gleichungen beschrieben. (2.2)

$$\vec{\nabla}\vec{D}(\vec{r},t) = \rho(\vec{r},t) \qquad (2.2\ a)$$

$$\vec{\nabla}\times\vec{E}(\vec{r},t) = -\frac{\partial}{\partial t}\vec{B}(\vec{r},t) \qquad (2.2\ b)$$

$$\vec{\nabla}\vec{B}(\vec{r},t) = 0 \qquad (2.2\ c)$$

$$\vec{\nabla}\times\vec{H}(\vec{r},t) = \frac{\partial}{\partial t}\vec{D}(\vec{r},t) + \vec{i}(\vec{r},t) \qquad (2.2\ d)$$

Weiterhin sind in homogenen Medien die Materialgleichungen 2.3 a-c gegeben.

$$\vec{B}(\vec{r},t) = \mu\vec{H}(\vec{r},t) \qquad (2.3\ a)$$

$$\vec{D}(\vec{r},t) = \varepsilon\,\vec{E}(\vec{r},t) \qquad (2.3\ b)$$

$$\vec{i}(\vec{r},t) = \sigma\vec{E}(\vec{r},t) \qquad (2.3\ c)$$

$\varepsilon = \varepsilon_0\varepsilon_r(\omega)$: Dielektrizität; $\mu = \mu_0\mu_r$: Permiabilität; $\vec{D}$: dielektrische Verschiebung;
$\vec{B}$: magnetische Induktion; t : Zeit; $\sigma = \sigma(\omega)$: elektrische Leitfähigkeit;
$\vec{i}$: elektrische Stromdichte.

Die Helmholtz-Gleichung lassen sich aus den Maxwell-Gleichungen für das elektrische und das magnetische Feld einer elektromagnetischen Welle herleiten. Für das elektrische Feld in einem homogenen Medium ist sie hier dargestellt (2.3).

$$\Delta\vec{E}(\vec{r},\omega)+\vec{k}^{\,2}\,\vec{E}(\vec{r},\omega)=0 \qquad (2.4)$$

In einem homogenen Medium hat die Helmholtz-Gleichung (2.4) zwei Lösungen (2.5a-b). Diese Lösungen gelten in jedem Gebiet i, das heißt jedes Gebiet kann eine vorwärts (+) und eine rückwärts (-) laufende Welle haben. Das E-Feld zeigt in beiden Fällen senkrecht zur Ausbreitungsrichtung.

$$\vec{E}_i^{+}(\vec{r},\omega)=\hat{E}_i\;e^{j\vec{k}_i\,\vec{r}} \qquad (2.5\text{ a})$$

$$\vec{E}_i^{-}(\vec{r},\omega)=\hat{E}_i\;e^{-j\vec{k}_i\,\vec{r}} \qquad (2.5\text{ b})$$

Der Vektor k ist eine komplexe Funktion und kann nach Gl. 2.6 beschrieben werden.

$$|\,\vec{k}\,|=\frac{\omega}{c_0}\sqrt{\mu_r\varepsilon_r(\omega)+j\,\frac{\mu_r\sigma(\omega)}{\omega\varepsilon_0}}=\frac{\omega}{c_0}\tilde{n}(\omega) \qquad (2.6)$$

Zur Vereinfachten Darstellung wird der Wurzelausdruck in Gl. 2.6 zu $\tilde{n}(\omega)$ zusammengefasst. $\tilde{n}(\omega)$ wird als allgemeiner Brechungsindex bezeichnet und fasst alle Materialeigenschaften zusammen. In homogenen nichtleitenden nichtmagnetischen Medien gilt $\mu_r=1$ und $\sigma(\omega)=0$ und $\tilde{n}(\omega)$ wird als Brechungsindex $n(\omega)$ geschrieben.

$$n(\omega)=\sqrt{\varepsilon_r(\omega)} \qquad (2.7\text{ a})$$

Bei nicht magnetischen Metallen ist $\mu_r=1$ aber $\sigma(\omega)\neq 0$ so wird n als (2.7b) geschrieben.

$$n(\omega)=\sqrt{\varepsilon_r(\omega)+j\,\frac{\sigma(\omega)}{\omega\varepsilon_0}} \qquad (2.7\text{ b})$$

Im allgemeinen ist ε_r eine komplexe Funktion. Der Realteil von ε_r ist bei bestimmten Materialien (z.B. Gold, Silber) und Wellenlängenbereichen negativ. Dies ist eine Voraussetzung damit Oberflächenplasmonen angeregt werden können.

2.2 Reflexion und Brechung an planaren Grenzflächen

2.2.1 Festlegung des Koordinatensystems

Für die Berechnungen und Feldbeschreibungen in dieser Arbeit wird ein Kartesisches Koordinatensystem mit x,y,z-Achsen verwendet. Es werden die z-Richtung als Ausbreitungsrichtung und das Feld in y-Richtung als Translationsinvariant angenommen.
Das Koordinatensystem mit den Feldkomponenten von TE-polarisiertem Licht sind an einer Grenzschicht aus zwei Medien in Abb. 4 dargestellt. Die Grenzfläche liegt bei z=0.

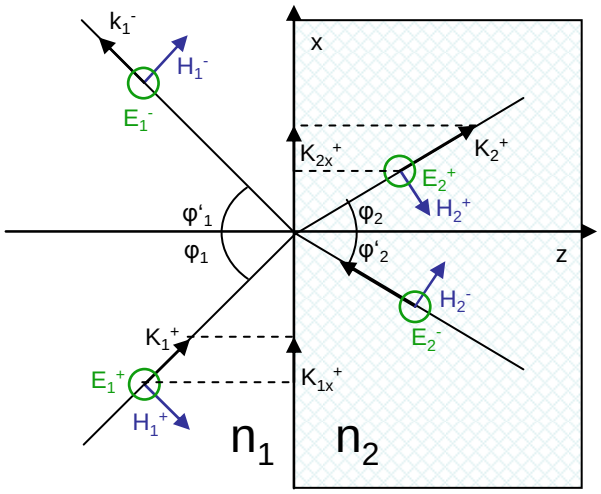

Abb. 4: TE-polarisiertes Licht an einer Grenzfläche (+) vorwärts, (-) rückwärts laufend.

Für die Betrachtung wird angenommen, dass sich die Materialien rechts und links der Grenzfläche in x- und y-Richtung unendlich ausdehnen. Die Materialien unterscheiden sich in ihren Brechungsindizes n_1 und n_2.

2.2.2 TM- und TE- polarisiertes Licht

Für ein isotropes Schichtsystem dessen optische Eigenschaften sich nur in eine Richtung ändern, zerfallen die Maxwellgleichungen in zwei entkoppelte Gleichungspaare aus je drei gekoppelten Gleichungen (2.7-8). Die aus diesen Gleichungen folgenden Wellen werden als TM (transversal magnetisch) und TE (transversal elektrisch) polarisierte Wellen bezeichnet TE- und TM-Wellen breiten sich unabhängig voneinander aus. Sie werden separat berechnet und gegebenenfalls am Ende wieder zusammengefügt.

$$\boxed{\begin{aligned} H_x &= \frac{i}{\mu_0\omega}\frac{\partial E_y}{\partial z} \\ E_y &= \frac{i}{\varepsilon_0\varepsilon_r\omega}\left[\frac{\partial H_x}{\partial z} - \frac{\partial H_z}{\partial x}\right] \\ H_z &= \frac{i}{\mu_0\omega}\frac{\partial E_y}{\partial x} \end{aligned}} \quad (2.8)$$

TE-Gleichungssystem

$$\boxed{\begin{aligned} E_x &= \frac{i}{\varepsilon_0\varepsilon_r\omega}\frac{\partial H_y}{\partial z} \\ H_y &= \frac{i}{\mu_0\omega}\left[\frac{\partial E_x}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial x}\right] \\ E_z &= \frac{i}{\varepsilon_0\varepsilon_r\omega}\frac{\partial H_y}{\partial x} \end{aligned}} \quad (2.9)$$

TM-Gleichungssystem

Die weitere theoretische Beschreibung der Grundlagen erfolgt für TE-polarisiertes Licht.

2.2.3 Konstanz der x-Komponente des Wellenvektors k

Nach den Maxwell-Gleichungen müssen die Feldkomponenten des E- und H-Feldes über die Grenzfläche hinweg kontinuierlich sein. Daraus ergibt für TE-Polarisation sich die Randbedingung (2.10 a) an der Grenzfläche z=0.

$$\vec{E}_1^+ + \vec{E}_1^- = \vec{E}_2^+ + \vec{E}_2^- \qquad (2.10\ )$$

Es gilt für alle Zeiten t und alle Positionen z entlang der Grenzfläche Gleichung 2.11, wenn ω für alle Schichten gleich ist.

$$k_{1x}^{+} = -k_{1x}^{-} = k_{2x}^{+} = -k_{2x}^{-} = k_x \qquad (2.11)$$

Für k in Medien gilt Gl. 2.5. k ist allgemein eine komplexe Funktion. Weicht die Ausbreitungsrichtung des Lichtes von der Ausbreitungsrichtung des Systems z ab, so breitet es sich unter dem Winkel φ_i in dem Medium aus. Für k_x gilt so in Medien mit Brechungsindex n_i Gl. 2.13.

$$k_x = \frac{\omega}{c_0} n_i \sin(\varphi_i) \qquad (2.12)$$

Aus der Konstanz des von k_x (2.11) und der Beziehung mit dem Winkel (2.12) folgt das Snelliussche Brechungsgesetz (2.13).

$$n_1 \sin\varphi_1 = n_2 \sin\varphi_2 \qquad (2.13\text{ a})$$

$$\varphi_2 = \arcsin\left(\frac{n_2}{n_1}\sin\varphi_1\right) \qquad (2.13\text{ b})$$

Gleichung 2.13b ist das Brechungsgesetz (2.13a) nach φ_2 umgestellt. Ist $n_2 > n_1$, so wird der Ausdruck im Arcsin ab einem bestimmten Winkel größer als 1. In diesem Winkelbereich findet keine Transmission mehr statt. Das ganze Licht wird reflektiert. Man spricht hierbei von Totalreflexion.

2.3 Transfermatrixmethode

Systeme aus mehreren Schichten finden in der Optik vielseitige Anwendung. Mit der Transfermatrix-Methode können geführte Moden z. B Wellenleiter- oder Plasmonenmoden sowie Reflexions- und Transmissionseigenschaften beliebiger Schichtsysteme berechnet werden.
Das Schema eines beliebigen Schichtsystems ist in Abb. 5 dargestellt. Jede Schicht i ist homogen und unterstützt eine vorwärts (+) und rückwärtslaufende (-) Welle.

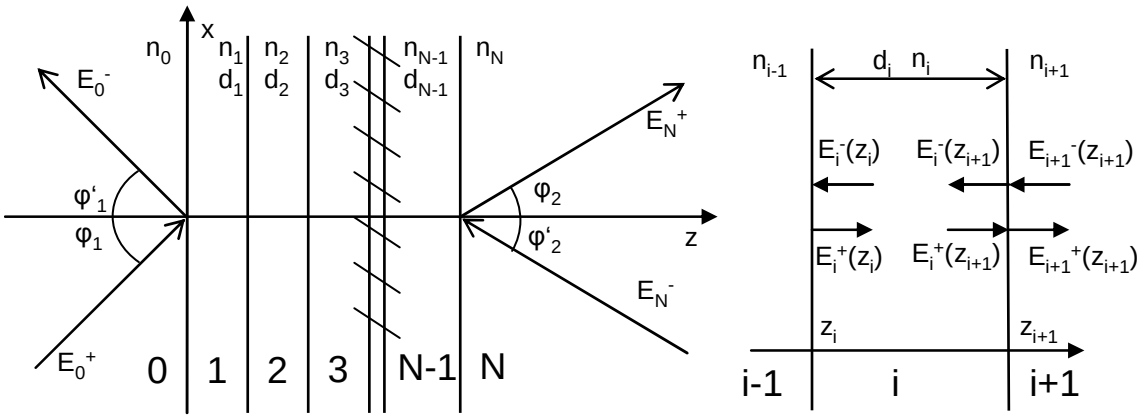

Abb. 5: Schema eines Schichtsystem für die Transfermatrix, Gesamtsystem (links), Einzelschicht (rechts).

Der Vektor $\begin{pmatrix} E_i^{+}(z_i) \\ E_i^{-}(z_i) \end{pmatrix}$ beschreibt das E-Feld an der Position z_i an der Grenzfläche zwischen i-1 und i (Abb. 5 rechts). Der Ausbreitungsvektor k_i hängt vom Brechungsindex n_i und die Ausbreitungsrichtung vom Einfallswinkel bzw. n_{eff} ab. Der E-Feldvektor am linken Rand der

Schicht i ist mit dem E-Feldvektor am rechten Rand derselben Schicht durch die Ausbreitungsmatrix P_i verbunden.

$$\begin{pmatrix} E_i^+(z_i) \\ E_i^-(z_i) \end{pmatrix} = P_i \begin{pmatrix} E_i^+(z_{i+1}) \\ E_i^-(z_{i+1}) \end{pmatrix} \tag{2.14}$$

Die Ausbreitungsmatrix P_i (2.15) leitet sich aus der Gleichung für die ebene Welle und den Bedingungen für die Schicht i ab.

$$P_i(k_x, \omega) = \begin{pmatrix} e^{j\sqrt{(\frac{\omega}{c}n_i)^2 - k_x^2}\, d_i} & 0 \\ 0 & e^{-j\sqrt{(\frac{\omega}{c}n_i)^2 - k_x^2}\, d_i} \end{pmatrix} \tag{2.15}$$

Der E-Feldvektor am linken Rand der Schicht i ist mit dem Feldvektor am rechten Rand der Schicht i+1 durch die Dynamischen-Übergangsmatrix $D_{i,i+1}$ verknüpft.

$$\begin{pmatrix} E_i^+(z_{i+1}) \\ E_i^-(z_{i+1}) \end{pmatrix} = D_{i,i+1} \begin{pmatrix} E_{i+1}^+(z_{i+1}) \\ E_{i+1}^-(z_{i+1}) \end{pmatrix} \tag{2.16}$$

In der Dynamischen-Matrix $D_{i,i+1}$ sind die Übergangsbedingungen über die Grenzschicht enthalten. Sie leiten sich aus den Verhältnissen der Komponenten an der Grenzfläche ab. $D_{i,i+1}$ ist abhängig von der Polarisation des einfallenden Licht. Für TE-polarisiertes Licht ist die Dynamischen-Matrix in Abhängig von k_z in Gleichung 2.17 dargestellt.

$$D_{i,i+1}(k_z) = \frac{1}{2k_{z,i}} \begin{pmatrix} k_{z,i+1} + k_{z,i} & k_{z,i+1} - k_{z,i} \\ k_{z,i+1} - k_{z,i} & k_{z,i+1} + k_{z,i} \end{pmatrix} \tag{2.17}$$

$$k_{z,i} = \sqrt{\left(\frac{\omega}{c_0} n_i\right)^2 - k_x^2} \tag{2.18}$$

$k_{z,i}$ errechnet sich nach Gl. 2.18. Die Dynamischen-Matrix $D_{i,i+1}$ ist so von ω und k_x abhängig. Eine andere Darstellung von $D_{i,i+1}$ mit Reflexions- und Transmissionskoeffizienten ist in der Literatur [10,13] zu finden.

Durch Multiplikation von der Dynamischen- D und der Ausbreitungsmatrix P für die jeweiligen Einzelschichten erhält man Gl. 2.19.

$$\begin{pmatrix} E_0^+ \\ E_0^- \end{pmatrix} = D_{0,1} P_1 D_{1,2} P_2 D_{2,3} \ldots P_{N-1} D_{N-1,N} \begin{pmatrix} E_N^+ \\ E_N^- \end{pmatrix} \tag{2.19}$$

Mit dieser Methode können der Reflexionsgrad, die Durchlässigkeit, sowie geführte Moden in beliebigen Schichtsystemen berechnet werden.
Eine weiterführende Beschreibung zur Transfermatrix Methode ist in der Veröffentlichung von John Chilwell [14] enthalten.

2.4 Wellenleitung

Unter bestimmten Bedingungen kann sich Licht auch parallel zu den Grenzflächen des Schichtsystems ausbreiten. Wird das Licht dabei in einer Schicht geführt, so spricht man von Wellenleitung. Die einfachste Form eines Wellenleiters stellt eine planare Schicht dar. Der Brechungsindex der wellenleitenden Schicht muss größer sein als der Brechungsindex der angrenzenden Schicht damit das Licht geführt werden kann [10]. Sind die Brechungsindizes der angrenzenden Medien verschieden, so liegt ein unsymmetrischer planarer Wellenleiter vor.

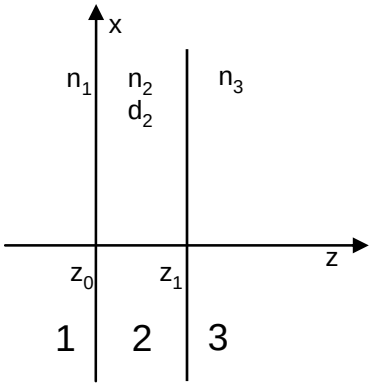

Abb. 6: Schema einfacher planarer Wellenleiter $n_2 > n_1, n_3$.

Abb. 6 zeigt schematisch den Aufbau eines planaren Wellenleiters. Medium 2 ist die wellenleitende Schicht. Abhängig von der Polarisation der einfallenden Welle und der Dicke der Schicht können sich verschiedene geführte Wellenleitermoden ausbreiten.

$$n(z) = \begin{cases} n1, & z < z_0 \\ n2, & z_0 < z < z_1 \\ n3, & z_1 < z < \infty \end{cases} \qquad (2.20)$$

Abb. 7: Brechungsindizes für das Schichtsystem in Abb. 6.

Der Brechungsindex n(z) in Abb. 7 gilt für die drei Medien in dem Schichtsystem in Abb. 6. Es wird angenommen, dass ein unsymmetrisches Schichtsystem mit n1< n3 < n2 vorliegt.

2.4.1 Geführte Moden in unsymmetrischen planaren Wellenleitern

In einem planaren Wellenleiter können sich verschiedene Moden ausbreiten. Es wird dabei zwischen TE- und TM-Moden unterschieden. Die Ausbreitung der Moden wird durch die Dispersionsrelation beschrieben. Die Dispersionsrelation beinhaltet die Polarisation des einfallenden Lichtes. Sie kann aus der Transfermatrixmethode hergeleitet werden. Zur Darstellung der Disperionsrelation werden die Abkürzungen $u_{1\text{-}3}$ verwendet.

$$u_1^2 = -\left(\frac{\omega^2}{c_0^2} n_1^2 - k_x^2\right) \qquad (2.21\ a)$$

$$u_2^2 = \frac{\omega^2}{c_0^2} n_2^2 - k_x^2 \qquad (2.21\ b)$$

$$u_3^2 = -\left(\frac{\omega^2}{c_0^2} n_3^2 - k_x^2\right) \qquad (2.21\ c)$$

Gleichung 2.22 ist die Dispersionsrelation für TE-polarisiertes Licht.

$$\tan(u_2 d) = \frac{u_2(u_1 + u_3)}{u_2^2 - u_1 u_3} \tag{2.22}$$

Ebenso wie für TE-Moden kann die Dispersionsrelation für TM-Moden über den oben beschriebenen Weg hergeleitet werden (2.24). Mit der Notation (2.23) hat die Dispersionsrelation für TM Moden dieselbe Form wie die für TE-Moden.

$$\bar{u}_i = \frac{u_i}{n_i} \tag{2.23}$$

$$\tan(u_2 d) = \frac{u_2(\bar{u}_1 + \bar{u}_3)}{u_2^2 - \bar{u}_1 \bar{u}_3} \tag{2.24}$$

Über die Dispersionsrelation sind k_x und die Dicke der Wellenleiterschicht miteinander verknüpft. Zur Beschreibung ausbreitungsfähiger Moden in der Wellenleiterschicht wird oft der effektive Brechungsindex n_{eff} verwendet. Dieser ist nach Gleichung 2.12:

$$n_{eff} = \frac{k_x * c_0}{\omega} = n_i \sin \varphi_i \tag{2.25}$$

Die Abhängigkeit des effektiven Brechungsindex der Moden n_{eff} von der Wellenleiterdicke d ist für ein planaren Wellenleiter sind in Abb. 8 für λ=632.8nm graphisch dargestellt. Das Schichtsystem besteht aus PMMA Substrat (n_1=1.49), PS-Wellenleiter (n_2=1.6) und Luft (n_3=1) als Deckmedium. Die TE- und TM-Moden für die jeweilige Wellenleiterdicke wurden mit dem Computerprogramm ATSOS[1] erstellt.

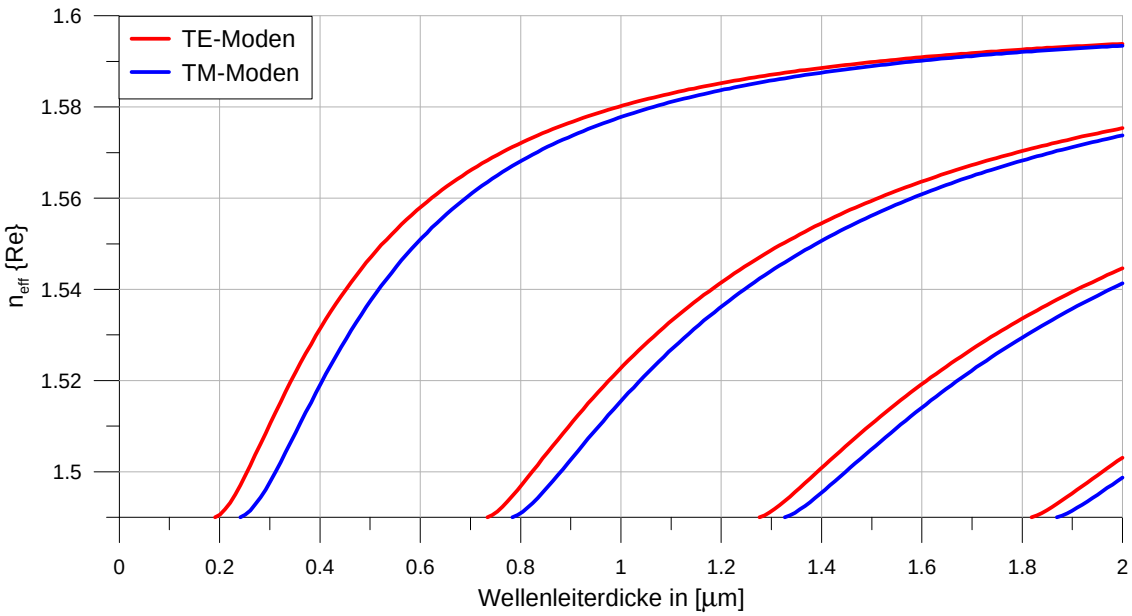

Abb. 8: Modenkarte für eine Wellenleiter Polystyrol n=1.6 auf PMMA Substrat n=1.49.

Um Wellenleitermoden anzuregen muss der k_x -Vektor des einfallenden Lichtes mit dem der Mode übereinstimmen. Der k_x -Vektor entspricht über die Beziehung 2.25 dem n_{eff}. Die Übereinstimmung von n_{eff} bzw. k_x wird erreicht, wenn das Licht genau unter dem Winkel φ einfällt,

[1] ATSOS **A**nalysis **T**ool for **S**tratified **O**ptical **S**tructures. Programm zur Berechnung planarer Mehrschichtsysteme. www.doos.de

der dem k_x der Mode entspricht. Die Beziehung für Winkel φ (2.26) bei direkter Einstrahlung erhält man durch Umstellen der Gleichung 2.25. Dabei ist φ der Einfallswinkel, n_i Brechungsindex des Einfallsmediums und n_{eff} der effektive Brechungsindex.

$$\varphi = \arcsin\left(\frac{n_{eff}}{n_i}\right) \tag{2.26}$$

Meist können die Moden auf Grund des Totalreflexionswinkels (2.13b) nicht direkt angeregt werden. Es wird daher ein Prisma oder ein Gitter verwendet, um den benötigten Einfallswinkel zu verkleinern. Für die Kopplung mit symmetrischen sinusförmigen Gittern gilt zur Berechung von n_{eff} die Gleichung 2.28. Auf eine Herleitung und ausführliche Beschreibung der Gitter und Prismenanregung wird an dieser Stelle verzichtet. Sie ist in der Literatur [11] beschrieben.

$$\varphi = \arcsin\left(\frac{n_{eff} - \frac{\lambda}{G}}{n_i}\right) \tag{2.27}$$

λ: Wellenlänge des einfallenden Lichts, G: Gitterkonstante (Periodenabstand).
Der für die Berechnung des Winkels φ benötigte effektive Brechungsindex der Mode kann aus einer Modenkarte, wie sie in Abb. 8 dargestellt ist, herausgelesen werden.

Der effektive Brechungsindex ist zur Berechung der Anregung notwendig. Durch ihn werden die Moden nicht eindeutig beschrieben, denn bei verschieden Schichtkonfigurationen können Moden mir dem demselben Wert für n_{eff} exisiteren, sich jedoch in ihren Feldverteilungen unterscheiden. Nur durch die Feldverteilungen werden die Moden eindeutig beschrieben. Jede Mode hat, ausgehend von den entkoppelten Gleichungssystemen für TE und TM (2.7-8), drei Feldkomponenten, H_x, H_z und E_y bei TE-Polarisation und H_y, E_x und E_z bei TM-Polarisation. Da die Feldkomponenten von einander abhängen, reicht eine Feldkomponente für die Betrachtung aus. In dieser Arbeit wird die Transversalfeldkomponente, E_y bei TE- und H_y bei TM-Moden, verwendet.

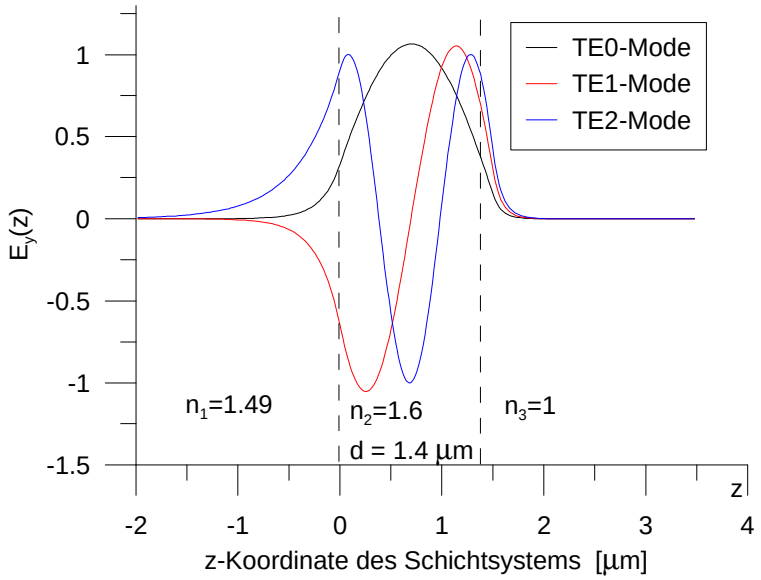

Abb. 9: Feldverteilung von TE-Moden in PMMA/PS-Wellenleiter, erstellt mit ATSOS.

In der Abb. 9 sind die transversalen E- Felder E_y für die drei TE-Moden, die in dem Schichtsystem PMMA | PS 1400nm | Luft existieren können, dargestellt. Die TE0-Mode ist die erste

Mode, die im System anschwingen kann und sie hat den höchsten n_{eff}. Die Modenordnung, hier auch Modennummer, leitet sich aus der Zahl der Nulldurchgänge in der transversalen Feldverteilung ab. So besitzt die TM0 keinen Nulldurchgang, TM1 einen und TM2 zwei Nulldurchgänge. Weiter kann man in der Abbildung erkennen, dass das Feld an Grenzen der Wellenleiterschicht nach außen exponentiell abfällt. Dieser Abfall wird als evaneszentes Feld bezeichnet. Das evaneszente Feld wird bei der Wellenleiter-Moden-Spektroskopie zur Detektion von Veränderungen an der Grenzschicht eingesetzt.

2.5 Oberflächenplasmon

Oberflächenplasmonen sind kollektive longitudinale Schwingungen des Leitungselektronengases gegenüber den Ionen-Rümpfen an einer Metall-Dielektrium-Grenzfläche. Die Schwingung erfolgt parallel zur Grenzfläche. Durch die Schwingung der Elektronen bilden sich evaneszente Felder in den angrenzenden Medien aus.

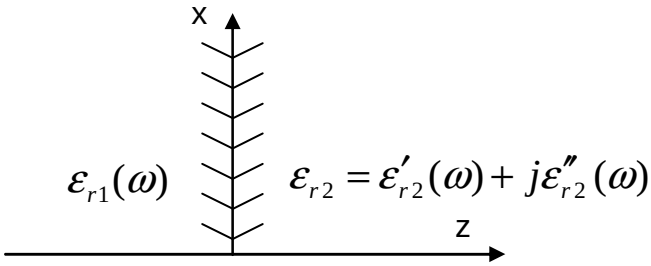

Abb. 10: Schematische Darstellung eines Oberflächenplasmon an einer Grenzfläche Dielektrium (links) und Metall (rechts).

Damit Plasmonen an einer Grenzfläche existieren können muss ε'_{r2} negativ sein. Dies gilt bei bestimmten Frequenzbereichen ω für Alkalimetalle, aber auch für Silber, Gold, Kupfer, Tantal und Aluminium. Die spektrale Lage der Plasmonen-Resonanz hängt von der dielektrischen Funktion des Metalls und des angrenzenden Mediums ab. Auf Grund der Schwingung parallel zur Grenzfläche können Oberflächenplasmonen nur als TM-Moden existieren. Beim Lösen der Maxwell-Gleichungen für ein Oberflächenplasmon im TE-Fall zeigt sich, dass die gesuchten Koeffizienten Null sind und somit eine TE-Mode nicht existieren kann [19].
Eine Lösung der Maxwell-Gleichungen für Abb. 10 ist in x-Richtung eine TM-polarisierte harmonische Welle mit Frequenz ω und dem Wellenvektor k_x. Damit diese einen physikalischen Sinn macht, müssen auf beiden Seiten der Grenzschicht die Felder evanszent sein. Das bedeutet, dass die Phasengeschwindigkeit des Plasmons kleiner ist als die Phasengeschwindigkeit einer ebenen Welle im Dielektrikum.

$$v_{Ph} = \frac{\omega}{k_x} < \frac{c}{\sqrt{\varepsilon_{r1}}} \tag{2.28}$$

Es lässt sich die implizite (2.29 a) Dispersionsrelation und durch weiteres Umstellen die explizite (2.29 b) Dispersionsrelation $\omega_{SP}(k_x)$ aus den Maxwell-Gleichungen ableiten.

$$\frac{\varepsilon_{r2}(\omega)}{\sqrt{k_x^2 - \varepsilon_{r2}\frac{\omega^2}{c_0^2}}} = -\frac{\varepsilon_{r1}(\omega)}{\sqrt{k_x^2 - \varepsilon_{r1}\frac{\omega^2}{c_0^2}}} \tag{2.29 a}$$

$$\omega_{SP} = \frac{k_x c_0}{\sqrt{\frac{\varepsilon_{r2} + \varepsilon_{r1}}{\varepsilon_{r1} * \varepsilon_{r2}}}} \tag{2.29 b}$$

Die ausführliche Herleitung ist in der Literatur zu finden [16,17,19].
Da Oberflächenplasmonen nur evanezente Felder besitzen und somit keine Strahlung abgeben, können sie auch nicht einfach mit einfallendem Licht angeregt werden. Um sie dennoch optisch anzuregen, muss der k_x -Vektor des einfallenden Lichts angepasst werden.

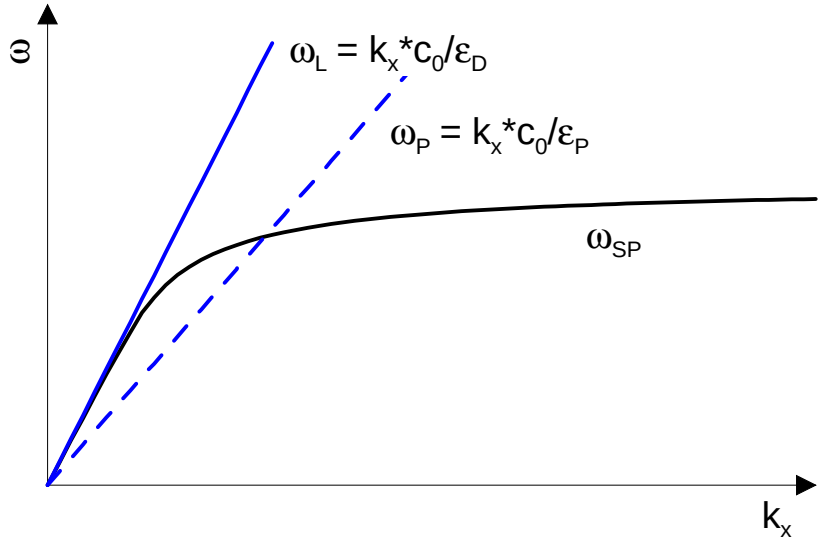

Abb. 11: Dispersionsrelation über k_x für Luft ω_L Prisma ω_P und Oberflächen Plasmon ω_{SP}.

In Abb. 11 ist die Dispersionsrelation für ein Oberflächenplasmon (schwarz) und für Licht (blau) graphisch dargestellt. Dabei ist ε_D die Dielektrische-Funktion für Luft, ε_P für ein Prisma und ω_{SP} ist gegeben durch Gl. 2.29b mit den Dielektrischen-Funktionen der Schichten.
Die Dispersionsrelation (2.29) gilt für ein Oberflächenplasmon an einer Grenzschicht zwischen Metall und Dielektrikum. Es wird dabei angenommen, dass das Metall und das Dielektrikum gegenüber der Grenzschicht unendlich ausgedehnt sind. Dies reicht für das Grundverständnis von Oberflächenplasmonen aus. Für die Sensorik und die weitere Arbeit werden jedoch dünne Metallfilme eingesetzt. Diese dünnen Metallfilme haben zwei Grenzflächen zu den Dielektrikas. Es können sich an den beiden Grenzflächen Oberflächenplasmonen ausbilden. Wenn der Metallfilm dünn genug ist, können die beiden Plasmonen miteinander koppeln. Dies erfolgt, weil sich die evaneszenten Felder überlagern. Durch die Kopplung entstehen eine symmetrische und eine unsymmetrische Mode [19]. Die Mode mit symmetrischer Feldkopplung wird als Long-Range-Plasmon und die Mode mit unsymmetrischer Feldkopplung wird Short-Range-Plasmon genannt.

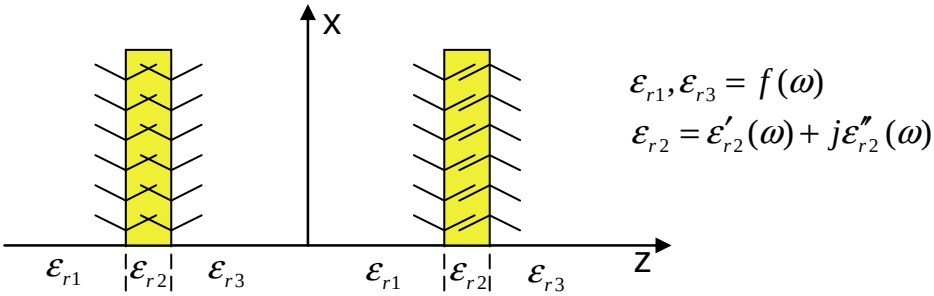

Abb. 12: Schema des Oberflächenplasmons in einer dünnen Metallschicht. Symmetrische (links) und unssymetrische (rechts) Feldkoppung.

Da die Moden sehr stark von den Eigenschaften der sie umgebenden Schicht abhängig sind, wird hier zwischen symmetrischen und unsymmetrischen Schichtsystemen unterschieden. Das Verhalten der Oberflächenplasmonen in den dünnen Filmen wird in 2.5.2 und 2.5.3 beschrieben.

2.5.1 Anregung eines Oberflächenplasmons

Um Oberflächenplasmonen mit Licht anzuregen, muss der k_x -Vektor des einfallenden Lichts angepasst werden. Dies kann mit einem Prisma n_P oder mit einem Gitter erfolgen.
Mit Hilfe des Prismas können Oberflächenplasmonen, die an Strahlung koppeln, angeregt werden. Es gibt zwei verschiedene Konfigurationen, bei der ein Prisma zur Anregung verwendet wird. Die Otto-Konfiguration, bei der sich ein Luftspalt zwischen Prisma und Metallschicht befindet. Das Plasmon wird hier mit dem evaeszenten Feld eines totalreflektierten Lichtstrahls angeregt [17]. Die andere Methode ist die Kretschmann-Konfiguration. Hierbei wird die Metallschicht direkt auf das Prisma aufgebracht und das Plasmon ebenfalls durch Totalreflexion angeregt [4]. Für die Biosensorik wurde die Kretschmann-Konfiguration für die Oberflächenplasmonresonanz-Spektroskopie bis zur Serienreife entwickelt.
Eine andere Methode, um Oberflächenplasmonen anzuregen, ist die Gitterkopplung. Mit ihr können nur geführte Oberflächenplasmonen angeregt werden. Je nach Einsatzzweck unterscheiden sich die Geometrien der Gitter. Zur Anregung von Oberflächenplasmonen kann ein einfaches sinusförmiges Gitter mit geringer Amplitude verwendet werden [18].
Die Anpassung des k_x -Vektors erfolgt, indem auf den $k_{x\,L}$ -Vektor des einfallenden Lichts der Gittervektor G an der Grenzschicht addiert wird.

$$G = \frac{2\pi}{g} \tag{2.30}$$

$$k_{xSP} = k_{xL} \pm m\,G = k_{xL} \pm m\frac{2\pi}{g} \qquad \text{mit m=0,1,2…} \tag{2.31}$$

G: reziproker Gittervektor; g: Gitterkonstante; m: Beugungsordnung des Gitters
Gleichung 2.31 ist die umgeschriebene Gitterkoppelgleichung (2.27).
.

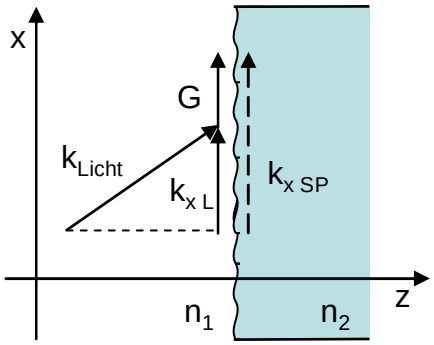

Abb. 13: Anregung eines Oberflächenplasmons mit Gitter.

In Abb. 13 ist die Beziehung (2.33) des k -Vektors zwischen dem einfallenden Licht und dem Gitter zur Anregung des Oberflächenplasmons graphisch dargestellt.
Eine weitere Möglichkeit, um strahlende Oberflächenplasmon anzuregen, ist es, diese an eine geführte Wellenleitermode zu koppeln (siehe auch 2.6 Hybridmode). Hierzu ist das Dielektrikum an einer Seite der Metallschicht als planarer Wellenleiter ausgeführt.

2.5.2 Oberflächenplasmonen in symmetrischen Schichtsystemen

Als symmetrische Schichtsysteme werden in dieser Arbeit Systeme bezeichnet, bei denen das Substrat und das Deckmedium den gleichen oder einen ähnlichen Brechungsindex aufweisen. Die Grenzen dieser Begriffe werden in 2.5.5 erklärt.
Das Schichtsystem für die folgenden Graphen Abb. 14-16, besteht aus einer Goldschicht (n_{Au}=0.1782+i3.45) mit zwei angrenzenden Teflonschichten (n_D=1.31) (siehe Schema in Abb. 12). Die folgenden Simulationen der Moden sowie deren Feldverteilungen wurden mit dem Programm ATSOS bei einer Wellenlänge λ=632.8nm durchgeführt.

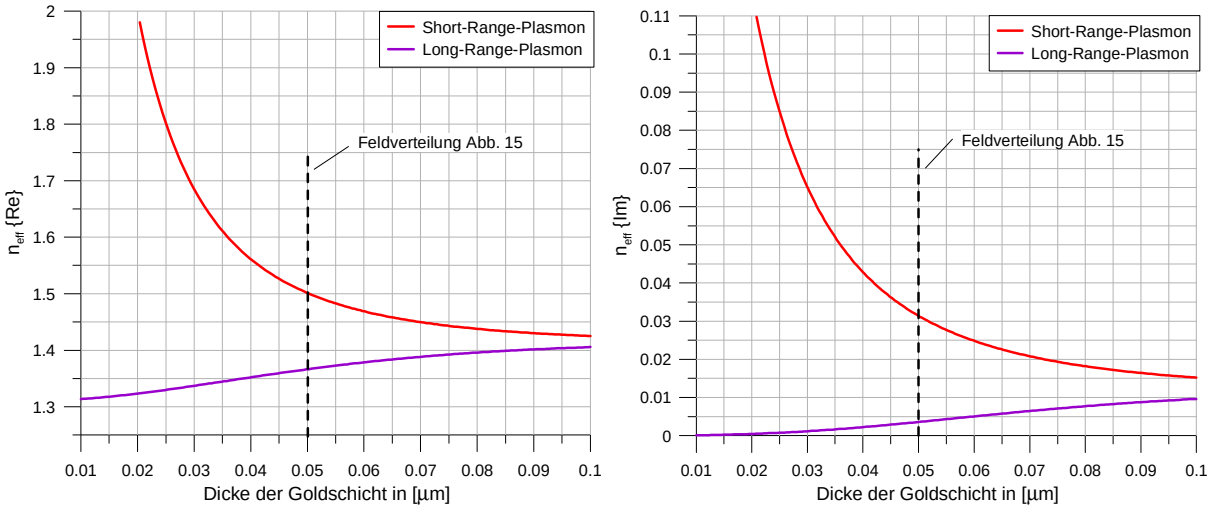

Abb. 14: Oberflächenplasmonen im symmetrischen Schichtsystem (n_S=1.31| Au n_{Au}=0.1782+i3.45| n_D=1.31) bei Variation der Au-Schichtdicke; λ=632.8nm; Realteil (links), Imaginärteil (rechts).

In Abb. 14 wurde das Verhalten der Plasmonenmoden bei variabler Goldschichtdicke dargestellt. Es bildet sich ein Short-Range- und Long-Range-Plasmon aus. Der Real- und der Imaginärteil des effektiven Brechungsindex wird beim Long-Range-Plasmon mit abnehmender Goldschichtdicke kleiner. Beim Short-Range-Plasmon steigen der Real- und der Imaginärteil von n_{eff} an. Der Name Long-Range-Plasmon kommt daher, dass durch den geringeren Imaginärteil die Mode eine größere Ausbreitungslänge hat.

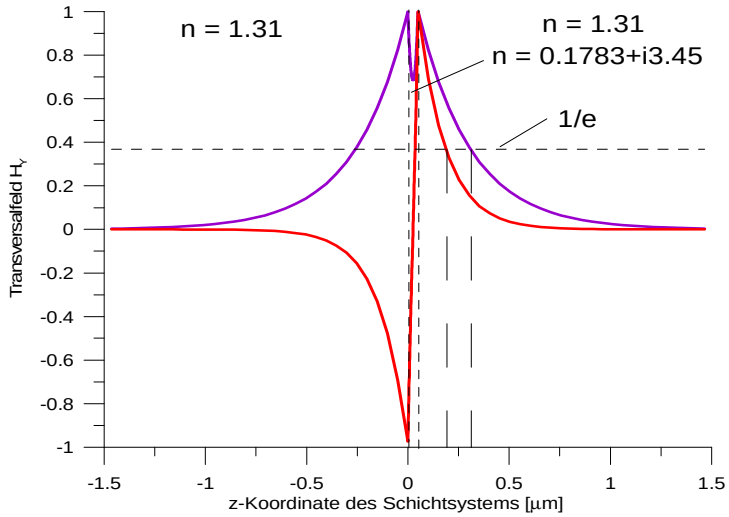

Abb. 15: Feldverteilung der Moden bei dAu=50nm des Schichtsystems aus Abb. 14, Long-Range-Plasmon (violett), Short-Range-Plasmon (rot), normiert auf 1.

Die Felder der Plasmonenmoden, die in Abb. 15 dargestellt sind, sind an der rechten Gold-Dielektrikum-Grenzfläche auf 1 normiert. Somit kann die Eindringtiefe der Plasmonenmoden in das Dielektrikum direkt verglichen werden. Man kann erkennen, dass das evaneszente Feld des Long-Range-Plasmons eine größere Eindringtiefe als das des Short-Range besitzt.

2.5.3 Oberflächenplasmonen in unsymmetrischen Schichtsystemen

In unsymmetrischen Sichtsystemen weicht der Brechungsindex des Substrates vom Brechungsindex des Deckmediums ab. Durch diese Abweichung verändert sich das Verhalten der Plasmonen, deshalb werden hier nicht mehr die Begriffe „Short Range“ und „Long Range“ verwendet. Es existieren weiterhin zwei Oberflächenplasmonenmoden. Das Oberflächenplasmon mit dem kleineren realen effektiven Brechungsindex, besitzt den kleineren Imaginärteil. Da der effektive Brechungsindex der Mode kleiner ist als der Substratbrechungsindex ist es eine Leckmode. Es wird im der weiteren Arbeit als Leck-Oberflächenplasmon oder Leck-Plasmon bezeichnet.

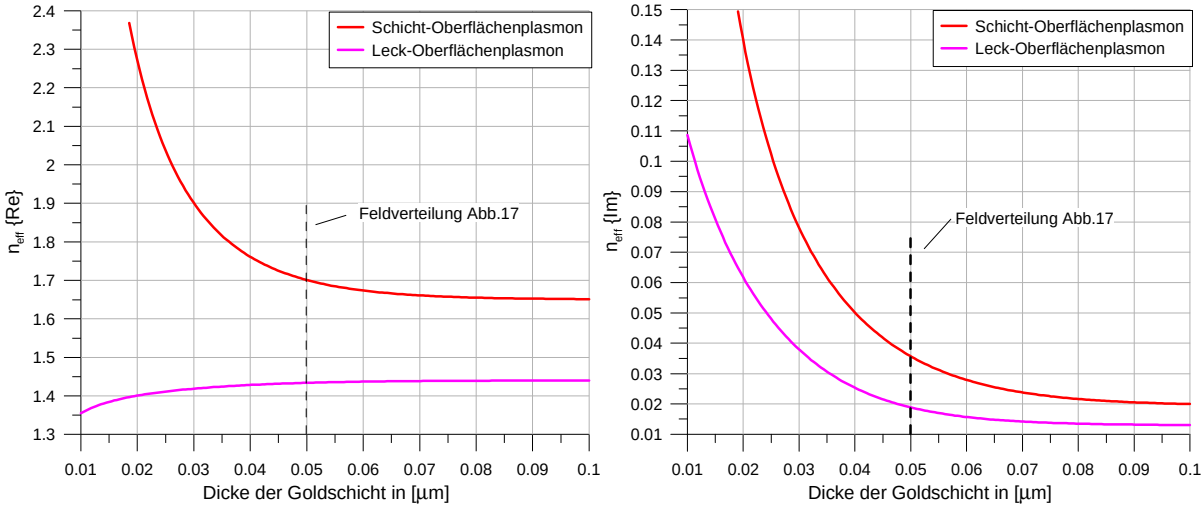

Abb. 16: Oberflächenplasmonen im unsymmetrischen Schichtsystem (n_S=1.49 |nAu=0.1783+i3.45 |n_D=1.33) bei Variation der Au-Schichtdicke. Realteil (links), Imaginärteil (rechts).

Bei der Variation der Goldschichtdicke eines unsymmetrischen Schichtsystems, dargestellt in Abb. 16 kann man erkennen, dass der Imaginärteil der Mode mit kleinerem n_{eff} bei abnehmender Goldschichtdicke ansteigt. Dieser Anstieg ist auf die Strahlungskopplung zurückzuführen.

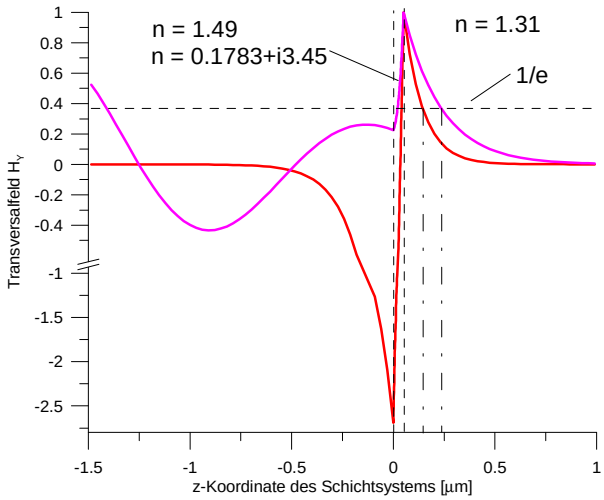

Abb. 17: Transversal Feldverteilung der Oberflächenplasmonen des Schichtsystems in Abb. 16; Leck-Oberflächenplasmon n_{eff} (violett) , Schicht-Oberflächenplasmon n_{eff} (rot).

Das Maximum des evaneszenten Feldes an der linken Gold-Dielektrikum-Grenzfläche wurde, wie bei Abb. 15 auf 1 normiert. Man kann erkennen, dass sich bei der Mode mit dem höheren n_{eff} die Feldmaxima rechts und links der Goldschicht im Vergleich zum symmetrischen Schichtsystem verändert haben. Das Feldmaximum auf der Seite des Substrates ist stärker ausgebildet. In der weiteren Arbeit wird diese Mode Schicht-Oberflächenplasmon oder Schicht-Plasmon genannt. Das Leck-Plasmon koppelt an der Grenzfläche zum höher brechenden Medium an Strahlung. Ungeachtet der Strahlungskopplung besitzt es weiterhin eine höhere Eindringtiefe in das niedrig brechende Dielektrikum als die Mode mit dem höheren n_{eff}. Bei Prismen gekoppelten Oberflächenplasmonresonanz-Spektroskopie wird die Leckmode angeregt und zur Detektion verwendet.

2.5.5 Geltungsbereich der Plasmonen Bezeichnungen

Der Übergang von symmetrischen bzw. symmetrienahen Schichtsystemen zu unsymmetrischen Schichtsystemen geschieht fließend. Aus diesem Grunde wurde in der Simulation für Abb. 18 der Substratbrechungsindex variiert. Das Schichtsystem besteht aus einem Teflon-Substrat (n=1.31), 50nm Goldschicht und Wasser (n=1.33) als Deckmedium.

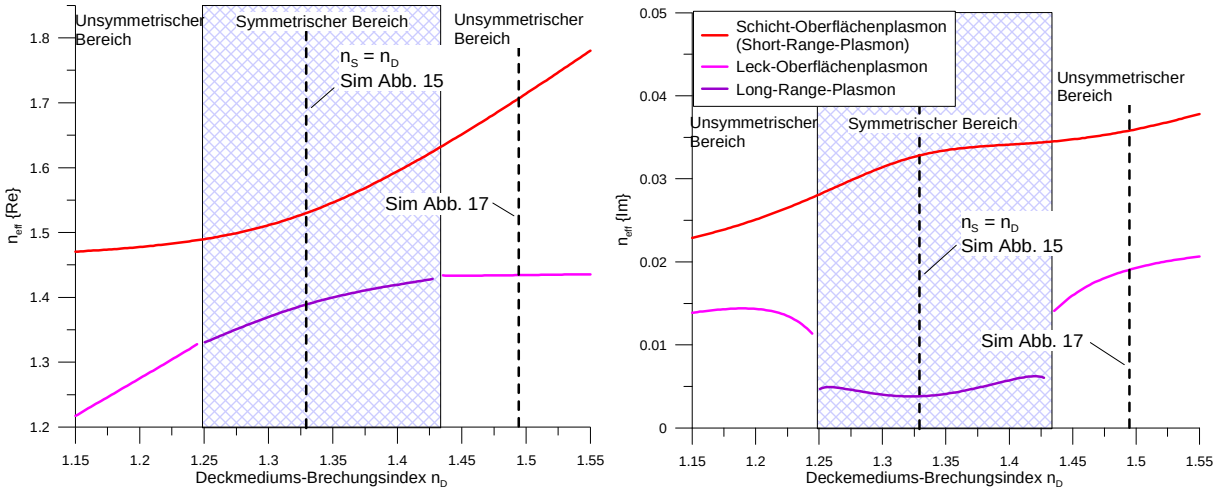

Abb. 18: Variation von n_S in einem Schichtsystem (ns | 50nm n_{Au}=0.1783+i3.45 | n_D=1.33).

Aus der Simulation geht hervor, dass bei einem Substratbrechungsindex kleiner 1.25 und größer 1.43 das Long-Range-Plasmon in eine Leckmode, ein Plasmon mit Strahlungskopplung, übergeht. Die Moden im Bereich des Übergangs der geführten Mode zur Leck-Mode konnte mit der Software nicht berechnet werden. Der Übergangsbereich kann man gut an der Unstetigkeitsstelle in der Darstellung des Imaginärteils, in Abb. 18 erkennen. Beim Short-Range-Plasmon ändert sich der Realteil und der Imaginärteil des n_{eff} stetig. In den Felddarstellungen in Abb. 15 und in Abb. 17 kann man sehen, dass sich das Feldmaximum auf die Seite es höher brechenden Materials verschiebt. Die Definition von symmetrienahen und unsymmetrischen Systemen im Rahmen dieser Arbeit erfolgt auf der Grundlage des Long-Range-Plasmon. Symmetrienahe Systeme sind Systeme, in denen das Long-Rang-Plasmon geführt wird. In unsymmetrischen Systemen ist das Oberflächenplasmon eine Leckmode, die auf der Seite des höheren Dielektrikums strahlt.

2.6 Hybridmoden

Hybridmoden sind Wellenleitermoden, die an einer Seite mit einem Oberflächenplasmon koppeln. Da sich Oberflächenplasmonen nur als TM-Moden ausbilden können, kann nur eine TM-Wellenleitermode das Plasmon anregen. Für die weitere Arbeit wurden alle Hybridmoden vom höchsten Brechungsindex von 1 an gezählt (TM1, TM2, …). Das Plasmon ohne Wellenleiterkopplung, das im symmetrischen Schichtsystem Short-Range-Plasmon heißt, wird als TM0-Mode bezeichnet.

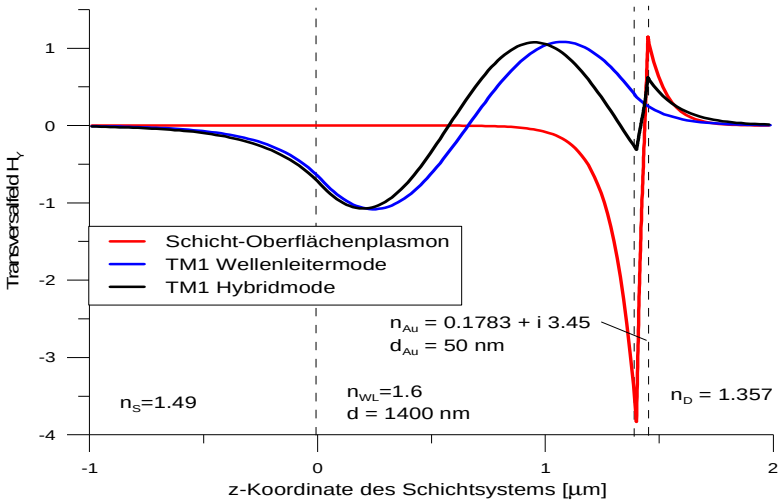

Abb. 19: TM-Moden im unsymmetrischen Schichtsystem.

In Abb. 19 sind in der Transversalfelddarstellung die TM0 (rot) und TM1 (schwarz) Mode für ein Schichtsystem aus PMMA, PS-Wellenleiter, 50 nm Goldschicht und Deckmedium Wasser sowie die erste Wellenleitermode hier TM1 (blau) für dasselbe Schichtsystem, jedoch ohne Goldschicht dargestellt. Man kann an der Feldverteilung der Hybridmode TM1 (schwarz) erkennen, dass die Wellenleitermode an der Goldschicht in eine Plasmon-Mode übergeht. Bei den Simulationen für diese Arbeit hat sich gezeigt, dass bei allen TM-Moden deren n_{eff} im Bereich der geführten Wellenleitermoden liegt, die Wellenleitermoden an der Goldgrenzfläche in ein Oberflächenplasmon übergehen bzw. anregen. Die Ausprägung der Plasmon-Mode ist stark von den Eigenschaften des Schichtsystems abhängig. So hat das Plasmon an der Gesamtfeldverteilung der Mode nur in bestimmten Fällen, die im Laufe der Arbeit dargestellt werden, einen nennenswerten Anteil.

2.6.1 Eindringtiefe des evaneszenten Feldes

Oberflächenplasmonen als Hybrid- oder ungekoppelte Moden bilden evaneszente Felder in Dielektrikum und Metallschicht aus. Durch das evaneszente Feld im Dielektrikum sind die Moden für Änderungen nahe der Grenzfläche sensitiv. Die Eindringtiefe des evaneszenten Feldes der Moden ist unterschiedlich. Zum Vergleich der Eindringtiefen wurden der H_y-Felder in Abb. 20 an der Metall-Dielektrikum-Grenzfläche auf 1 normiert. Das Schichtsystem für die Simulation ist Moldflon (1.31) als Substrat, PS (n=1.6) als Wellenleiter, 50 nm Goldschicht und Wasser (n=1.33) als Deckmedium.

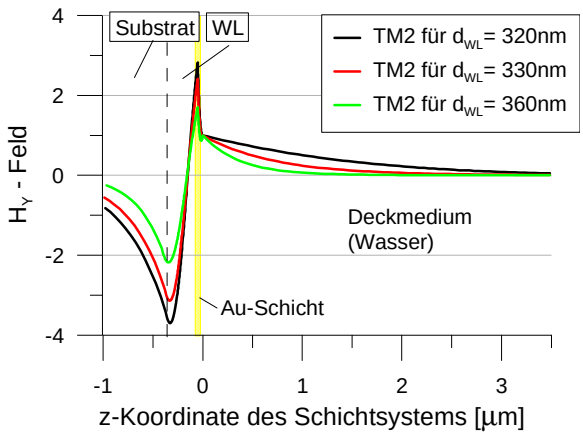

Abb. 20: Normiertes H_Y -Feld der TM 2 Mode nahe am Cutoff. Schichtsystem Mold n=1.31 | PS n=1.6 | 50nm Au | Wasser für d_{WL}=320nm (schwarz), d_{WL}=330nm (rot) und d_{WL}=360nm (grün).

Die normierte Transversalfelddarstellung der TM2-Moden nahe dem Cutoff ist in Abb. 20 aufgetragen. Die effektiven Brechungsindizes der Moden $n_{effD=320nm}$=1.3311 und $n_{effD=360nm}$=1.358) liegen in der Nähe des Brechungsindexes des Deckmediums (Wasser n_D=1.33). Das evaneszente Feld der Moden mit der kleinsten Brechungsindexabweichung hat die größte Eindringtiefe. Dieses Verhalten gilt nicht nur für die hier gezeigten Hybridmoden, sondern ist allgemein gültig und wird auch bei Wellenleitermoden beobachtet.

2.6.3 Empfindlichkeit der Moden

Durch das evaneszente Feld ist die Mode sensitiv auf Änderungen im Dielektrikum. Als Maß für die Empfindlichkeit der Mode wird in dieser Arbeit die Änderung des effektiven Brechungsindexes, hervorgerufen durch das Anlagern einer Schicht auf der Seite des Dielektrikums, verwendet. Diese Methode wurde von Wolfgang Lukosz für Wellenleitermoden näher untersucht und veröffentlicht [20]. Es hat sich dabei gezeigt, dass der Brechungsindex der angelagerten Schicht frei wählbar ist. Bei verschiedenen Brechungsindizes ändern sich die Position und die Form des Empfindlichkeitsmaxima nicht, sondern nur die Absolutwerte. Wird für verschiedene Schichtsysteme die gleiche Adlayer-Schicht verwendet, können diese ohne Einschränkungen miteinander verglichen werden. So wird die Sensitivität der Moden, bezogen auf die verwendete Adlayer-Schicht, berechnet.
Dies geschieht, in dem man den effektiven Brechungsindex der Mode für eine Schichtkonfiguration mit und ohne Adlayer-Schicht errechnet und die Differenz bildet. (Gl. 2.32)

$$\Delta n_{eff} = n_{eff\ AdL} - n_{eff} \qquad (2.32)$$

Um die Änderung pro Schichtdicke zu erhalten, wird Δn_{eff} durch die Adlayer-Schichtdicke geteilt. Da aber die hier berechneten Moden sehr unterschiedliche Eindringtiefen des evaneszenten Feldes besitzen, wird nicht durch die Schichtdicke geteilt sondern die Änderung bezogen auf die verwendete Adlayer-Schicht verwendet. Für alle Berechnungen wurde eine Adlayer-Schicht mit einer Dicke von 5 nm und einem Brechungsindex von n_{Ad}=1.5 verwendet.

3. Simulation und Design des Sensors

Das Verhalten von Mehrschichtsystemen kann mit der im Theorieteil beschriebenen Transfermatrix-Methode numerisch im Computer berechnet werden. In meinem Fall konnte ich auf ein Programm zur Simulation optischer Moden in beliebigen planaren Schichtsystemen zurückgreifen. Alle Simulationen zur Berechnung von optischen Moden und deren Feldverteilungen wurden mit den Programmen Slabsolve 0.9 und ATSOS 0.9 durchgeführt. ATSOS ist die Nachfolgeversion von Salbsolve mit einigen Änderungen und Erweiterungen. Beide Programme verwenden den Transfermatrix-Algorithmus, der im Theorieteil 2.3 und ausführlicher in der Veröffentlichung von John Chilwell [14] beschrieben ist.

3.1 Sensorkonzept

Die Grundidee des Sensorkonzeptes besteht darin, Oberflächenplasmonen mittels substratseitiger Einstrahlung über einen Gitterkoppler anzuregen.
Es wurde in der Dissertation von Ursula Schröter [5] gezeigt, dass es nicht ohne weiteres möglich ist, das hochsensitive Plasmon an der Gold-Deckmedium-Grenzfläche mit Gitterkoppler bei substratseitiger Einstrahlung anzuregen. Für die Anregung müsste die Metallschicht dickenmoduliert sein.

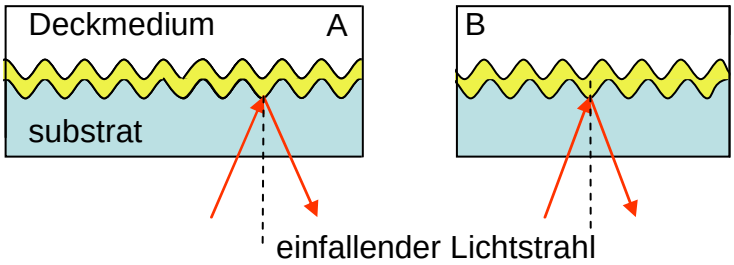

Abb. 21: Substratseitige Anregung mit symmetrischem Gitter (A) und dickenmoduliertem Gitter (B).

Nach der Diplomarbeit von Peter Stöcker [7], die von der Anregung von 2 Hybridmoden gleicher Sensitivität durch planare Wellenleiter handelt, schien es möglich zu sein, das Oberflächenplasmon über Wellenleiterkopplung effektiv anzuregen. Diese Idee weiter zu verfolgen und den Nachweis des wellenleitermodengekoppelten Plasmons (Hybridmode) zu erbringen, ist Gegenstand dieser Arbeit. Die Hybridmoden sollen bei substratseitiger Einstrahlung über ein Gitter angeregt werden. Die substratseitige Einstrahlung ist auf Grund von Flüssigkeitsanwendungen erforderlich, damit der Laserstrahl nicht durch das Deckmedium eingestrahlt werden muss. Der Sensor könnte somit alternativ zur prismengekoppelten Kretschmann-Konfiguration für verschiedenste Anwendungen eingesetzt werden.
Der allgemeine Aufbau des Sensors besteht aus einem Substrat und aus einer planaren wellenleitenden Schicht, auf die eine dünne Metalldeckschicht aufgebracht ist (siehe Abb. 22). An der Metalldeckschicht wird das Oberflächenplasmon angeregt und sie dient gleichzeitig als Sensoroberfläche. Bei den Untersuchungen werden biologische Mehrschichtsysteme auf die Goldschicht aufgebracht. Diese Schichtsysteme sind von der Problemstellung abhängig und bestehen meist aus verschiedenen Biomolekülen mit funktionellen Gruppen (Proteine, Thiole, mit Farbstoff markierte Moleküle). Bei verschiedenen Anwendungen erfolgt das Aufbringen oder das Modifizieren der Schichten mittels Lösungen auf Wasserbasis. Deshalb wird in den folgenden Simulationen Wasser als Deckmedium verwendet. Da die Metallschicht auch gleichzeitig die Sensoroberfläche ist, ist es wichtig, dass sie eine hohe chemische Stabilität

gegenüber den Schichtsystemen aufweist. Es lassen sich Oberflächenplasmonen an verschiedenen Metallen wie Silber, Gold, Kupfer, Tantal, Aluminium und Alkalimetallen anregen. Auf Grund der chemischen Stabilität hat sich für Anwendungen in der Biotechnologie Gold durchgesetzt. Viele Schichtsysteme wurden so auf die Anlagerung an Goldoberflächen optimiert. So wird für den Sensor eine Goldschicht mit einer Dicke von 50 nm verwendet. Die Dicke 50 nm wurde gewählt, weil sie bei vielen Untersuchungen mit Oberflächenplasmonen-Anregung verwendet wird.

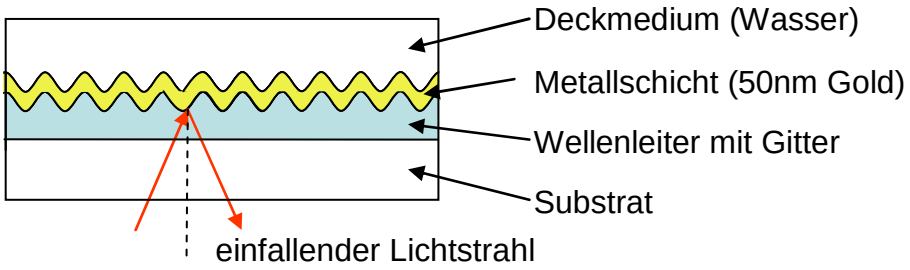

Abb. 22: Schematische Darstellung des Sensorschichtsystems.

Die Anregung der Hybridmoden erfolgt mittels Gitter. Um die Gitter schnell und in größerer Anzahl herzustellen, werden sie mittels Heißprägeverfahren in die Polymer-Wellenleiterschicht geprägt. Dieses Verfahren bedingt, dass das Wellenleitermaterial ein Thermoplast ist. Bei Prägeversuchen hat sich darüber hinaus gezeigt, dass es sinnvoll ist, auch ein thermoplastisches Substrat zu verwenden. Beim Prägen schmilzt dann das Substrat mit dem Wellenleiter gemeinsam auf, wodurch das Gitter einfacher und mit höherer Qualität übertragen wird. Als Wellenleitermaterial wurde Polystyrol (PS) mit einem theoretischen Brechungsindex von 1,6 und als Substrat Polymethylmethacrylat (PMMA) mit einem theoretischen Brechungsindex von 1.49 ausgewählt. Beide Materialen besitzen eine Glasübergangstemperatur T_G im Bereich 100 - 120°C und eignen sich dadurch sehr gut zum Heißprägen. Für die Experimente und die Simulation ergibt sich so ein primäres Schichtsystem aus PMMA-Substrat, PS-Wellenleiter, 50 nm Goldschicht und Wasser als Deckmedium.
Bei den Simulationen wurden an die Goldschicht angelagerte Schichtsysteme nicht berücksichtigt. Es wurde nur das Verhalten des eigentlichen Sensors bei einer Wellenlänge von 632.8 nm (He-Ne-Laser) untersucht. Dies entspricht der Lichtquelle, die in den Experimenten verwendet wurde.

3.1.1 Liste der simulierten Schichtsysteme

Im laufe der Arbeit ergaben sich neben dem Primären Schchichtsystem noch andere Schichtsysteme die aus Unterschiedlichen Gründen simuliert wurden. In Tabelle 1 sind die Schichtsysteme dargestellt. Es wurden insgesamt drei verschiedene Substratmaterialien (PMMA, Quarz und Moldflon[2]) mit drei verschiedenen Wellenleitermaterialen (PMMA, PS, n=1.7) kombiniert. Moldflon wird in den Tabellen meist als Mold abgekürzt.
Für alle Simulationen wurde Gold als Metallschicht und Wasser als Deckmedium verwendet.

[2] Moldflon [21] ist der Markenname der Firma Elring Klinger für ein thermoplastisches PTFE mit einem niedrigen optischen Brechungsindex von 1.31. Die Transparenz des Materials ist von Lieferform und Herstellung abhängig.

Tabelle 1: Sensorsysteme (Au n = 0.1783 + i 3.45; Wasser n = 1.33).

Systeme	Substrat		Wellenleiter		Metal	Deckmedium
1	PMMA	1.49	PS	1.6	50nm Au	Wasser
2	Quarz	1.457	PS	1.6	50nm Au	Wasser
3	Quarz	1.457	PMMA	1.49	50nm Au	Wasser
4	PMMA	1.49	n=1.7	1.7	50nm Au	Wasser
5	Quarz	1.457	n=1.7	1.7	50nm Au	Wasser
6	Mold	1.31	PMMA	1.49	50nm Au	Wasser
7	Mold	1.31	PS	1.6	50nm Au	Wasser
8	Mold	1.31	n=1.7	1.7	50nm Au	Wasser

3.2 Unsymmetrische Schichtsysteme

Das primäre Schichtsystem aus PMMA, PS, 50 nm Gold und Wasser ist ein unsymmetrisches Schichtsystem. Der Brechungsindex des Substrats weicht stark von dem des Deckmediums ab. Zur Untersuchung des Schichtsystems wurde eine Modenkarte und die Feldverteilung der Moden für einzelne Schichtdicken berechnet. Die Modenkarten wurden erstellt, indem bei verschiedener Wellenleiterdicke jeweils der effektive Brechungsindex der Moden berechnet und über die Wellenleiterdicke aufgetragen wurde. Es wurden alle Moden die einen effektiven Brechungsindex größer als das Deckmediums (n=1.33) haben berechnet. Geführte Hybridmoden existieren nur im Bereich der geführten Wellenleitermoden, Hybridmoden unterhalb sind strahlende Moden bzw. Leckmoden.
In den unsymmetrischen Systemen wurden die Modenkarten in zwei Bereiche geteilt. Der eine Bereich zeigt die Moden deren effektiver Brechungsindex größer dem Substratbrechungsindex ist (Abb. 23), der andere Bereich zeigt die Moden zwischen Deckmedium- (Wasser) und Substratbrechungsindex (
Abb. 24). Im ersten Bereich liegen die geführten Hybridmoden und das Oberflächenplasmon. Im Zweiten liegen Leckmoden, die an Strahlung koppeln und die nicht vollständig vom Schichtsystem geführt werden können.
Die Feldverteilungen der Moden wurden mit der Simulationssoftware ATSOS erstellt. Das Programm normiert das Integral der geführten Leistung auf 1. Somit ist die Gesamtleistung jeder Mode bei der Felddarstellung auf 1 normiert. In den Felddarstellungen lässt sich die Kopplung der Wellenleitermode mit dem Oberflächenplasmon erkennen.

3.2.1 System 1 PMMA-PS-Sensor

Das primär System besteht aus PMMA-Substrat, Polystyrol-Wellenleiter und einer 50 nm dicken Goldschicht. Alle Experimente wurden mit diesem Schichtsystem durchgeführt. Die Simulationen für die Experimente werden in Kapitel 5 mit den Messergebnissen dargestellt. Hier werden die allgemeinen Eigenschaften des Schichtsystems anhand der Modenkarten und von Felddarstellungen erklärt.
Deckmedium für alle Simulationen ist Wasser, die einfallende Lichtwellenlänge ist 632.8 nm.

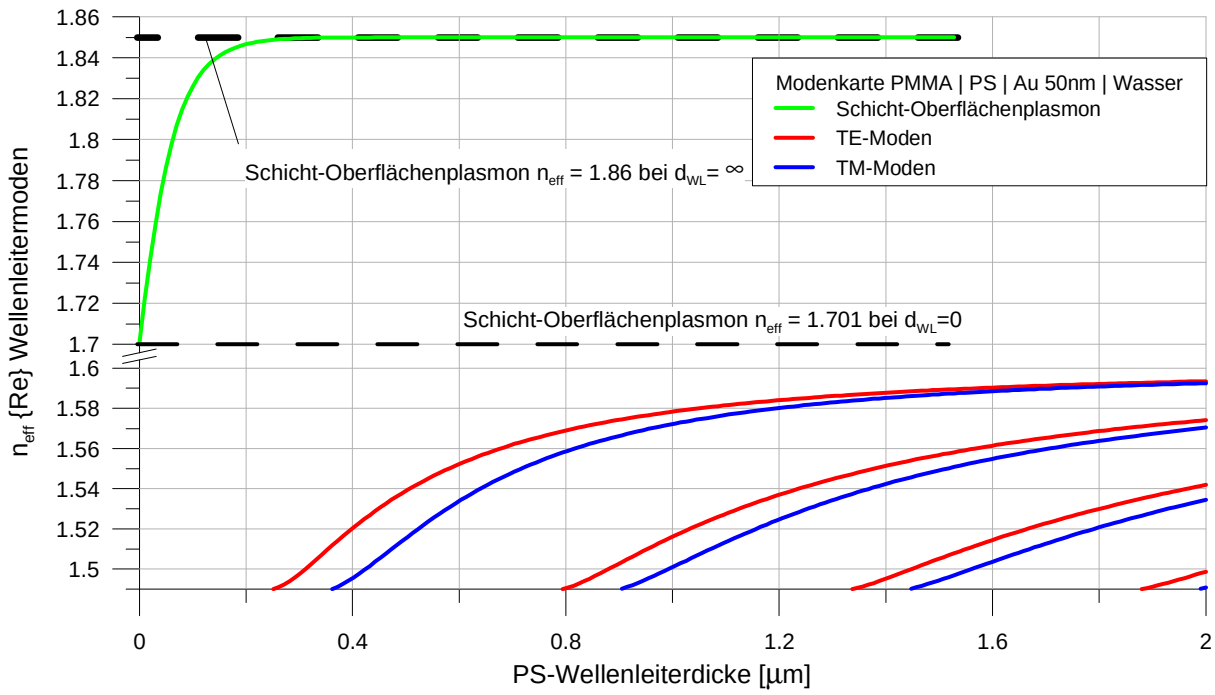

Abb. 23: Modenkarte PMMA | PS | Au (50nm) | Wasser bei Variation der Wellenleiterdicke; reines Oberflächenplasmon (grün), TE-Moden (rot); TM-Moden (blau).

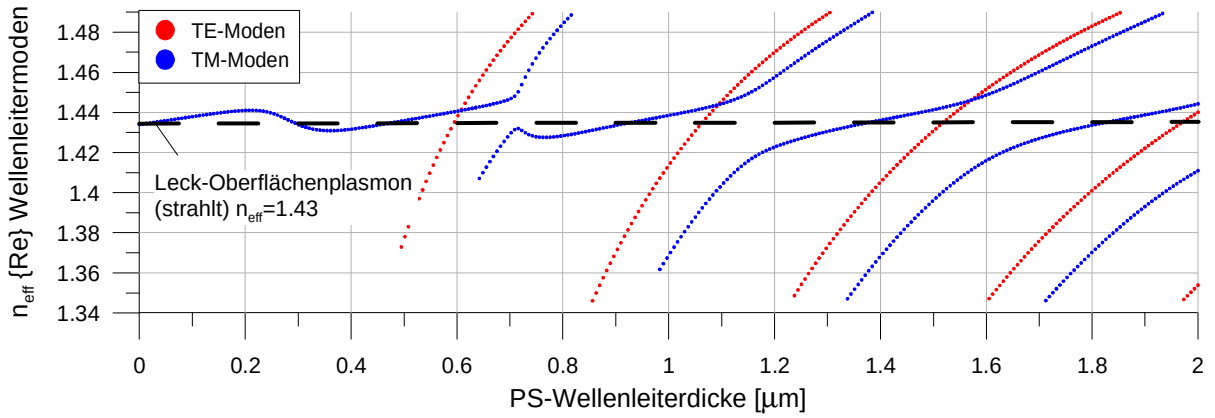

Abb. 24: Modenkarte für Strahlungsmoden analog zu Abb. 23.

Am Verlauf des effektiven Brechungsindex des Schicht-Oberflächenplasmons (grüne Line Abb. 23) kann man erkennen, dass der effektive Brechungsindex n_{eff} des Oberflächenplasmons von 1.434 bei d=0nm zuerst steil ansteigt und sich dann dem Wert 1.85 annähert. Ab 400 nm ist die weitere Steigung nicht mehr zu erkennen. Dieses Verhalten lässt sich darauf zurückführen, dass das Plasmon bei dicken Filmen nicht mehr vom Substrat beeinflusst wird (siehe 3.3.1). Die TE-Moden können auf Grund ihrer Polarisation keine Oberflächenplasmonen an den Goldgrenzschichten anregen. Somit sind die dargestellten TE-Moden keine Hybridmoden sondern geführte Wellenleitermoden. Durch die Goldschicht wird das evaneszente Feld der TE-Wellenleitermode stark gedämpft (Abb. 26). Dies macht sie für Änderungen jenseits der Goldschicht unempfindlich.

In der Modenkarte Abb. 23 sind die geführten Moden dargestellt. Die grüne Kurve entspricht dem effektiven Brechungsindex des reinen Oberflächenplasmons. Die roten Kurven entsprechen den geführten Wellenleitermoden (TE), die blauen Kurven entsprechen den Hybridmoden (TM). Sie liegen im Bereich der geführten Wellenleitermoden zwischen Substrat nSub=1.49 und Wellenleiter nWL=1.6 Brechungsindex. Beim Übergang von Abb. 23 zu Abb.

22 sind die Moden leicht versetzt, da im unmittelbaren Übergangsbereich der Modensolver-Algorithmus die Moden nicht bestimmen kann.
Abb. 24 ist die Weiterführung der Modenkarte Abb. 23 unterhalb des Wellenleiter-Cutoffs. Die dargestellten Moden sind sogenannte Leckmoden, die auf der Seite des Substrates strahlen. Die schwarze gestrichelte Linie bei d = 0 und d = ∞ entspricht dem Oberflächenplasmon, das auf der Seite des Deckmediums lokalisiert ist und auf der Seite des Wellenleiters strahlt. Bei d = ∞ existiert nur noch der Wellenleiter mit n=1.6. Der effektive Brechungsindex des Oberflächenplasmons liegt hier bei 1.436, dies ist 0.003 höher als bei d=0. Dies ist weniger als die Stärke der Linie. Man kann erkennen, dass die TM1-Mode bei d=0 als strahlendes Plasmon beginnt und in eine strahlende Hybridmode übergeht. Alle TM-Moden koppeln im Bereich um 1.43 mit dem Oberflächenplasmon besonders stark. Sie haben aber auf Grund des niedrigen n_{eff} Leckwellencharakter.

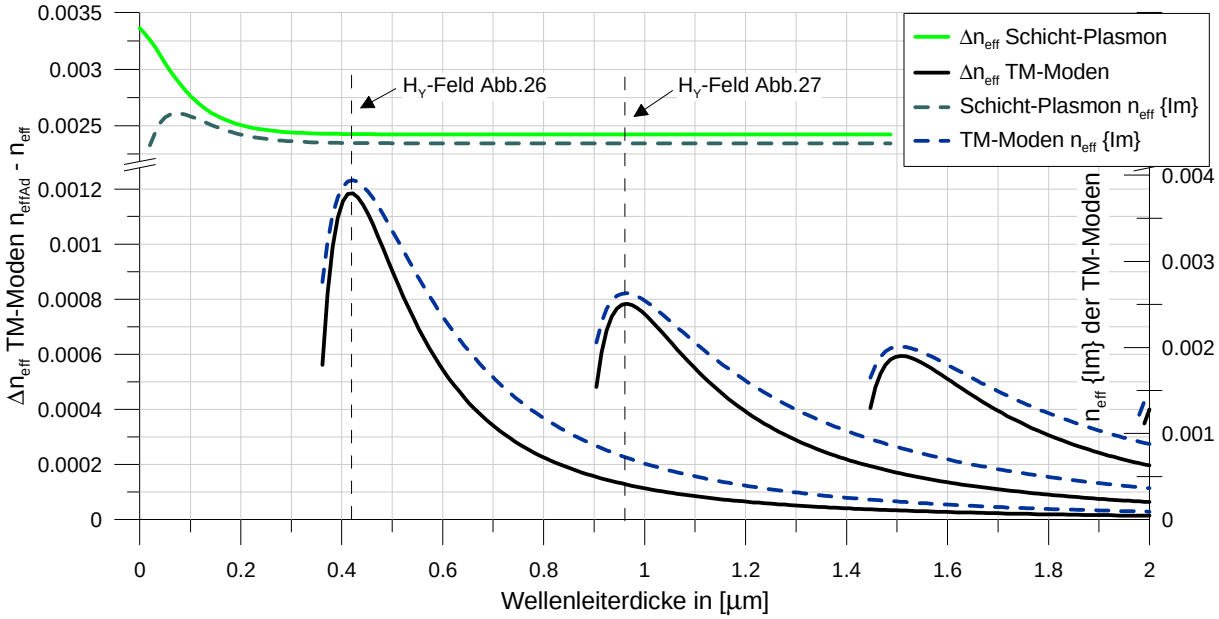

Abb. 25: Vergleich von Δn_{eff} und Imaginärteil für die TM-Moden im 1. System.

Im Diagramm Abb. 25 ist die Sensitivität (linke y-Achse) zusammen mit dem Imaginärteil (rechte y-Achse) der Moden dargestellt. Hier fällt auf, dass die Empfindlichkeit der TM1-3-Moden und der Imaginärteil der Moden denselben Verlauf nehmen. An der Stelle des maximalen Imaginärteils befindet sich auch das Maximum der Sensitivität. Der Imaginärteil der Wellenleitermoden ohne Plasmonenkopplung liegt weit tiefer als der Imaginärteil der Plasmonenmoden. Durch die Wechselwirkung der Wellenleitermode mit dem Plasmon erhöht sich der Imaginärteil. Das Plasmon ist an der Grenzfläche Gold | Wasser lokalisiert und ist sensitiv für Änderungen im Deckmedium. Wird die Wechselwirkung mit dem Plasmonen stärker, nimmt auch die Empfindlichkeit der Hybridmode zu.
Das Plasmon mit dem hohen n_{eff} weist die höchste Empfindlichkeit bei d_{WL}=0 auf. Bei dicken Wellenleiterschichten ändern sich Realteil, Imaginärteil und Sensitivität nicht. Man kann weiter erkennen, dass die Sensitivität der Hybridmoden kleiner ist als die des reinen Oberflächenplasmons.
Zum besseren Verständnis der Hybridmoden habe ich das transversale H_Y -Feld der Moden für die TM1 und TM2-Mode bei maximaler Empfindlichkeit dargestellt (siehe Abb. 26 und Abb. 27).

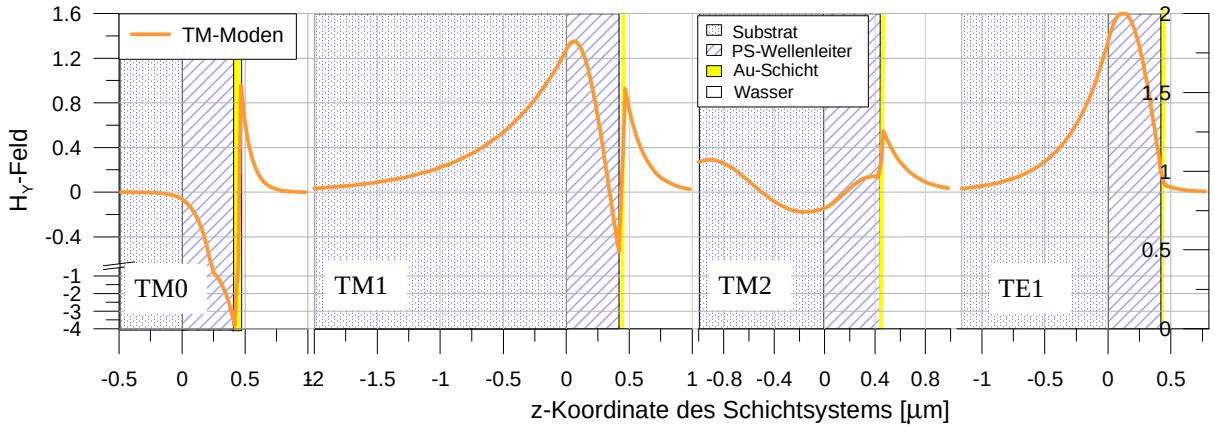

Abb. 26: Feldverteilung der TE und TM-Moden bei d_{WL}=417nm im 1. System.

Abb. 26 zeigt die Feldverteilung des Transversalen H_Y-Feldes der TM-Moden bei einer Wellenleiterdicke von 417 nm. Bei dieser Wellenleiterdicke können sich drei TM-Moden ausbilden. Bei der TM0-Mode handelt es sich um ein reines Oberflächenplasmon. Das Feldmaxima auf der Seite mit des höher brechenden Mediums (Substrat) ist stärker ausgebildet. Die Hybridmode TM1 (Mitte) hat bei dieser Wellenleiterdicke die höchste Empfindlichkeit gegenüber der Adlayerschicht. Man kann erkennen, dass die Wellenleitermode an der Goldschicht in das Plasmon übergeht. Das Maximum des Feldes an der Grenzfläche zwischen Gold und Wasser ist kleiner als das Maximum der Wellenleitermode. Somit ist der Hauptteil des Feldes in der Wellenleiterschicht lokalisiert. Die TM2-Mode ist ein strahlendes Oberflächenplasmon, das an der Gold-Wasser-Grenzfläche lokalisiert ist.

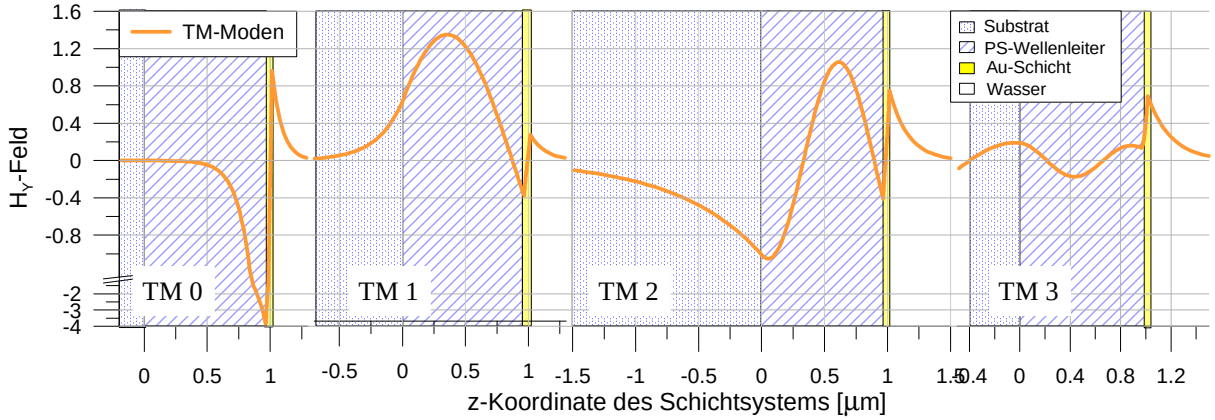

Abb. 27: H_Y-Feld der TM-Moden bei d_{WL}=965nm im 1. System.

Abb. 27 zeigt die Feldverteilungen für die Wellenleiterdicke von 965 nm. Hier weist die TM2-Mode die höchste Empfindlichkeit unter den Hybridmoden auf. Beim Vergleich von Abb. 26 und Abb. 27 fällt auf, dass sich das Feld der TM0-Mode kaum unterscheidet. Bei der TM1-Mode ist das Feldmaximum des Plasmonenteils der Mode im Vergleich zum Wellenleitermaximum wesentlich kleiner. Bei der TM2-Mode sind die Feldmaxima des Plasmonenteils und des Wellenleitermodeteils fast gleich groß. Bei der TM2-Mode ist der Hauptteil des Feldes in dem Wellenleiterschicht lokalisiert.

Zum direkten Vergleich der Moden wurde das Feldmaximum an der Gold-Wasser-Grenzfläche auf 1 normiert (Abb. 28). Dies ermöglicht den direkten Vergleich der evaneszenten Felder der Moden. Dies ist der Feldanteil, der für die Sensorik eingesetzt werden kann.

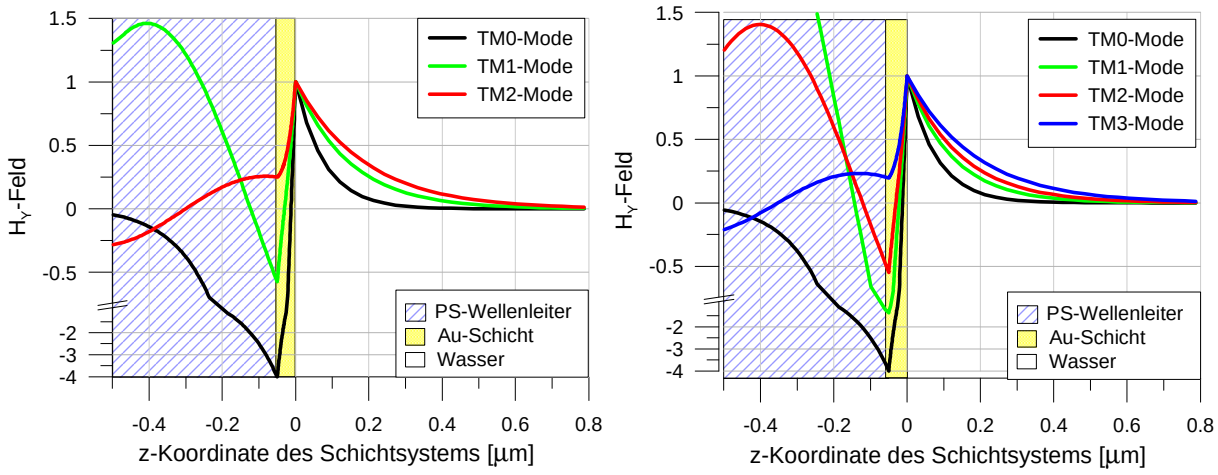

Abb. 28: Normiertes H_Z -Feld der Moden vom 1. System bei d_{WL}=417nm (links) und d_{WL} = 965nm (rechts).

Beim Vergleich der Feldverteilungen der Moden, normiert auf das Feldmaximum an der Gold-Wasser-Grenzfläche, fällt auf, dass das strahlende Plasmon das längste evaneszente Feld ausbildet. Das Schicht-Oberflächenplasmon (schwarze Linie) weist das kürzeste evaneszente Feld auf, da der effektive Brechungsindex am weitesten von dem des Deckmediums abweicht. Gleichzeitig weist es jedoch die höchste Empfindlichkeit gegenüber der Adlayerschicht auf. Es folgt aus einer kleineren Eindringtiefe des evaneszenten Feldes nicht gleich eine geringere Empfindlichkeit gegenüber einer dünnen Adlayerschicht.

3.2.2 Änderung des Deckmediums Brechungsindex

Bei den Simulationen für das System 1 mit PMMA-Substrat hat sich gezeigt, dass die Sensitivität der Moden recht klein ist und unterhalb der des Schicht-Oberflächenplasmons liegt. Um zu sehen in welchen Bereichen das Schichtsystem empfindlich, ist wurde in einer Simulation der Brechungsindex des Deckmediums verändert.

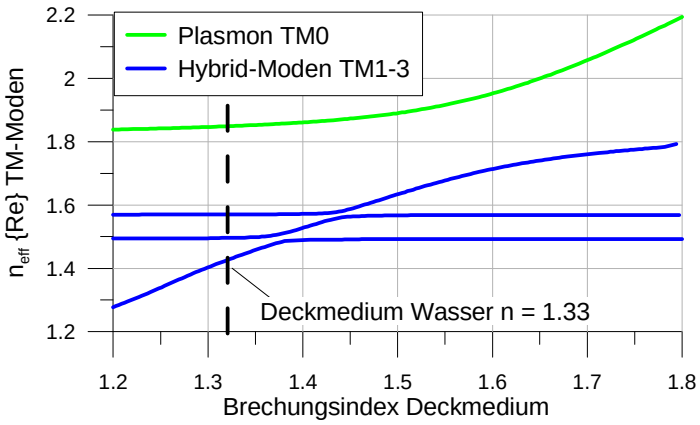

Abb. 29: Änderung des Deckmediums Brechungsindex.

In Abb. 29 wurde für das System 1 (PMMA-PS) bei der Wellenleiterdicke d_{WL} = 965 nm der Brechungsindex des Deckemediums von 1.2 bis 1.8 variiert. Die senkrechte gestrichelte Line entspricht dem Deckmedium Wasser, mit dem der Sensor eingesetzt werden soll. In diesem Diagramm ist die Steigung der Kurven gleichbedeutend mit der Änderung des Brechungsindex Δn_{eff}. Die Steigung der geführten Moden bei n_D = 1.33 (Wasser) ist kaum sichtbar. Man kann erkennen, dass das Leck-Plasmon eine viel größere Steigung hat. Um die Steigung der Hybridmoden zu erhöhen, kann der untere Cutoff der Moden in den Bereich der Plasmonenkurve

verschoben werden. Dies ist nur möglich, indem der Substratbrechungsindex niedriger gewählt wird. So wurde als nächstes ein System mit Quarzglas (n=1.457) als Substrat untersucht.

3.2.3 System 2 Quarz-PS-Sensor

Als zweites wurde ein Schichtsystem, bestehend aus Quarzglas als Substrat, PS-Wellenleiter, 50 nm Goldschicht und Wasser als Deckmedium, untersucht. Im Unterschied zum 1. System wurde Quarz (n_{Sub}=1.457) anstatt PMMA (n=1.49) verwendet. Ausgehend von der Berechnung bei variablem Deckmedium sollte dieses Schichtsystem eine höhere Empfindlichkeit gegenüber der Adlayerschicht aufweisen. Durch Modifikation des Heißprägeprozesses können solche Sensorsysteme mit den Methoden dieser Arbeit hergestellt werden.

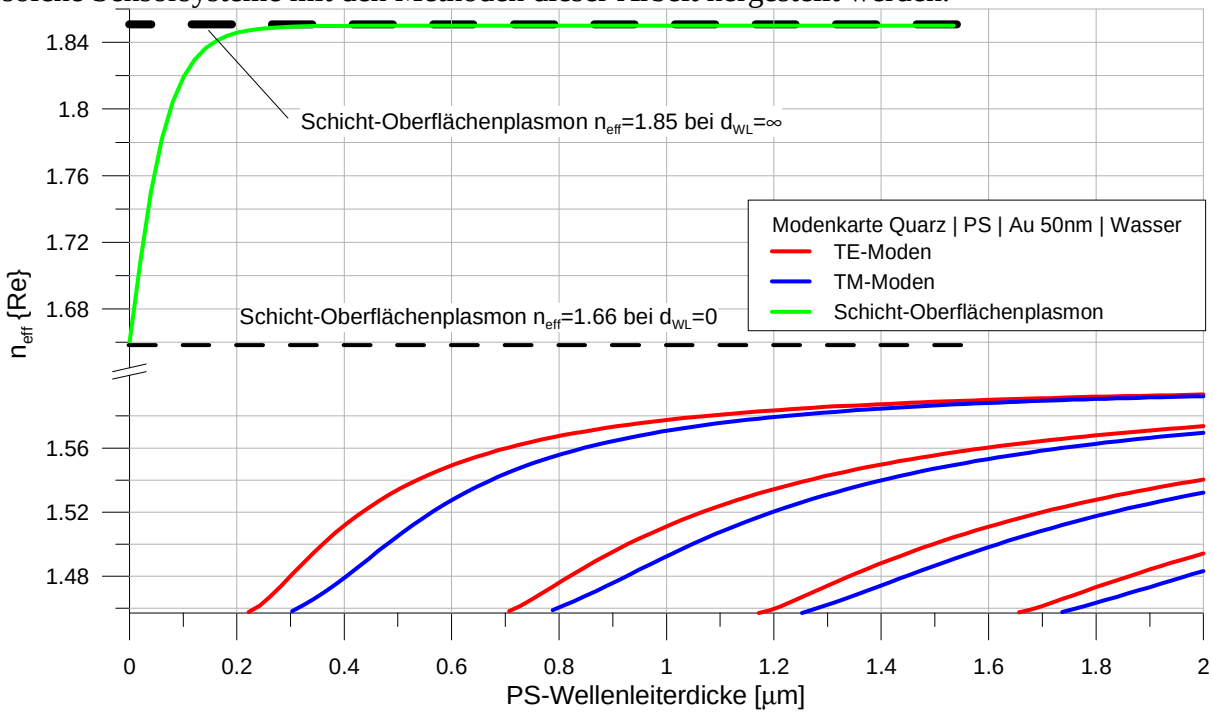

Abb. 30: Modenkarte für 2. System Quarz | PS | Au (50nm) | Wasser bei Variation der Wellenleiterdicke; reines Oberflächenplasmon (grün), TE-Moden (rot); TM-Moden = Hybridmoden (blau).

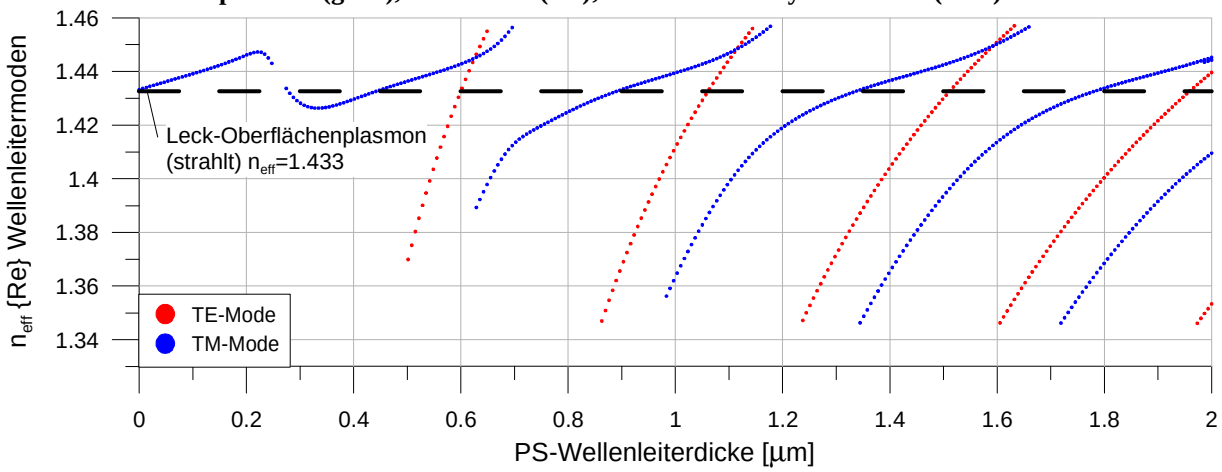

Abb. 31: Modenkarte für Strahlungsmoden des Systems 2 analog zu Abb. 30.

Die Modenkarte des 2. Systems entspricht im geführten Bereich (Abb. 30) weitgehend dem der Modenkarte des Systems 1, unterscheidet sich aber in den Zahlenwerten.

Die zweite Modenkarte (Abb. 31) zeigt die Leckmoden. Der Abstand zwischen dem Leck-Oberflächenplasmon (gestichelte Linie) und dem unteren Curoff ist im Vergleich zum 1. Sys-

tem kleiner geworden. Dies resultiert aus dem niedrigeren Substratbrechungsindex im 2. System.

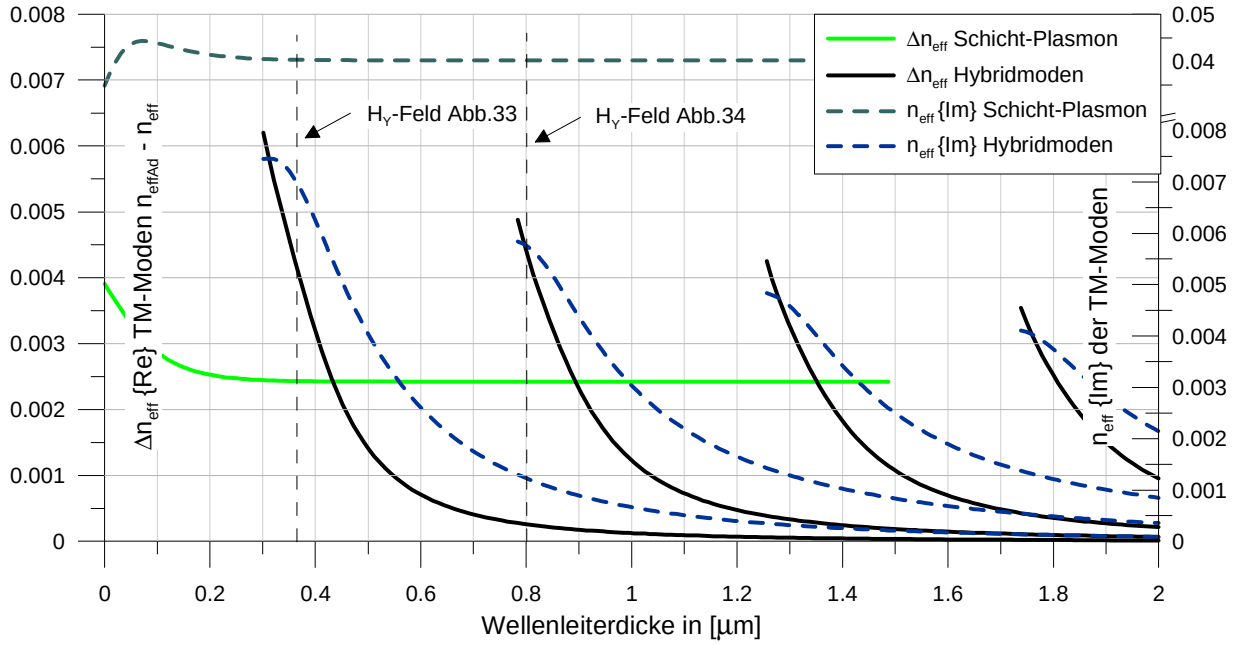

Abb. 32: Darstellung der Empfindlichkeit Δn_{eff} und n_{eff} {Im} für das 2. Systems.

Bei der gemeinsamen Darstellung der Empfindlichkeit Δn_{eff} gegenüber der Adlayerschicht und des Imaginärteils sieht man, dass die Empfindlichkeit der Hybridmoden für bestimmte Konfigurationen über der Empfindlichkeit der Plasmonen-Mode liegt. Die Maxima dieser Empfindlichkeit liegen nun im Cutoff der Moden, da der untere Cutoff näher an dem strahlenden Oberflächenplasmon liegt. Die Form des Imaginärteils weicht hierbei stärker von der Form der Sensitivität ab, da der Anteil des Oberflächenplasmons an der Mode größer ist. Die Sensitivität der Hybridmode liegt für einige Schichtkonfigurationen höher als die des nichtgekoppelten Oberflächenplasmons (TM0).

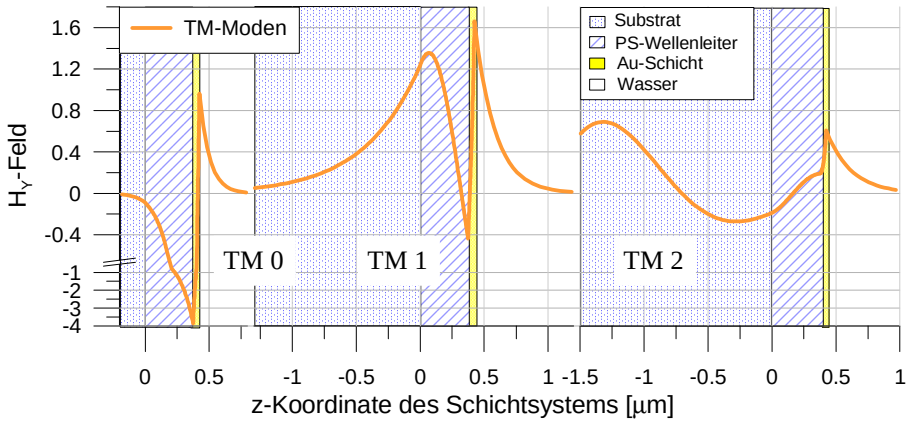

Abb. 33: H_Y -Feld der TM-Moden von System 2 bei d_{WL}=375nm.

Die Feldverteilungen Abb. 33 sind für System 2 mit einer Wellenleiterdicke d_{WL} = 375 nm dargestellt. Die TM0-Mode verhält sich hier wie in System 1. Die 1. Hybridmode (TM1) liegt bei dieser Dicke nahe am Cutoff und hat eine hohe Empfindlichkeit. Das Feldmaximum an der Gold-Wasser-Grenzfläche liegt höher als das Feldmaximum der Wellenleitermode. Dadurch hat das Plasmon einen größeren Anteil an der Gesamtmode. Die TM2-Mode ist ein strahlendes Oberflächenplasmon das an der Gold-Wasser-Grenzfläche lokalisiert ist. Der effektive Brechungsindex liegt unterhalb des Wellenleiter Cutoffs bei $n_{eff\ TM2}$ = 1.428.

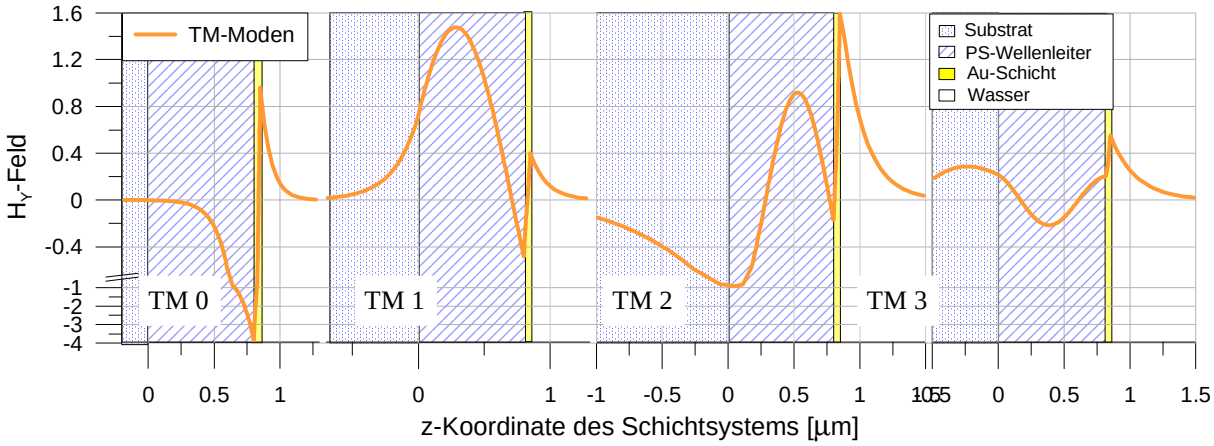

Abb. 34: H_Y -Feld der TM-Moden von System 2 bei d_{WL}=800nm.

In den Felddarstellungen sind die TM-Moden des 2. Systems bei Wellenleiterdicke d_{WL} 800 nm dargestellt. Bei dieser Schichtkonfiguration liegt die 2. Hybridmode (TM2) nahe am Cutoff. Sie hat die höchste Sensitivität der dargestellten Hybridmoden mit einen ausgeprägten Plasmonenanteil, bei dem das Feldmaximum höher liegt als das der Wellenleitermode. Bei der 1. Hybridmode ist der Plasmonenanteil sowie die Empfindlichkeit bei dieser Schichtdicke kleiner. Der effektive Brechungsindex der 1. Hybridmode stieg von $n_{eff\ TM1\ d375}$ = 1.473 auf $n_{eff\ TM1\ d800}$ =1.556 an. Dadurch hat sich die Mode weiter vom der Leck-Plasmon-Mode bei 1.436 entfernt. Die Kopplung der Mode mit dem Plasmon ist schwächer, dadurch sinkt die Empfindlichkeit der Mode.
Beim System 2 können sich geführte Hybridmoden mit kleineren n_{eff} ausbilden, da der Substratbrechungsindex niedriger liegt. Die Moden in der Nähe des unteren Cutoffs liegen, im Vergleich zu System 1, näher an der Leck-Plasmon-Mode. Sie besitzen einen höheren Plasmonenanteil und dadurch eine höhere Empfindlichkeit.

3.3 Vergleich verschiedener Schichtsysteme

Um den Einfluss von Substrat- und Wellenleiterbrechungsindex auf die Hybridmoden zu untersuchen, wurde die Empfindlichkeit für verschiedene Schichtsysteme bei variabler Wellenleiterdicke berechnet. Es wurden dabei für alle Schichtsysteme aus Tabelle 1 die Moden TM0, TM1 und TM2 einem Diagramm gemeinsam dargestellt.
Um das Verständnis der Diagramme zu erleichtern, wurden die Systeme mit gleichem Substrat farblich zusammengefasst. Systeme 1 und 4 mit PMMA als Substart sind grünlich, System 2, 3 und 5 mit Quarzglas als Substrat sind rötlich und System 6, 7 und 8 mit Moldfon sind bläulich dargestellt.

3.3.1 Empfindlichkeit des nichtgekoppelten Oberflächenplasmon (TM0)

Die TM0-Mode entspricht einem reinen Oberflächenplasmon ohne Wellenleiterkopplung. In symmetrischen Systemen (blau) entspricht es dem Short-Range-Plasmon. Da der Hauptteil des Feldes der Mode in unsymmetrischen Systemen an der Substratseite lokalisiert ist, wird es in dieser Arbeit als Schicht-Oberflächenplasmon bezeichnet. Der effektive Brechungsindex liegt je nach Schichtsystem im Bereich von n_{eff} = 1.6 – 1.8. Der effektive Brechungsindex der Mode n_{eff} liegt weit über den möglichen ausbreitungsfähigen Wellenleiter Brechungsindizes, deshalb weist die Mode keine Kopplung mit den Wellenleitermoden auf.
In der Abb. 35 ist die Empfindlichkeit des Oberflächenplasmon (TM0) von allen 8 Systemen dargestellt. Das Plasmon koppelt wegen des hohen effektiven Brechungsindex nicht mit den

Wellenleitermoden. Es spürt nur eine effektive Brechzahländerung an der Grenzfläche zur Goldschicht. Bei steigender Wellenleiterdicke ist das evanestzente Feld des Plasmons, auf Grund der endlichen Länge, stärker in der Wellenleiterschicht lokalisiert. Dadurch verändern sich der effektive Brechungsindex sowie die Sensitivität. Die Mode verhält sich so, als ob in einem Schichtsystem ohne Wellenleiter der Substrat Brechungsindex steigen würde.
Es geht aus dem Diagramm hervor, dass die Sensitivität für symmetrisch aufgebaute Schichtsysteme höher liegt. Für Wellenleiter mit hohem Brechungsindex n=1.7 liegt der Punkt, an dem das Substrat keinen Einfluss mehr hat, schon bei 350 nm. Bei einem Wellenleiterbrechungsindex von n=1.49 liegt der Punkt erst bei 500 nm.

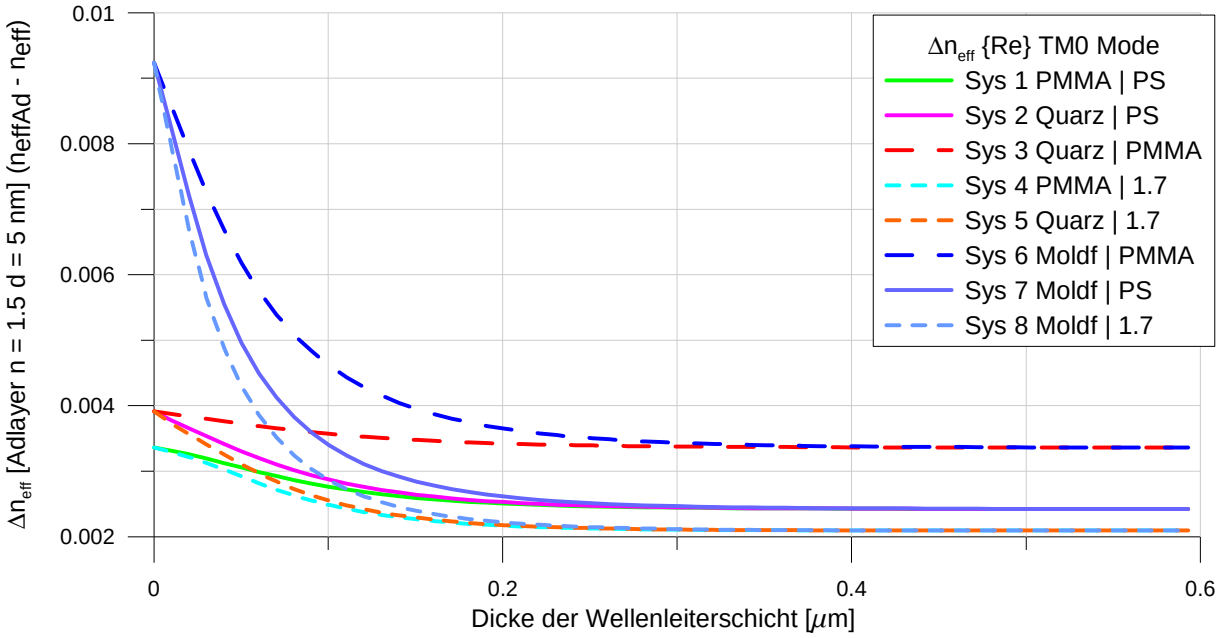

Abb. 35:Empfindlichkeit Δn_{eff} des Oberflächenplasmons (TM0) bei variabler Wellenleiterdicke.

Um zu bestätigen, dass das nicht gekoppelte Plasmon bei großem Wellenleiterdicken das Substrat nicht mehr spürt, wurde eine Simulationen durchgeführt. Es wurde für ein System ohne Wellenleiter der Brechungsindex des Substrats zwischen 1.2 und 1.8 variiert und die Empfindlichkeit Δn_{eff} des Oberflächenplasmons berechnet (Abb. 36). Das Schichtsystem bestand aus Substrat, 50nm Goldschicht und Wasser.

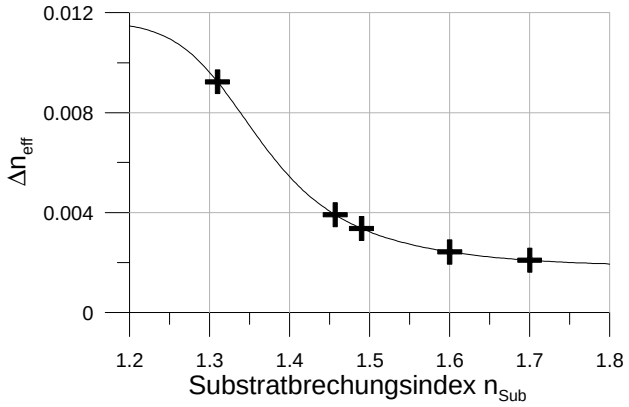

Abb. 36: Δn_{eff} {Re} bei variablem Substratbrechungsindex im Schichtsystem Substrat | 50nm Au | Wasser (+ Werte aus Abb. 35).

In Abb. 36 ist die Empfindlichkeit Δn_{eff} in Abhängigkeit des Subratbrechungsindex aufgetragen. Die Kreuze entsprechen den Werten, die sich aus Abb. 35 bei d = 0 oder d = 500nm erge-

ben. Man erkennt, dass die Kreuze genau auf der Kurve liegen. Daraus folgt, dass bei großen Wellenleiterdicken der Brechungsindex des Substrates keinen Einfluss mehr auf das Oberflächenplasmon-Mode (TM0) hat.

3.3.2 Empfindlichkeit der 1. Hybridmode (TM 1)

Die TM1-Mode entspricht im symmetrischen (n_{Sub}= n_D) System ohne Wellenleiter (Abb. 37 blau d = 0) dem Long-Range-Plasmon. Mit zunehmender Unsymmetrie, hervorgerufen durch die steigende Wellenleiterdicke, geht es in die 1. Hybridmode über. Hybridmoden können nur im Bereich, in dem auch Wellenleitermoden ausbreitungsfähig sind, existieren. So müssen die effektiven Brechungsindizes der Hybridmoden zwischen dem von Substrat und Wellenleiterbrechungsindex liegen.

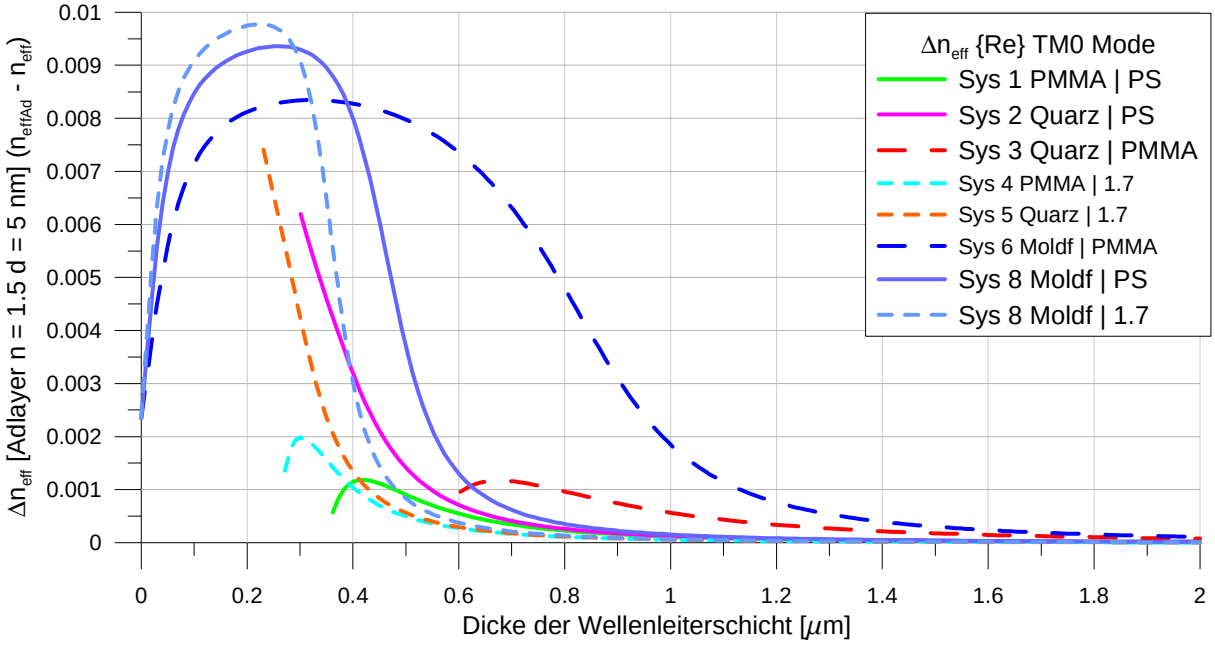

Abb. 37: Empfindlichkeit Δn_{eff} aller Systeme für die TM1-Mode bei variabler Wellenleiterdicke.

Abb. 37 zeigt die Kurven der Empfindlichkeit Δn_{eff} für der 1. Hybridmode (TM1) für alle Systeme. Die Systeme mit dem niedrigsten Substrat-Brechungsindex weisen den größten Δn_{eff} auf. Mit zunehmender Wellenleiterdicke steigt Δn_{eff} an und sinkt nach dem überschreiten des Maximums wieder. Nur bei den zwei Systemen mit Quarz als Substrat bildet der Cutoff das Maximum. Der Anstieg von Δn_{eff} fällt bei den Systemen mit höherer Differenz zwischen n_{Sub} zu n_D steiler aus und bildet ein höheres Maximum. Dabei verschiebt sich die Position zu kleineren Wellenleiterdicken und das Maximum wird insgesamt schmäler. Die Positionsverschiebung erklärt sich dadurch, dass durch die höhere Brechungsindexdifferenz die Wellenleitermoden bei kleineren Wellenleiterdicken anschwingen können.
Beim Betrachten der blauen Linien, die den symmetrischen Systemen Substrat zu Deckmedium entsprechen fällt auf, dass Δn_{eff} der Hybridmoden höher ist als Δn_{eff} des Long-Range-Plasmons (d_{WL}=0).
Bei den Sensorsystemen mit Quarzsubstrat (rötlich) kann sich bei d_{WL}=0 kein Long-Range-Plasmon ausbilden, da die Brechungsindexdifferenz zu groß ist. Die höchste Sensitivität befindet sich hier am Cutoff der Wellenleitermode, wobei die Kurvenform von System 2 und 5 von den anderen Kurven abweicht.
Die Systeme mit PMMA-Substraten, weisen die höchste Unsymmetrie zwischen Substart und Deckmedium auf. Für sie wurden die niedrigsten Δn_{eff} Werte berechnet.

3.3.3 Empfindlichkeit der 2. Hybridmode (TM2)

Die TM2-Mode ist die 2. Hybridmode, die im System anschwingen kann. Um herauszufinden, wie sich Hybridmoden-Sensorsysteme bei höheren Moden verhalten wurden sie untersucht.

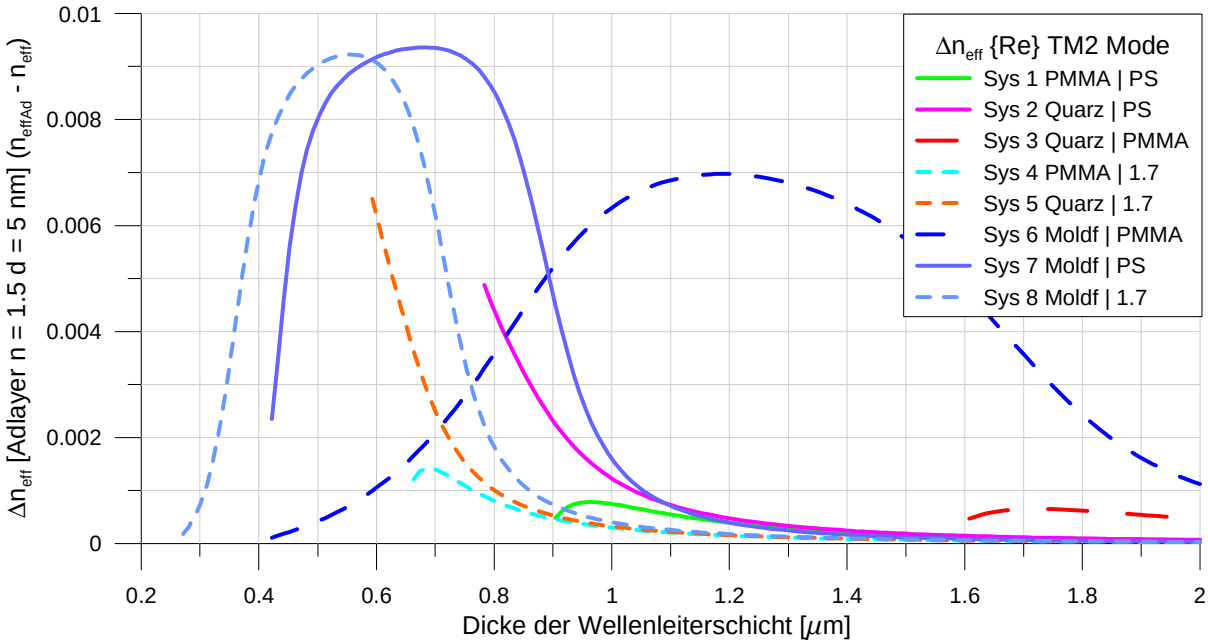

Abb. 38: Empfindlichkeit aller Systeme für die TM2-Mode bei variabler Wellenleiterdicke.

Die Kurven der Empfindlichkeit Δn_{eff} für die 2. Hybridmode (TM2) ist für alle Systeme in Abb. 38 dargestellt. Hier zeigt sich dasselbe Verhalten wie bei der TM1-Mode. Die symmetrischen Systeme weisen die höchsten Δn_{eff} Werte auf und die Systeme mit Quarzsubstrat haben ihr Maximum im Cutoff der Moden. Im Vergleich zu Abb. 37 sieht man, dass sich das Maximum von System 6 bei relativ dicken Wellenleitern befindet, weil durch die geringe Brechzahldifferenz zwischen Substrat und Wellenleiterschicht die 2. Wellenleitermode erst bei einem relativ dicken Wellenleiter anschwingen kann.
Es hat sich in den Abb. 35 bis 36 gezeigt, dass die Hybridmoden bei symmetrienahen Systemen mit hoch brechenden Wellenleitern die größte Empfindlichkeit Δn_{eff} haben. Der Einfluss der Symmetrie vom Substrat zu Deckmedium ist größer als der Einfluss der Brechzahldifferenz zwischen Substrat und Wellenleiter. Bei kleiner Brechzahldifferenz zwischen Substrat und Wellenleiter bilden sich anlog zu Wellenleitersystemen ohne Goldschicht die höheren Moden erst bei relativen dicken Wellenleitern aus.
Auf Grund der hohen Empfindlichkeit des symmetrischen Schichtsystems wird im folgenden Abschnitt ein Schichtsystem aus Moldflon, PS-Wellenleiter mit 50nm Goldschicht und Wasser als Deckmedium näher untersucht.

3.4 Symmetrische Schichtsysteme

Symmetrische Systeme sind Systeme, bei denen der Substrat-Brechungsindex n_{Sub} dem Brechungsindex des Deckmediums n_D entspricht. In symmetrienahen Systemen, bei denen nur eine kleine Abweichung zwischen den Brechungsindizes vorliegt, zeigen die Moden nahezu das gleiche Verhalten wie in streng symmetrischen Systemen (siehe 2.5.5).
Im Gegensatz zu unsymmetrischen Systemen, bei denen das Leck-Oberflächenplasmon unterhalb des Wellenleiter-Cutoffs liegt, liegt es bei symmetrienahen Systemen im Bereich der geführten Wellenleitermoden (siehe Abb. 39).

Ein Substratmaterial zur Herstellung eines symmetrienahen Schichtsystems mit Wasser als Deckmedium ist Moldflon. Es ein fluriertes Thermoplast das unter dem Markenname Moldfon von der Firma Ering Klinger vertrieben wird. Aus Messungen ergab sich ein Brechungsindex von n=1.31 bei L=632.8 nm. Die optische Transparenz des Materials ist sehr strak vom Herstellungsprozess und der Lieferform abhängig. Ein weiteres niedrig brechendes Material, das für diesen Anwendungsbereich geeignet ist, ist Teflon AF [22].

3.4.1 System 7 Moldflon-PS-Sensor

Das Schichtsystem 7 besteht aus Moldflon, PS-Wellenleiter, 50 nm Gold und Wasser. Es ist ein symmetrienahes System

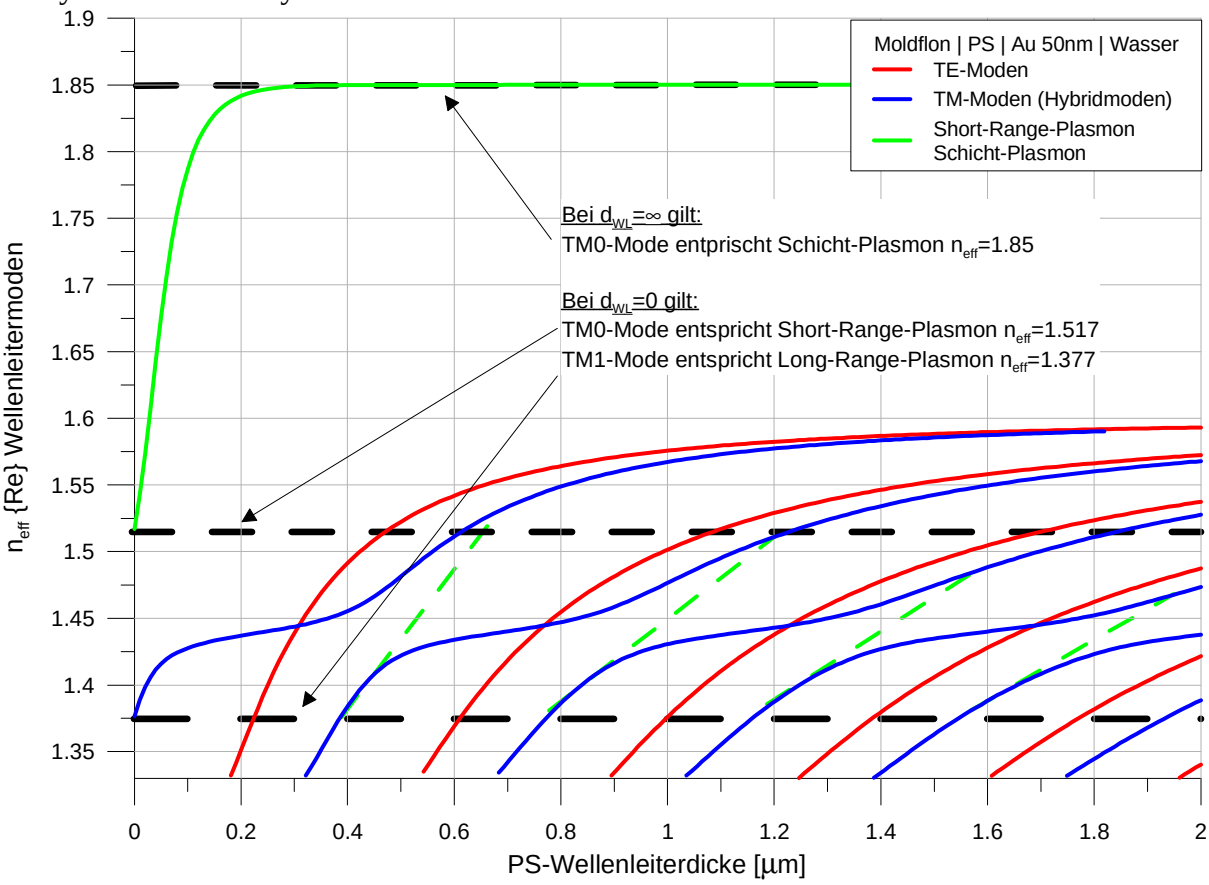

Abb. 39: Modenkarte für Moldflon | PS | Au (50nm) | Wasser bei Variation der Wellenleiterdicke; reines Oberflächenplasmon (grün), TE-Moden (rot); TM-Moden (blau).

In der Modenkarte in Abb. 39 kann man erkennen, dass der Bereich hoher Kopplung, der bei System 1 und 2 unterhalb des Cutoffs lag, nun im Bereich der geführten Wellenleitermoden liegt, da Substratbrechungsindex in diesem Schichtsystem wesentlich kleiner ist.
Bei der Wellenleiterdicke d_{WL}=0 liegt ein reines symmetrienahes Schichtsystem vor. Hier können das Short-Range-Plasmon (n_{eff} =1.517, TM0) und das Long-Range-Plasmon (n_{eff} = 1.3767), anschwingen. Bei zunehmender Wellenleiterdicke geht das Short-Range-Plasmon in ein Schicht-Oberflächenplasmon, bei dem sich der Hauptfeldanteil zur Seite des höheren Brechungsindex verschoben hat, über. Das Long-Range-Plasmon (TM1) geht mit steigender Wellenleiterdicke in eine gekoppelte Plasmonen-Wellenleiter-Mode, eine Hybridmode, über. In der Abb. 39 wurden gestrichelte grüne Linien eingezeichnet, die den Verlauf der Wellenleitermoden ohne Kopplung andeuten. Hybridmoden TM *n* koppeln in diesem System beim Entstehen zuerst an die *n-1*.-Wellenleitermode. Mit steigender Wellenleiterdicke geht die Mode

von einer Kopplung mit der *n-1*.-Wellenleitermode in eine Mode mit kopplung zur *n*.-Wellenleitermode über. Die Kopplung zum Plasmon bleibt dabei erhalten.
Das Schicht-Oberflächenplasmon (grün) verhält sich im symmetrienahen System mit Wellenleiter wie im unsymmetrischen System mit Wellenleiter.

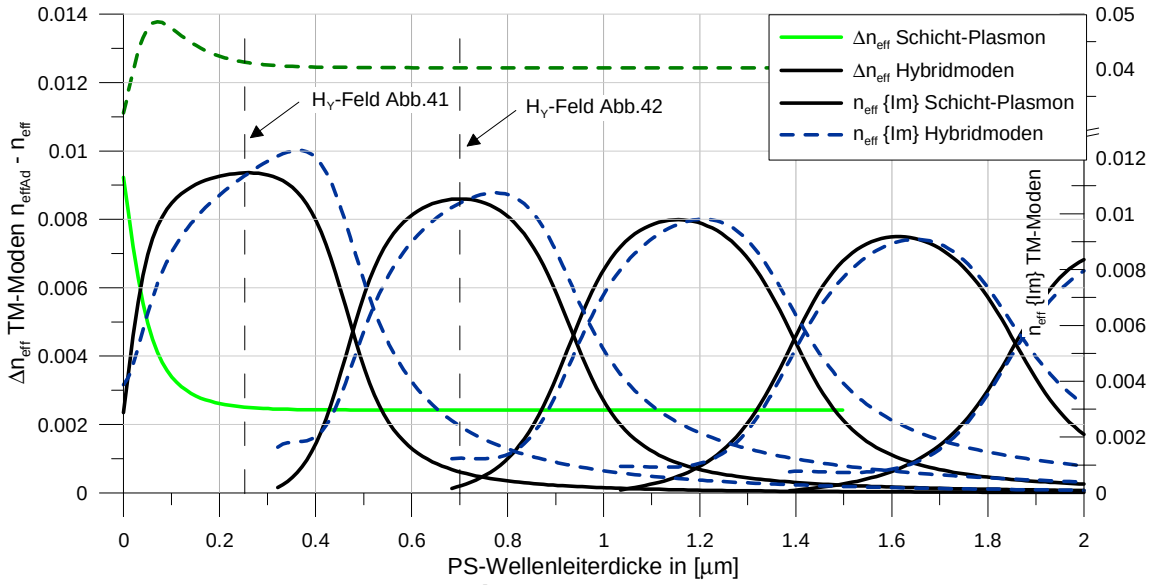

Abb. 40: Darstellung der Empfindlichkeit Δn_{eff} und n_{eff} {Im} für das symmetrienahe System 7

In dem Diagramm Abb. 40 ist die Empfindlichkeit Δn_{eff} und der Imaginärteil der Moden zusammen dargestellt. Man sieht, dass die Empfindlichkeit bei d_{WL}=0 für das Short-Range-Plasmon größer ist als für das Long-Range-Plasmon. Bei wachsender Wellenleiterdicke steigt Δn_{eff} der 1. Hybridmode bis auf das Niveau des Short-Range-Plasmons bei d_{WL}=0 an. Die Hybridmoden mit steigender Ordnung haben im Maximum jeweils einen etwas kleineren Wert, da sie einen höheren Anteil am Gesamtfeld aufweisen.

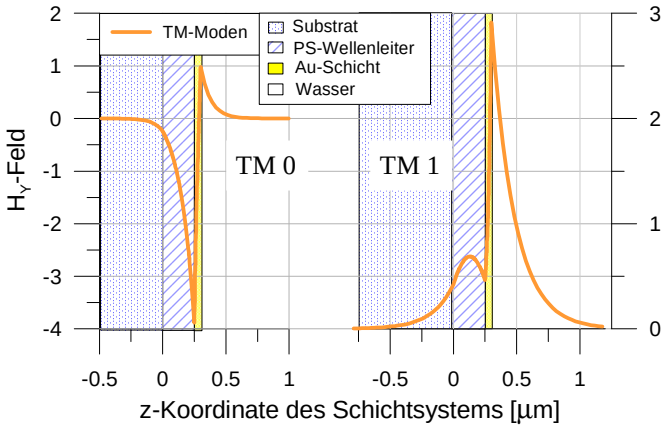

Abb. 41: H_Y -Feld der TM-Moden in System 7 bei d_{WL}=250nm.

Im System 7 können sich bei einer Wellenleiterdicke von 250nm zwei Moden ausbilden (Abb. 41). Die TM0-Mode (links) geht aus dem Short-Range-Plasmon hervor. Man kann erkennen, dass der Großteil des evaneszenten Feldes im Bereich des Wellenleiters liegt. Dies bestätigt die Annahme, dass bei dicken Wellenleiterschichten die TM0-Mode nicht mehr stark vom Substrat beeinflusst wird. In der Felddarstellung der TM1-Mode (rechts) sieht man, dass das Feld im Wellenleiter keine vollständige Wellenleitermode ist. Diese Mode wird nur eine geführte Mode, da die Strahlung des Plasmons in der Wellenleiterschicht geführt wird. (siehe Abb. 43)

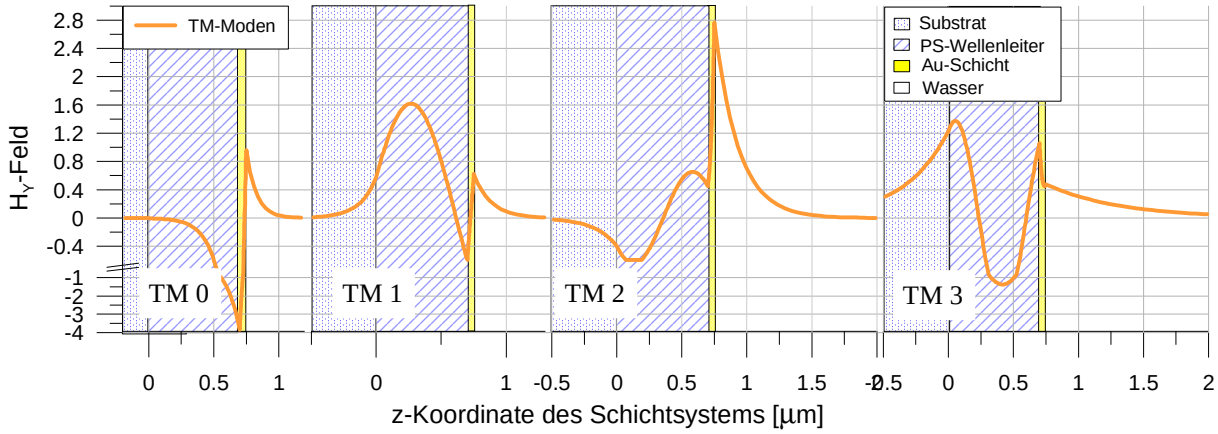

Abb. 42: H_Y -Feld der TM-Moden in System 7 bei d_{WL}=700nm.

Bei der Wellenleiterdicke von d_{WL}=700nm im System 7 können sich vier TM-Moden ausbilden. Die TM0 Mode entspricht dem reinen Oberflächenplasmon. Die TM-1 Mode ist eine Hybridmode bei der die erste Wellenleitermode an das Plasmon koppelt. Bei der TM2-Mode schwingt die zweite Wellenleitermode nicht vollständig an und koppelt mit dem Plasmon. Diese Mode weist die größte Empfindlichkeit Δn_{eff} für diese Schichtkonfiguration auf. Die TM3-Mode liegt sehr nahe am Cutoff. Der effektive Brechungsindex der Mode ($n_{TM3,S7,d700}$=1.342) liegt nahe am Brechungsindex des Deckmediums (n_D=1.33), dadurch fällt das evaneszente Feld sehr langsam ab. (Erklärung bei Abb. 20)
Bei den Hybridmoden, die unterhalb der TE-Moden liegen, bilden sich die Wellenleitermoden nicht komplett aus (siehe Abb. 41 TM0 und Abb. 42 TM1). Hier handelt es sich nicht um Wellenleitermoden im eigentlichen Sinne, sondern um die geführte Strahlung des Plasmons. In Abb. 43 sind zwei Feldverteilungen, die auf das Feldmaxima an der Gold-Wasser-Grenzfläche normiert sind, dargestellt. Die eine TM1-Mode wurde für System 7 mit Wellenleiterdicke d_{WL}=250nm errechnet, die anderen TM1-Mode wurde in System 7 mit $d_{WL}\rightarrow\infty$ errechnet. Hierzu wurde das Substrat in der Simulation auf den Brechungsindex des PS-Wellenleiters gesetzt.

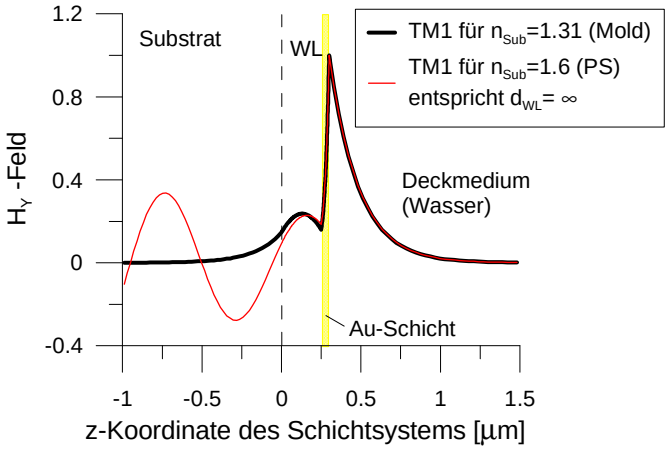

Abb. 43: Normiertes H_Y -Feld der der TM1-Moden in System 7 bei d_{WL}=250nm (schwarz) und $d_{WL}=\infty$ (rot).

In Abb. 43 ist die TM 1 Mode bei der Wellenleiterdicke von d_{WL}=250nm und bei $d_{WL}=\infty$ dargestellt. Das Feldmaximum an der Gold-Wasser-Grenzfläche wurde zum direkten Vergleich der evaneszenten Felder auf 1 normiert. Man kann erkennen, dass das evaneszente Feld der beiden Moden im Deckmedium deckungsgleich ist. Die TM1 Mode bei $d_{WL}=\infty$ strahlt auf der Substratseite. Bei der Mode bei d_{WL}=250nm bildet sich die Wellenleitermode nicht vollständig aus. Der sich ausbildende Teil ist die Strahlung des Plasmons. Durch das Schichtsystem kann dieser, wie man in der Abb. 43 sieht, in der Wellenleiterschicht geführt werden.

3.5 Zusammenfassung der Simulationen

Die Simulationen mit der angelagerten Adlayerschicht haben gezeigt, dass der Einfluss des Substratbrechungsindex auf die Sensitivität wesentlich höher ist als der Einfluss des Wellenleitermaterials. So entscheidet der Substratbrechungsindex des Schichtsystems darüber, ob die geführten Hybridmoden im Bereich des Long-Range-Plasmons bzw. des Leck-Plasmons bei n_{eff} =1.44 liegt. Weiter hat sich gezeigt, dass dort, wo der Imaginärteil der Moden ein Maximum aufweist, auch die Sensitivität hoch ist. Dieser Bereich liegt, je nach Schichtsystem, nahe oder genau am Cutoff der Moden. Mit zunehmender Wellenleiterdicke steigt der n_{eff} der Moden an. Dabei nimmt die Kopplung mit der Plasmonen-Mode immer weiter ab, je weiter sich n_{eff} der Hybridmode von dem Bereich um n_{eff} =1.44 entfernt. Durch die Kopplung mit dem Plasmon können auch Moden anschwingen, bei denen sich die Wellenleitermoden nicht voll ausbilden. Hierbei handelt es sich um strahlende Plasmonen, bei denen die Strahlung in der Wellenleiterschicht geführt wird. Es hat sich auch gezeigt, dass je näher der n_{eff} der Moden am Brechungsindex des Deckmediums liegt, umso tiefer ragt das evaneszete Feld in das Deckmedium.

4. Technologien

Dieses Kapitel gibt einen Überblick über die verwendeten Verfahren und Prozesse, die zur Realisierung des Sensors angewandt wurden. So soll zu Beginn des Kapitels die Funktionsweise des Profil-Messgerätes erklärt werden, das bei der Herstellung zur Schichtdickenbestimmung verwendet worden ist. Weiter soll auf die einzelnen Prozessschritte (Tabelle 2) des Sensors eingegangen werden. Der Messaufbau, auf dem der Sensor vermessen wurde, wird unter Punkt 4.6 beschrieben.

Tabelle 2: Prozessschritte zur Herstellung des Sensors auf PMMA

Nr.	Prozess
1	Reinigung des PMMA – Substrates
2	Polystyrol-spincoaten
3	Heißprägen des Gitters
4	Aufdampfen der Goldschicht

Die Prozessschritte 1 bis 3 wurden in einer Flowbox durchgeführt. Danach wurden die Sensoren in einer geschlossenen Box zum Aufdampfen gebracht. Es wurde versucht, die Verunreinigungen durch Partikel aus der Raumluft möglichst klein zu halten.

4.1 Profil-Messgerät

Zur Vermessung der Schichtdicke der aufgeschleuderten Schichten wurde das Profil-Messgerät TENCOR® P-10 SURFACE PROFILER der Firma KLA TENCOR verwendet. Das Gerät hat eine vertikale Auflösung von wenigen Nanometern. Die horizontale Auflösung liegt im Mikrometer Bereich und hängt vom Radius und von der Form der Messspitze ab.
Das Gerät arbeitet im Kontaktmodus. Dabei fährt eine dünne Messspitze die Oberfläche ab und zeichnet das Oberflächenprofil auf. Auf dem PC kann man die Messdaten bearbeiten und dabei den Horizont der Messkurven für die Schichtstruktur einstellen. Bei dieser Arbeit wurden die Funktionen zum Vermessenen der Struktur und die Statistikfunktion zur Bestimmung der Rauigkeit der Oberfläche verwendet.

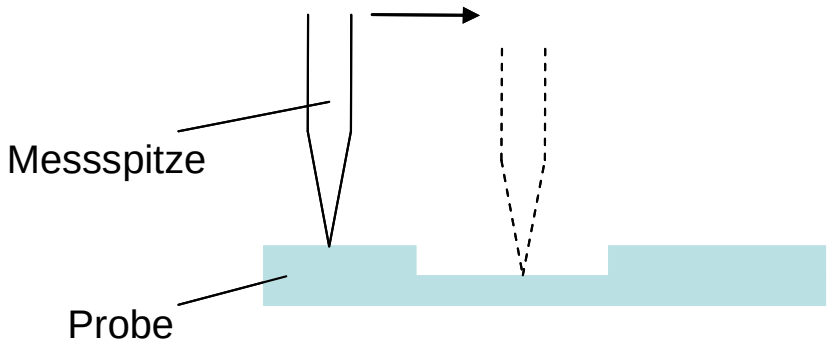

Abb. 44: Schema eines Profilmessgerätes.

4.2 Reinigung der PMMA-Substrate

Die PMMA-Substrate haben eine Größe von 25 x 25 mm. Bevor die Substrate beschichtet werden, müssen sie von Staub und anderen Verunreinigungen befreit werden. Es hat sich dabei herausgestellt, dass das einfache Reinigen mit Ethanol ausgereicht. Das Substrat wurde mittels einer Pipette mit Ethanol benetzt und mit einem optischen Tuch abgewischt. Dabei wurde darauf geachtet, dass kein Ethanol zurückbleibt. Bei PMMA kann Ethanol in Verbindung mit äußerer mechanischer Belastung zu Spannungsrisskorrosion führen. Dies trat bei einigen Proben auf, als diese in der Prägeapparatur eingespannt waren. Nachdem darauf geachtet wurde, dass beim Einspannen kein Ethanol mehr auf dem Substrat war, gab es mit der Spannungsrisskorrosion keine Probleme mehr.

4.3 Spincoaten von Polystyrol PS

Nach der Reinigung wird der PS-Wellenleiter mittels spincoaten aufgebracht. PS-Schichten wurden ausgewählt, da sie ohne größeren Aufwand sehr gut herstellbar sind.
Beim Spincoaten wird flüssige Polymerlösung auf ein Substrat getropft und dann durch schnelle Rotation (2000-4000 1/min) des Substrates gleichmäßig über die Oberfläche verteilt. Das Lösungsmittel verdampft dabei und die Polymerschicht bleibt zurück. Über die Drehzahl oder über die Stoffkonzentration im Lösungsmittel kann die Schichtdicke variiert werden. Dieser Zusammenhang wurde für verschiedene Polymerlösungen von Jochen Ziegler in seiner Dissertation [23] beschrieben.
Zum Testen des Sensorsystems wurden Polystyrol-Wellenleiter mit einer Dicke von 500 bis 1500 nm verwendet. Um diese Schichtdicke zu erreichen wurden verschiedene Polystyrollösungen hergestellt (Tabelle 3) und deren Dickenabhängigkeit von der Drehzahl bestimmt (Abb. 45).
Die Polystyrol-Lösungen wurden hergestellt indem Polystyrolfeststoff in Toluol aufgelöst wurde. Das als Lösungsmittel verwendete Toluol verdampft beim späteren Spincoten.
Um die Massekonzentration der Lösung berechnen zu können wurden beide Materialien auf einer Feinwaage genau eingewogen. Für einige Lösungen wurde Polystyrolgranulat verwendet. Da sich das Granulat im Toluol schlechter als das Pulver löst, wurde die Mischung mit einem Magnetrührer zwischen 20 bis 40 min lang geführt. Danach wurde die Lösung mit einem 0.45 µm Spritzenfilter filtriert, um die ungelösten Rückstände zu entfernen.

Tabelle 3: Verwendete Polystyrollösungen.

	PSI	PSII	PSIII	PSIV	PSV
				für 500 nm	für 1000 nm
Polystyrol	0,5207 g	0,7015 g	0,6993 g	0,7063 g	1,0965 g
Toloul	5,654 g	10,0413 g	10,1041 g	9,9906 g	8,9102 g
Summe	6,1747 g	10,7446 g	10,8234 g	10,6969 g	10,0065 g
Gew.%	8,43 %	6,53 %	6,46 %	6,6 %	10,96%

Die Lösungen PSI und PSII wurden aus Polystrolpulver mit einem Molgewicht von 161.000 g/mol und die Lösungen PSIII - V aus Polystyrolgranulat mit einer Molmasse von 280.000 g/mol hergestellt.
Um die Schichtdickenabhängigkeit zu bestimmen, wurden PS-Schichten bei verschiedenen Drehzahlen auf Glassubstrate aufgebracht. Danach wurden die Proben mit einem spitzen Messer oder einer Kanüle geritzt. Es wurde nur die Polystyrolschicht an dieser Stelle abgetragen.

Auf Grund der höheren Härte des Glases wurde der Untergrund nicht beschädigt. So entstand eine Vertiefung, die mit dem Profil-Messgerät vermessen werden konnte.

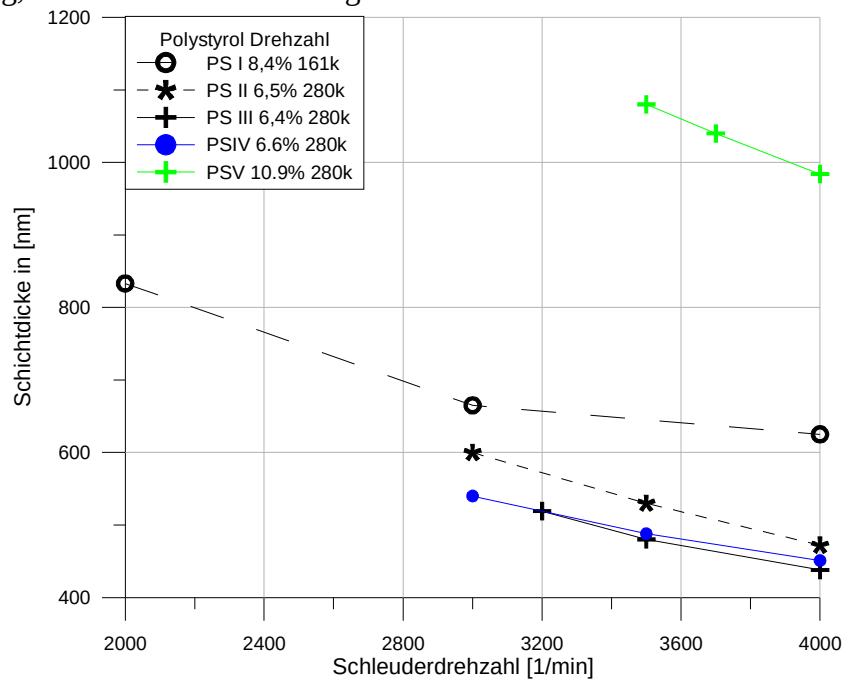

Abb. 45: Diagramm Polystyrol-Schichtdicke in Abhängigkeit der Drehzahl.

Im Diagramm Abb. 45 ist die Dickenverteilung der PS-Schichten in Abhängigkeit der Drehzahl dargestellt. Man kann erkennen, dass die Schichtdicke bei einer Lösung nur im Bereich von wenigen hundert Nanometern variiert. Um ausreichend glatte und homogene Schichten zu bekommen soll die Beschichtung der Substrate im Drehzahlbereich von 3000–4000 1/min erfolgen. Deshalb wurden zwei verschiedene Lösungen verwendet. Für 500 nm Schichten die PSIV-Lösung und für 1000 nm Schichten die PSV-Lösung.

Beim Arbeiten mit den Lösungen stellte sich heraus, dass das Lösungsmittel mit der Zeit ausdampft. Dadurch nimmt die Polystyrolkonzentration in den Lösungen zu. Man erhält mit derselben Lösung bei derselben Drehzahl ein paar Tage später eine dickere Schicht. Für die Charakterisierung des Sensors ist es wichtig, die Schichtdicke des Wellenleiters genau zu kennen. Es wurde daher vor jeder Präperation von Wellenleiterschichten die Drehzahl für die gewünschte Dicke neu ermittelt.

Ein weiterer wichtiger Parameter der Wellenleiterschicht ist die Rauigkeit. Der grundsätzliche Zusammenhang zwischen Rauigkeit und Polystyrolkonzentration sowie Schleuderdrehzahl wurde in der Dissertation von Jochen Ziegler [23] untersucht. Für die Proben wurde die Rauigkeit R_a für das PMMA-Substrat sowie für das Substrat mit geprägter Wellenleiterschicht untersucht.

Tabelle 4: Rauigkeitswerte von PS V.

	Umdrehung	Mittlerer R_a
gereinigtes Substrat	-	4,2
PMMA mit PSIV	3000 1/min	1,8
	3500 1/min	2.2
	4000 1/min	2.3

Zur Bestimmung der Rauigkeitswerte aus Tabelle 4 wurde die Oberfläche mit einer Geschwindigkeit von 50 µm/s auf einer Länge von 500 µm vermessen. Das Profilmessgerät er-

rechnete aus dem Oberflächenprofil den R_a-Wert. Es wurden mehrere Messungen auf den Proben durchgeführt und daraus der Mittelwert gebildet.
Aus den Werten kann man ablesen, dass die Wellenleiterschicht eine geringere Rauigkeit aufweist als das Substrat, auf dem sie aufgebracht wurde. Da das Polystyrol flüssig aufgebracht wird, kann es kleine Unebenheiten ausgleichen.
Die so hergestellten Polystyrolschichten weisen eine ausreichend geringe Rauigkeit auf, um sie für die Wellenleiter-Experimente verwenden zu können.

4.4 Heißprägen von Gitterstrukturen

Der nächste Prozessschritt ist das Heißprägen der Gitter in die Polystyrolschicht. Dafür wird ein am Institut gebautes Heißprägegerät verwendet. Mit diesem Gerät können Gitter von einer Masterstruktur in beliebige thermoplastische Polymersubstrate oder Polymerschichtsysteme übertragen werden.
Vor dem Prägen wird die Masterstruktur auf der Heizplatte über die Glasübergangstemperatur T_G des Polymers erhitzt. Das Substrat wird in die Prägemasse eingelegt und mit kleinen Schrauben befestigt. Wenn der Master die Prägetemperatur erreicht hat, wird die Prägemasse mit dem Substrat auf den Master gepresst. (Abb. 46) Der Anpressdruck entsteht nur über die Gewichtskraft der Prägemasse. Nach Ablauf der Prägezeit kann die Prägemasse zum Abkühlen über der Heizplatte mit der Feststellschraube fixiert werden. In der Regel klebt die Masterstruktur nach dem Anheben noch am Substrat fest. Sie kühlt dann zusammen mit dem Substrat über der Heizplatte ab. Beim Abkühlen löst sie sich auf Grund der Schwerkraft von selbst ab.
Die Prägezeiten und Temperaturen hängen von den verwendeten Materialien ab. Auf jeden Fall muss die Prägetemperatur über der T_G Temperatur der Polymere liegen, damit diese sich bleibend verformen. Der verwendete Heiztisch kann bis zu einer Temperatur von 300° C betrieben werden.

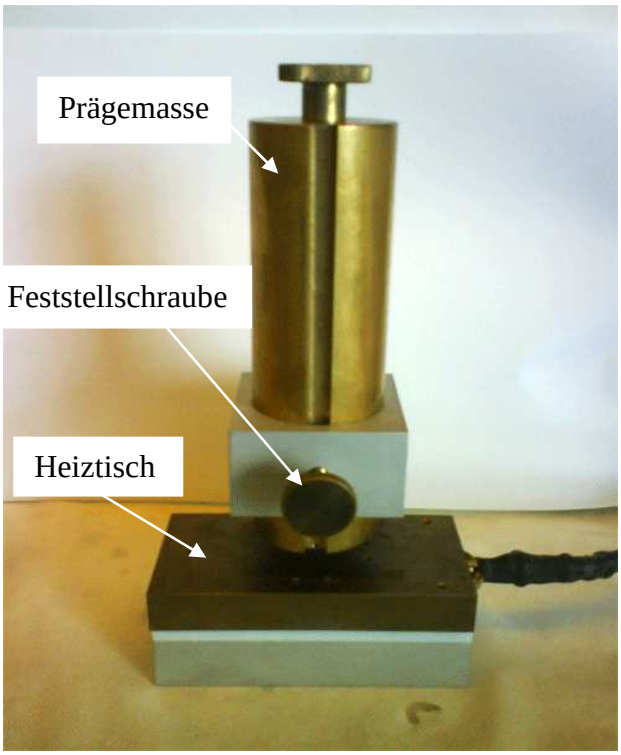

Abb. 46: Prägegerät mit Heiztisch.

Als Masterstrukturen zum Prägen wurde auf verschiedene Gitter auf Glassubstraten, einem Siliziumwafer und auf zwei abgeformte Nickel-Master zurückgegriffen. Die Glas- und Silizium-Master wurden im Institut mittels optischer Holographie auf einer Positivresistschicht strukturiert und in einer reaktiven Ionen-Ätz-Anlage RIE geätzt. Die Herstellung der Masterstrukturen für das Prägen wird in den Arbeiten von Marc Hamdorf [24] und Amal Kasry [25] ausführlich beschrieben.
Bei dieser Arbeit hat sich gezeigt, dass die Masterstruktur aus Silizium auf Grund der hohen Härte wesentlich unempfindlicher und einfacher zu handhaben ist als Master auf Nickel- oder Glassubstraten.

4.4.1 Silanisieren der Masterstruktur

Damit sich die Masterstruktur nach dem Prägen gut vom Substrat ablöst, sollte sie vorher silanisiert werden. Ohne diesen Schritt klebt der Master sehr stark an den Substraten und kann nur sehr schwer wieder abgelöst werden. Dabei wird das Substrat beschädigt oder die Wellenleiterschicht löst sich komplett ab und verbleibt auf dem Master.
Alle Masterstrukturen wurden aus der Gasphase silanisiert. Hierzu werden sie nach dem Reinigen zusammen mit einer kleinen Menge Dimethyldichlorosilan DMDS in ein geschlossenes Gefäß gegeben. Beim Erhitzen des Gefäßes verdampft das DMDS und schlägt sich beim Abkühlen an allen Oberflächen nieder. Das Gefäß wird in einen vorgeheizten Ofen bei 80 °C gegeben. Nach 30 Minuten sollte das gesamte DMDS verdampft sein. Beim Abkühlen schlägt es sich auf allen Oberflächen nieder und bildet eine Silanschicht. Das Glasgefäß muss im warmen Zustand im Abzug geöffnet werden. Da normalerweise mehr Silan auf der Oberfläche abgeschieden als für die Silanschichtbildung benötigt wird, muss der so entstandene schmierige Film entfernt werden.
Durch diese Silanschicht wird die Oberfläche hydrophob, dabei vermindert sich auch die Haftung beim Prägen. Die Silanschicht kann man mittels Kontaktwinkelmessung mit Wasser nachweisen. Der Kontaktwinkel sollte zwischen 98° und 110° liegen.

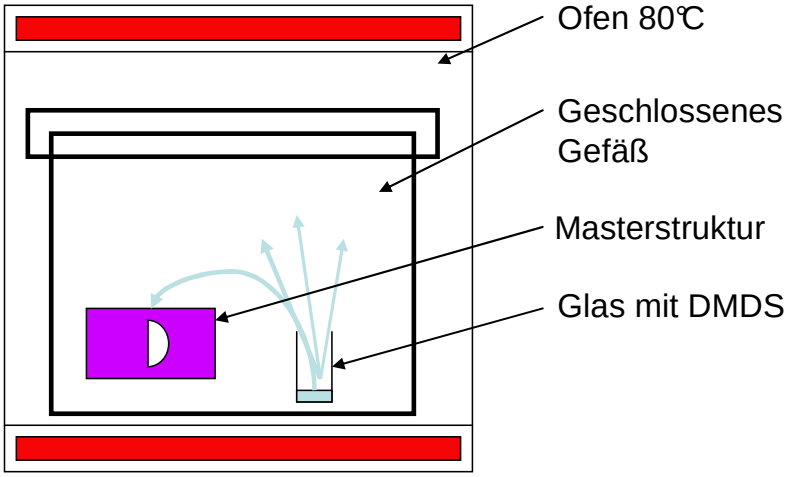

Abb. 47: Aufbau zum Silanisieren der Masterstruktur.

4.4.2 Prägen der Gitter auf Polymersubstrate

Um Partikel zwischen Stempel und Substrat zu vermeiden, wurde der Prägeprozess in der Flowbox durchgeführt. Die Gitteramplitude der Masterstruktur liegt je nach Master zwischen 20 nm und 100 nm. Partikel aus der Raumluft und Staubkörner sind wesentlich größer als die zu übertragende Struktur. So müssen Substrat und Stempel vor dem Prägen gut gereinigt werden.
Die Masterstruktur wird mit Ethanol und Toluol gereinigt um Polymerrückstände von vorherigen Prägeversuchen zu entfernen. Die Substrate wurden mit einem optischen Tuch und Ethanol abgewischt.
Bei dieser Arbeit hat sich gezeigt, dass das Substrat lokal aufschmilzt und das Gitter nur in diesen Bereichen abgeformt wird. Es wurden verschiedene Prägezeiten und Prägetemperaturen getestet um den Einfluss auf die Größe und die Form des aufschmelzenden Bereiches zu bestimmen. Es konnten keine schlüssigen Zusammenhänge der veränderten Parameter zu dem Prägeergebnis nachgewiesen werden. Da einige Proben nicht an der Stelle des Gitters aufschmolzen, konnten diese für weitere Experimente nicht benutzt werden. Durch Messung des Oberflächenprofils wurde festgestellt, dass die nicht aufgeschmolzenen Bereiche ca. 5-6 µm tiefer liegen.
Bei höheren Temperaturen (180°C) schmilzt das Substrat stärker auf. Jedoch entstehen beim Abkühlen Blasen und das Substrat ist nicht mehr plan. Die besten Prägeergebnisse wurden bei 140°C und 40 Sekunden Prägezeit oder 180°C und 13 bis 15 Sekunden Prägezeit erreicht.
Die Masterstruktur wird nach dem Prägen nicht sofort vom Substrat entfernt, sondern es wurde abgewartet, bis diese sich von selbst löst. Dies erfolgte beim Abkühlen nach 10 bis 15 Sekunden. Wenn sich so Substrat und Master formschlüssig abkühlen, erhält man eine bessere Qualität des Gitters, als dies beim sofortigen mechanischen Entfernen der Masterstruktur erreicht wird.
Da nicht nur die Gitterstruktur sondern auch alle Kratzer und Unebenheiten der Masterstruktur mit auf das Substrat übertragen wurden, entsprach die Rauigkeit weitgehend der gestempelten Oberfläche der Masterstruktur. Auf Grund der höheren Härte des Silizium Stempels wies dieser weniger Kratzer auf und lieferte so bessere Ergebnisse und eine kleinere Rauigkeit in Bereich des Gitters.

4.4.3 Prägen der Gitter auf Polymersubstrate mit PS-Wellenleiter

Zur Herstellung des Sensors war es notwendig, das Gitter nicht in das Substrat, sondern in den Wellenleiter zu prägen. Als Wellenleiter wurde Polystyrol verwendet, das nahezu die gleiche Glasübergangstemperatur T_G von 100°C hat wie das Substratmaterial PMMA. Dadurch war es möglich, beim Prägen das Substrat mit dem Wellenleiter d = 500 - 1500 nm aufzuschmelzen. Es zeigte sich durch Vermessen mit dem Profiler, dass die Wellenleiterschicht nach dem Prägen im Bereich des Gitters noch vorhanden war. Die Dicke der Wellenleiterschicht blieb durch das Prägen und dem damit verbundenen Aufschmelzen soweit unverändert. Die verwendeten Parameter für das Prägen für PMMA mit PS entsprachen denen des Prägens von reinem PMMA.
Beim Prägen in die PS-Schicht fiel auf, dass sich bei höheren Temperaturen weniger Blasen bildeten als bei reinem PMMA.

Um die Qualität des geprägten Gitters im Vergleich zur Masterstruktur zu ermitteln, wurden einige Proben mit dem Atomic-Force-Microscope (AFM) untersucht.

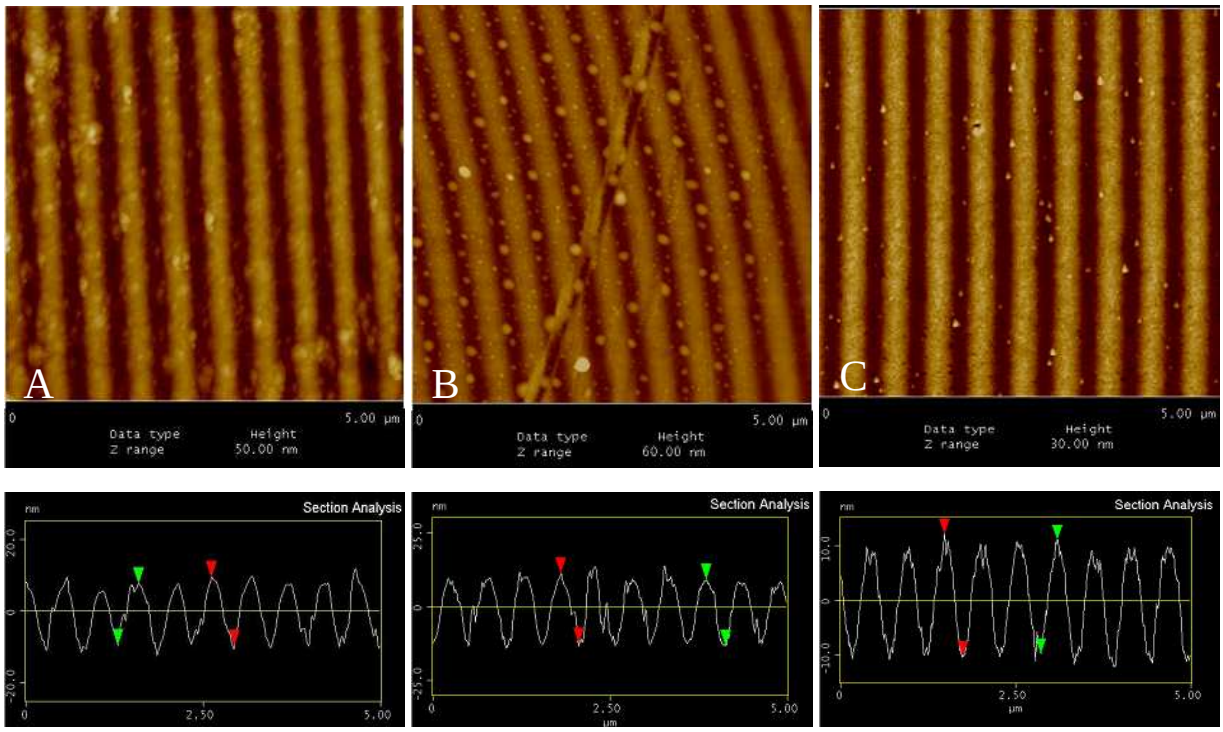

Abb. 48: AFM Aufnahmen Topographie und Schnitt der Masterstruktur (A), PMMA+PS (B) und PMMA+PS+AU 50nm (C) geprägter Proben.

Im Abb. 48 sind die AFM-Aufnahmen von der Masterstruktur (A), einem geprägten Sensor sowie ein Sensor (B) und ein Sensor mit aufgedampfter Goldschicht (C) dargestellt. Die Struktur wurde durch das Prägen nahezu vollständig übertragen. Das Profil der geprägten Proben entspricht dem der Masterstruktur. Die Gitteramplitude der Masterstruktur beträgt ca.10 nm.

4.4.4 Prägen der Gitter auf Glassubstrate mit PS-Wellenleiter

Im Rahmen dieser Arbeiten wurde auch versucht, Gitter in Polystyrolwellenleiter, die auf Glassubstraten aufgebracht waren, zu prägen. Dies war mit dem vorher beschriebenen Vorgang nicht ohne weiteres möglich. Eine Schwierigkeit war, dass das Substrat nicht mit der Wellenleiterschicht aufschmelzen kann, da die Glastemperatur des Glassubstrates im Vergleich zum Polymerfilm sehr hoch liegt. Da die Gitter in der Masterstruktur tiefer liegen als die Masteroberfläche, muss das aufgeschmolzene Material zuerst den Zwischenraum füllen, bevor das Gitter übertragen werden kann. Weiter haben die Glassubstrate eine andere Form und Dicke und konnten deshalb nicht in der bisher verwendete Prägemasse befestigt werden.

Um dennoch Gitter in einen Polystyrolfilm auf einem Glassubstrat zu prägen, wurde der Prägeprozess etwas modifiziert.
Um einen besseren Kontakt des Masters mit der Wellenleiterschicht zu ermöglichen, wurde die Masterstruktur so zurechtgeschnitten, dass nur noch das Gitter übrig blieb. Da man die Substrate nicht in der Prägemasse einspannen konnte, wurden sie mit dem Polymerwellenleiter auf der Heizpatte zusammen mit der Masterstruktur erhitzt. Nach ca. 3 min wurde die Masterstruktur mit der Pinzette auf das Substrat gelegt und die Prägemasse aufgesetzt. Nach 10 min Prägezeit wurde das Ganze von der Heizplatte genommen, um abzukühlen. Die Masterstruktur lies sich danach meist einfach entfernen.

Der so modifizierte Prozess ermöglichte es, mit dem vorhandenen Prägegerät Gitter auch in Polymerfilme auf Glassubstraten zu prägen. Die Methode ist jedoch noch nicht ausgereift. Um reproduzierbare und gute Gitter zu bekommen müsste die Apparatur und der Prozess noch weiterentwickelt werden.
Mit den geprägten Gittern auf PS-Glas-Substraten wurden nur wenige Experimente durchgeführt. Sie wurden nur am Rande verfolgt und deshalb im Experimentalteil dieser Arbeit nicht behandelt.

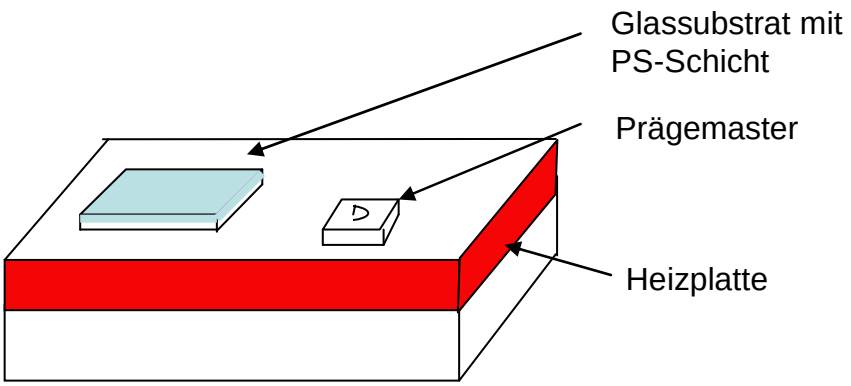

Abb. 49: Erhitzen von Substrat und Prägemaster auf der Heizplatte.

4.5 Aufdampfen der Goldschicht

Nach dem Prägen der Gitterstruktur auf den Sensor wird als letztes noch eine Goldschicht aufgedampft. Hierfür wurde die thermischen Verdampferanlage FL 400 der Firma Edwards benutzt.
Um eine Goldschicht aufzudampfen, wird die Anlage mit den Proben und dem Verdampfungsmaterial auf einen Druck von ca. $5*10^{-6}$ mbar evakuiert. Damit die gewünschte Schichtdicke richtig angezeigt wird, muss vor dem Aufdampfen ein materialabhängiger Faktor (Tooling-Faktor) eingestellt werden. Sobald der Druck erreicht ist, kann die Stromversorgung für die Verdampfereinheit eingeschaltet und der Strom langsam hochgefahren werden. Der Strom fließt durch ein Wolframschiffchen mit Goldgranulat. Das Schiffchen erhitzt dabei das Gold bis es aufschmilzt und dann siedet. Der Golddampf steigt nach oben und schlägt sich auf den Substraten nieder. Über den Schwingquarz kann der Abscheideprozess überwacht werden. Die Aufdampfrate wird über den Stromfluss durch das Wolframschiffchen kontrolliert und in der Regel auf ein bis zwei Nanometer pro Sekunde eingestellt. Nach Erreichen der gewünschten Schichtdicke wird der Strom abgeschaltet. Die Substrate sollen, bevor die Anlage belüftet wird und die Proben entnommen werden, ca. 5 bis 10 min abkühlen.
Die für den Sensor erzeugten Goldschichten waren 50 nm dick.
Man kann auch vor dem Aufdampfen der Goldschicht eine 1-5 nm dicke Chromschicht als Haftvermittler aufdampfen. Da die Goldschichten keinen größeren Beanspruchungen ausgesetzt waren, konnte bei diesen meinen Versuchen auf den Haftvermittler verzichtet werden.

4.6 Optischer Messplatz

Der optische Messplatz auf dem alle Messungen zur Charakterisierung der Schichtsysteme durchgeführt wurde, hat Paul Block im Rahmen seiner Diplomarbeit [26] aufgebaut. Er konstruierte einen speziellen Probenhalter, bei dem man Proben mit Prismenanregung und Gitteranregung ohne größere Umbauten auf demselben Messaufbau vermessen kann. Es können Winkelspektren der Reflexion mit dem Halter für Gitter und Prismenanregung aufgenommen werden, indem der Detektor über den Winkel mitgeführt wird (siehe 4.6.1). Im äußeren Rahmen der Halterung sind Laserdioden integriert. Mit ihnen kann die Intensität des Lichtes an der Probenstirnfläche über den Winkel aufgenommen werden. (siehe 4.6.2). In beide Halter können Flüssigkeitszellen eingelegt werden. Von den Zellen gibt es verschiedene Ausführungen, die je nach Anwendung auszuwählen sind. So stehen transparente Flüssigkeitszellen aus Glas und PMMA sowie nicht transparente Zellen aus Edelstahl und schwarzem PMMA zur Verfügung.
Für diese Experimente wurde der Gitterhalter mit einer Edelstahl - Flüssigkeitszelle verwendet. Die Edelstahlzelle ermöglichte auf Grund ihrer chemischen Beständigkeit das Verwenden von reinem Ethanol als Deckmedium.

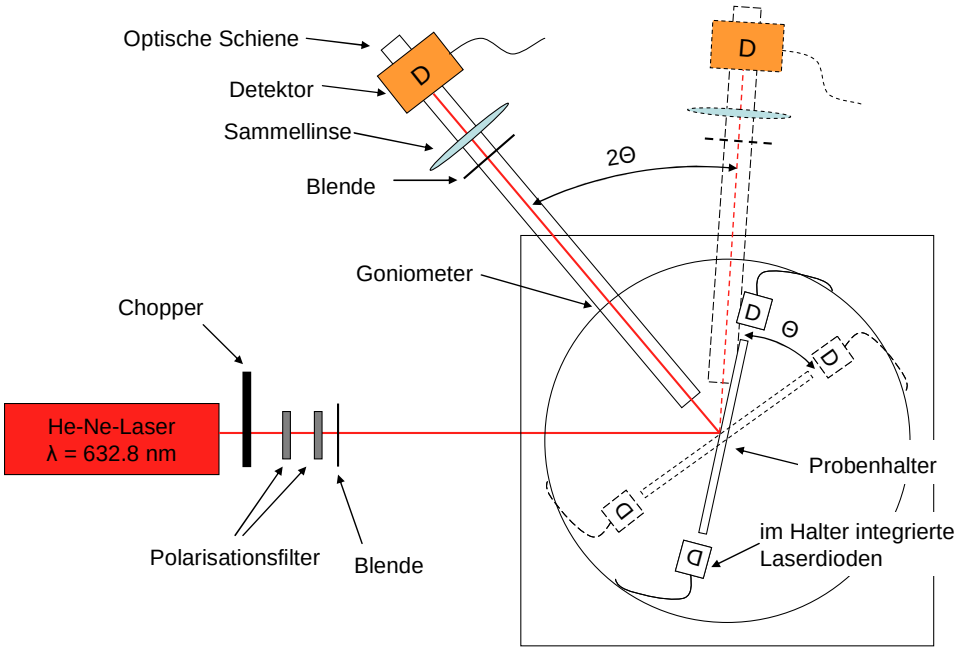

Abb. 50: Schema des Optischen Messaufbaus.

In Abb. 50 ist der verwendete optische Messaufbau schematisch dargestellt. Der optische Messaufbau besteht aus einem Helium-Neon-Laser mit einer Wellenlänge von $\lambda = 632.8$ nm. Nach dem Laser sind ein Chopper, zwei Polarisationsfilter und eine Blende angeordnet. Der Probenhalter ist auf dem zweiten Kreis eines Zweikreisgoniometers befestigt. Der reflektierte Strahl fällt durch die Blende und einer Sammellinse auf die Laserdiode. Beide sind zusammen auf einer optischen Schiene auf dem ersten Kreis des Goniometers befestigt (siehe Abb. 50). Durch Verfahren der beiden Goniometer kann die Intensität des reflektierten Laserstrahls unter verschiedenen Winkeln aufgenommen werden.
Der Chopper nach dem Laser ist notwendig, um das Lasersignal am Detektor mit einem Lock-In-Verstärker zu detektieren. Mit den zwei Polarisationsfiltern kann man die Intensität und die Polarisation des einfallenden Laserstrahls einstellen. Durch die Goniometer kann sich die Probe im Laserstrahl drehen und so verschiedene Einstrahlwinkel erreichen. Zum Justieren des

Drehpunktes der Probe ist der Halter auf einem x-y-Verstelltisch montiert. Der reflektierte Strahl wird durch eine Sammellinse auf den Detektor fokussiert. Das Signal der Laserdiode wird über einen Lock-In-Verstärker erfasst und mit einem PC softwareseitig gespeichert. Die Schrittmotoren der Goniometer erlauben eine maximale Winkelauflösung von 0.001°. Über die Software können verschiedene Intervalle mit jeweils unterschiedlichen Winkelauflösungen eingestellt werden. Beim Durchführen der Messungen ist darauf zu achten, dass man die Winkelschritte in den zu untersuchenden Winkelbereichen klein genug wählt. Das Scannen von großen Winkelbereichen mit sehr hoher Auflösung ist sehr zeitintensiv, da die Aufnahme eines Messwertes an einer Winkelposition je nach Einstellung zwischen 0.3 – 0.5 Sekunden benötigt.

4.6.1 Messung des Winkelspektrums der Reflexion

Das Messen des Winkelspektrums der Reflexion einer Probe ist ein weit verbreitetes Verfahren. Die Messung kann für die verschiedensten Anwendungen benutzt werden. Man kann den Brewsterwinkel von Materialien bestimmen. Sie wird im Bereich der Plasmonen-Resonanz-Spektroskopie mit ATR-Konfiguration eingesetzt. Für diese Arbeit wurden die anregbaren Hybrid- und Plasmonenmoden der einzelnen Schichtsysteme aus dem Winkelspektrum bei verschiedenen Deckmedien bestimmt.

Bei der Reflexionsmessung wird das Winkelspektrum des reflektierten Laserstrahls aufgenommen. Die angeregten Plasmonen, Wellenleiter oder Hybridmoden sieht man als Minima in der Messekurve. Wellenleiter- und Hybridmoden weisen dabei wesentlich schmälere Minima auf als Plasmonen (siehe 5.3).
Als Nullwinkel wird bei der Reflexionsmessung mit dem Gitterhalter derjenige Winkel benutzt, bei dem die Reflexion des Laserstrahls von der Probe genau wieder in den Laser bzw. auf die Blende vor dem Laser zurückfällt. Die Einstellgenauigkeit liegt hierbei bei ca. 0.1 bis 0.05°. Die Winkelauflösung des Goniometers ist 0.001°. Für die Messung wurde ein Parameter Verändert, dies ist in der Regel die Eigenschaften des Deckmediums. Dabei wird ein Winkelspektrum vor und nach der Parameteränderung, ohne die Probe zu entfernen oder deren Position im Laserstrahl zu verändern, aufgenommen. Diese Messungen können miteinander verglichen werden. Die Ergebnisse werden meist mit $\Delta\Theta$ oder Δn_{eff} angegeben. Absolute Winkel oder n_{eff} sind aufgrund der äußeren Einflussfaktoren schwer zu ermitteln. Es wurden zur Bestimmung der Winkeländerung nur Vergleichsmessungen bei Änderung des Deckmediums durchgeführt. Für die Bestimmung des absoluten Winkels (Brewster) wurde eine Messreihe aufgenommen und diese statistisch ausgewertet. Für eine Fehlerabschätzung mit Einbeziehung der äußeren Einflussfaktoren habe ich auch einige Versuche gemacht. Es hat sich dabei herausgestellt, dass das Entnehmen und wieder Einsetzen der Probe im Probenhalter zu einer absoluten Winkelverschiebung von bis zu 0.5° führen kann. Wird die Position des Lasers auf der Probe verändert, hat dies meist auch eine Änderung des absoluten Winkels zur Folge. Der Einfluss der äußeren Faktoren systematisch zu beschreiben oder vorherzusagen war mir nicht möglich.

4.6.2 Endfire - Messung

Zur Charakterisierung der hergestellten Wellenleiter werden diese auf einem Messplatz für Wellenleitermodenspektroskopie mit Endfire-Messung ausgemessen.
Bei der Endfire - Messung wird ein Laserstrahl unter variablem Winkel Θ auf die Probe gelenkt und die Intensität des in den Wellenleiter eingekoppelten Lichtes an den Stirnflächen der Probe gemessen. Dabei werden die Winkel bestimmt, unter denen sich die Moden anregen lassen. Die Moden erscheinen in der Messkurve als scharfe Maxima. Das Anregen der Moden kann über ein Prisma oder wie in diesem Fall durch ein Gitter erfolgen.

Bei der Endfire-Messung haben, wie bei der Messung in Reflexion, die äußeren Bedingungen einen Einfluss auf die absoluten Winkel der Moden. Deshalb werden analog zur Reflexionsmessung nur Differenzmessungen durchgeführt. Es wurde darauf geachtet, dass sich die äußeren Parameter wie Temperatur und Position des Lasers auf der Probe nicht verändern.
Falls die Anregung der Moden mittels symmetrischer Gitter erfolgt, kann das genaue Einstellen des Nullwinkels dadurch vermieden werden, dass man die Koppelwinkel der Moden im positiven und negativen Winkelbereich misst. Bei der Auswertung wurde dann der Nullwinkel als die Hälfte des Winkels zwischen -1. und +1. Mode benutzt.
Bei Wellenleiter mit zwei verschiedenen Moden kann mit zwei ausgemessenen Koppelwinkeln die Dicke und der Brechungsindex der Wellenleiterschicht bestimmt werden. Dazu müssen die Brechungsindizes des Substrates und des Umgebungsmediums bekannt sein (siehe 5.1.3).

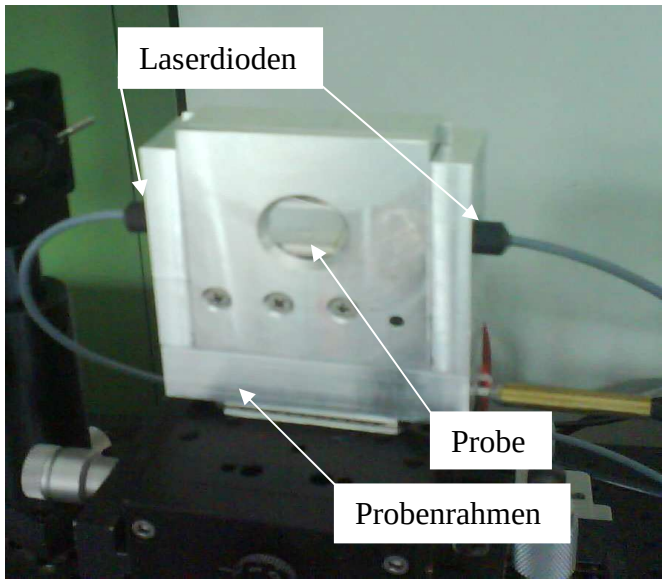

Abb. 51: Probenhalter mit integrierten Laserdioden.

Die Laserdioden zum Erfassen der Intensität an der Stirnfläche der Wellenleiterschicht ist in den äußeren Rahmen des Halters integriert (siehe Abb. 51). Dies ermöglicht das Wechseln der Proben ohne Veränderung der Position der Laserdioden.

5. Messungen

5.1 Bestimmung verschiedener Materialkonstanten

Bei den Simulationen in Kapitel 3 wurden für die Simulierten Materialien Literaturwerte verwendet. Um die Experimente möglichst genau auszuwerten war es notwendig die optischen Eigenschaften der eingesetzten Materialien naher zu bestimmen.

5.1.1 Bestimmung der Gitterparameter

Für die Auswertung der Messungen war es notwendig, die Gitterparameter zu kennen. So wurden die Masterstrukturen und die geprägten Gitter charakterisiert. Der wichtigste Parameter war die Gitterkonstante, da diese einen direkten Einfluss auf die Position der Moden hat. Um das geeignete Modell zur Berechnung der Gitterkopplung verwenden zu können, wurde auch die Gitteramplitude und die Form des Gitters ermittelt.

Da die Gitterkonstante kleiner ist als die Wellenlänge des Lasers wurde die Gitterkonstante über das Ausmessen der +1 und -1 Beugungsordnung in Littrow-Anordnung ermittelt.

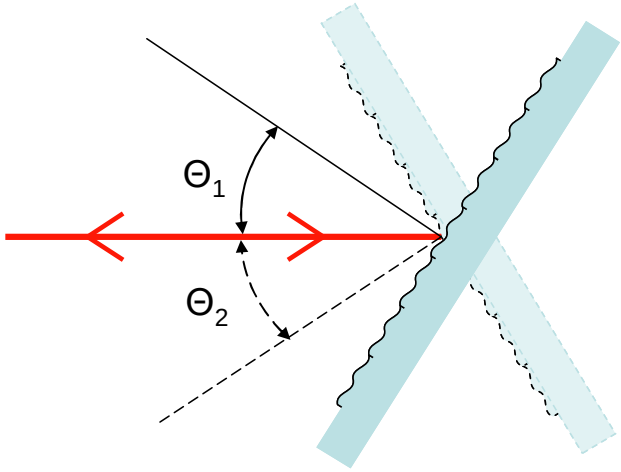

Abb. 52: Reflexionsgitter in Littrow - Anordnung.

Zum Ausmessen der Winkel der Beugungsordnungen wurde erst der Nullwinkel der Probe, einfallender Strahl gleich Reflexion der 0.-Beugungsordnung, eingestellt. Dann wurde die Probe soweit gedreht, dass jeweils die +1. und -1.-Beugungsordnung mit dem einfallenden Strahl übereinstimmte. Die so ermittelten Winkel wurden gemittelt und über die Gitterglei-chung (5.1) konnte die Gitterkonstante errechnet werden.

$$2 * \sin\Theta = m\frac{\lambda}{g} \qquad (5.1)$$

Die Winkel wurden mit dem unter Punkt 4.6 beschrieben optischen Messaufbau ausgemessen. Dabei wurden für die mit Gold bedampften Sensoren folgende Winkel ermittelt:

$$\Theta_1 = 38.23°$$
$$\Theta_2 = 38.26°$$

Dies ergibt mit Umstellen der Gleichung 5.1 folgende Gitterkonstanten.

$$g_1 = 511.3 \text{ nm}$$
$$g_2 = 510.97 \text{ nm}$$

Bei weiteren Messungen wurden dieselben Gitterkonstanten ermittelt. Somit wurde für die Auswertung eine Gitterkonstante von 511 nm benutzt.

$$\overline{g} = 511 nm$$

Um die Form und die Gitteramplitude der geprägten Gitter zu ermitteln, wurden diese mit aufgedampfter Goldschicht mit einem AFM vermessen.

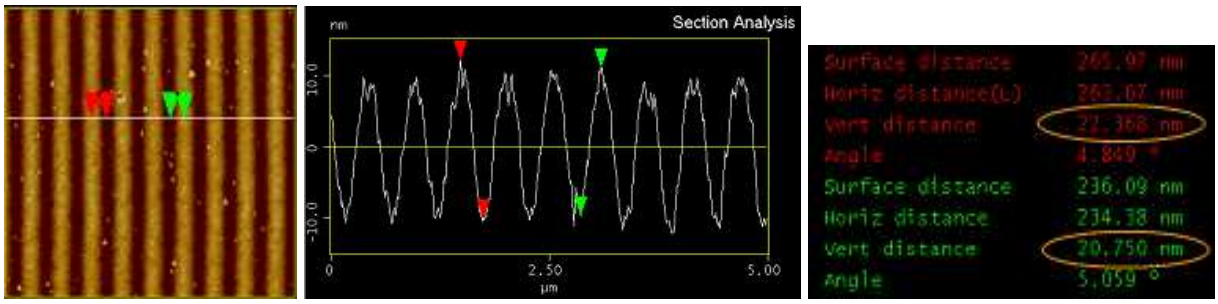

Abb. 53: AFM Topographie eines geprägten Gitters auf 1000nm PS auf PMMA mit 50nm Au aufgedampft.

In der AFM-Aufnahme Abb. 53 links sind auf der Topographie-Darstellung der Sensoroberfläche kleine weiße Punkte zu sehen. Es handelt sich um kleine Schmutzpartikel, die sich nach der Herstellung aus der Luft auf der Oberfläche angelagert haben. Aus dem Schnitt in der Mitte kann man sehen, dass die Gitter symmetrisch sind. Die genauen Werte der Gitteramplitude, die links dargestellt sind, gelten nur an diesem gemessenen Ausschnitt. Gemittelt über die ganze Fläche wurde die Gitteramplitude mit 10 nm angenommen. Es ist theoretisch auch möglich, die Gitterkostante aus den gemessenen Gitterbereichen zu ermitteln. Jedoch ist der Wert schwer bestimmbar, da er von der Position und Richtung der Linie in der Topographie abhängt. So ergibt eine kleine Veränderung der Richtung der Linie eine andere Gitterkonstante. Dieser Wert wurde deshalb über die Beugung bestimmt.

5.1.2 Bestimmung des Substrat-Brechungsindex

Um den Brechungsindex für die PMMA-Substrate zu bestimmen, wurde der Brewsterwinkel ausgemessen. Hierzu wird ein Winkelspektrum der reflektierten Intensität aufgenommen. Die einfallende Lichtwelle ist TM polarisiert.

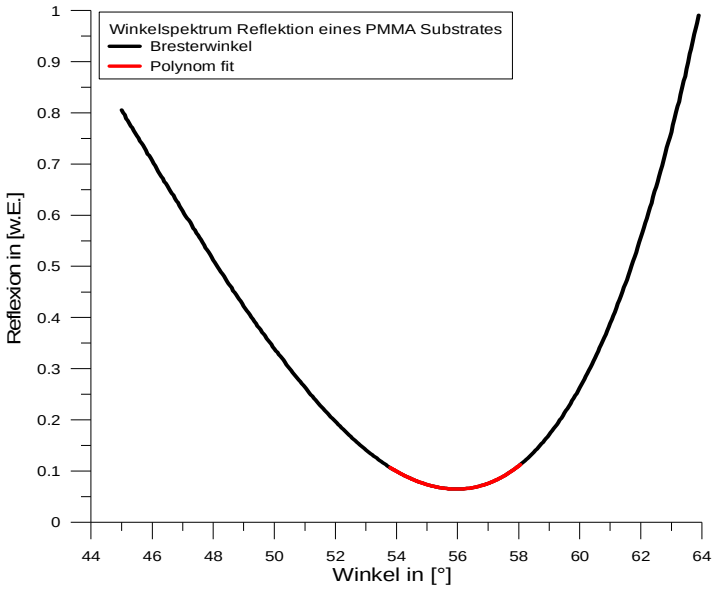

Abb. 54: Winkelspektrum der Reflexion (TM) eines PMMA Substrates.

Die Winkelspektren zur Messung des Brewsterwinkels wurden nur im Bereich von 45° bis 64° gemessen. Dabei wurde der Wert der Reflexion so eingestellt, dass sich die Reflexion im zu messendem Winkelbereich zwischen 0 und 1 bewegt.
Das typische Winkelspektrum (Abb. 54) weist ein Minimum auf, das dem Brewsterwinkel entspricht. Da das Minimum sehr flach ist, wurden die Messkurven mit einem Polynom gefittet und das Minimum der Fitkurve verwendet. Aus der Formel 5.2 kann der Substratbrechungsindex berechnet werden.
Bei den Messungen hat sich gezeigt, dass verschiedene Proben und Positionen leicht verschiedene Minima ergeben. Insgesamt wurde von 10 verschiedenen PMMA-Substraten der Brewsterwinkel bestimmt und daraus jeweils der Brechungsindex errechnet.

Tabelle 5: Brewsterwinkel der PMMA-Substrate.

	Fit 1	Fit 2	Fit 3	Fit 4	Fit 5	Fit 6	Fit 7	Fit 8	Fit 9	Fit 10
Θ[°]	55.971	55.968	56.000	56.018	56.016	56.008	55.978	55.987	55.989	56.068
n	1.4809	1.4808	1.4826	1.4836	1.4835	1.4830	1.4814	1.4819	1.4820	1.4864

Formel zur Berechnung: $$n_{Sub} = \tan\Theta \qquad (5.2)$$

Mittelwert der Winkel: $\Theta = 56°$

Mittelwert der Brechungsindizes $\underline{n = 1.4826 \pm 0.001}$

Bei allen weiteren Auswertungen wurde der so ermittelte Brechungsindex benutzt.

5.1.3 Bestimmung des Wellenleiter-Brechungsindex

Den Brechungsindex der Wellenleiterschichten wurde durch Wellenleitermoden Spektroskopie [34] bestimmt. Um eine bessere Sicherheit des Wertes zu bekommen wurden vier gleiche Sensoren mit Polystyrol–Wellenleiterschicht hergestellt und jeweils die Dicke und den Brechungsindex bestimmt. Dabei wurde der optische Messaufbau, der in 4.6 beschrieben ist, verwendet. Es wurde der Brechungsindex der Wellenleiterschicht nur für TM-polarisiertes Licht bestimmt. Da sich Plasmonen nur mit TM-polarisiertem Licht anregen lassen, ist dies ausreichend.
Die Intensität des einfallenden Lichtstraths wurde so eingestellt, dass die äußeren Moden ausreichend gut aufgenommen werden konnten. Dadurch ergab sich, da die inneren Moden eine höhere Koppeleffizienz haben, zum Teil Intensitäten über 1.

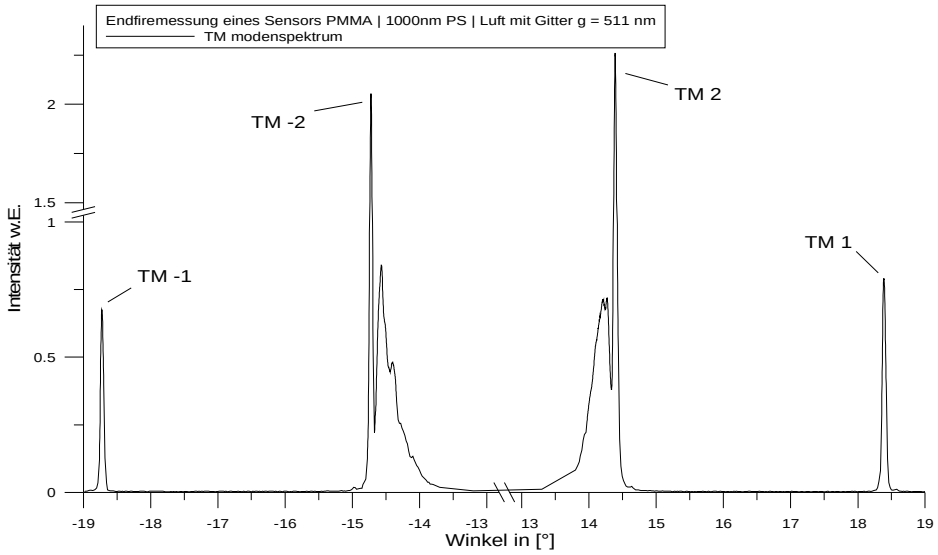

Abb. 55: TM Wellenleiterspektrum zur Bestimmung des PS-Brechungsindex.

Insgesamt wurden 5 Sensoren zur Bestimmung des Brechungsindex hergestellt. Das Modenspektrum in Abb. 55 ist das, des 2. Sensors (WL2). Die Sensoren bestehen aus einer ca. 1000 nm dicken PS-Wellenleiterschicht mit geprägtem Gitter. Diese ist auf ein PMMA-Substrat aufgebracht. In dieser Schichtkonfiguration sind je zwei TM und zwei TE-Wellenleitermoden ausbreitungsfähig. Es wurde bei den Messungen jedoch nur die TM-Moden angeregt. Der untere Cut-Off für Wellenleitermoden liegt bei 14,6°, deshalb sind die breiten Maxima neben den TM2-Moden keine Wellenleitermoden sondern Substratmoden. Der Übersichtlichkeit wegen wurde die x-Achse von –13° bis +13° und die y-Achse von 1 – 1.5 ausgeblendet.
Die Laserdioden im positiven und im negativen Winkelbereich haben jeweils einen eigenen einstellbaren Vorverstärker. Für die Auswertung ist nur die Position der Moden wichtig. Es wurde auf die aufwendige Kalibrierung, auf dieselbe Verstärkung der beiden Laserdioden, verzichtet. Dadurch wiesen die Modenpeaks systembedingt eine unterschiedliche Höhe im positiven und negativen Winkelbereich auf.
Nach dem Ausmessen der Winkelspektren wurden alle Moden jeweils einzeln mit Polynomen gefittet und die Maxima der gefitteten Kurven bestimmt (Tabelle 6).

Tabelle 6: Gefittete Modenwinkel aus dem Winkelspektrum in Abb. 54.

Moden Nr.	TM-1	TM-2	TM2	TM1
Winkel (abs) [°]	-18.723	-14.721	14.390	18.387

In Tabelle 6 sind die gefitteten Absolutwinkel des gemessenen Winkelspektrums dargestellt. Es wurde nun der Mittelwert des Winkels aus dem positiven und dem negativen Winkel einer

Mode gebildet. Durch diesen Schritt sind die neuen Winkel um den Winkel Null symmetrisch. Mit diesen Winkeln kann mit der Formel 5.3 der effektive Brechungsindex der angeregten Moden errechnet werden (Tabelle 7).

$$n_{eff} = \sin\Theta + \frac{\lambda}{g} \qquad (5.3)$$

Tabelle 7: n_{eff} der TM-Moden aus Abb. 54.

Moden Nr.	TM1	TM2
Winkel [°]	18.5551	14.5556
Winkel [rad]	0.3238	0.2540
neff	1.5566	1.4897

Nach dem Berechnen der effektiven Brechungsindizes wird die Schichtdicke und der Schichtbrechungsindex mit dem Programm Multiwave ermittelt. Das Programm benötigt die effektiven Brechungsindizes der Wellenleitermoden eines Winkelspektrums sowie die anderen Schichtparameter (Substrat und Deckmediums-Brechungsindex) des ausgemessenen Sensors. Mit Hilfe der eingegebenen Daten errechnet das Programm mit dem Transfer-Matrix-Algorithmus eine Dicken-Brechungsindex-Abhängigkeit (Abb. 56).

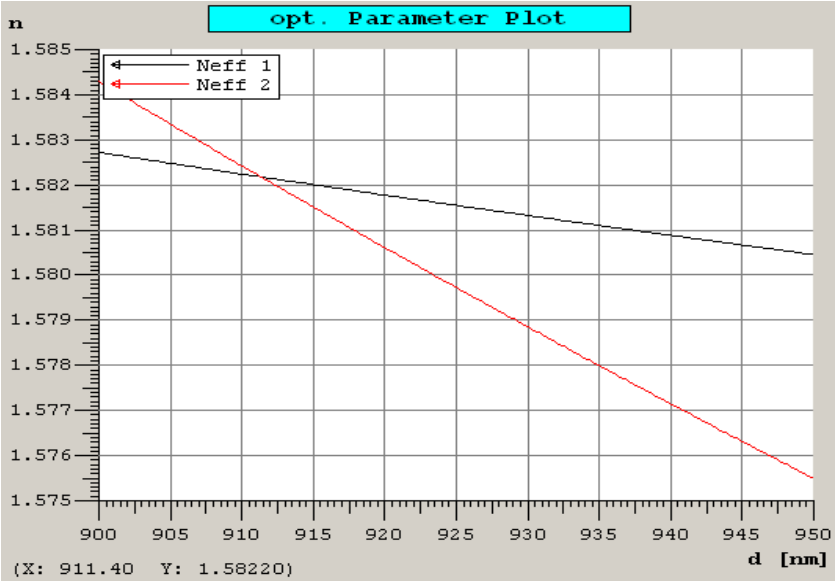

Abb. 56: Dicken Brechungsindex-Abhängigkeit in Multiwave.

Es wurden so die Brechungsindizes für 4 Sensoren ermittelt.

Tabelle 8: Brechungsindizes der 4 gemessenen Sensoren.

Sensor	WL1	WL2	WL3	WL5
neff TM 1	1.5560	1.5566	1.5575	1.5577
neff TM 2	1.4914	1.4897	1.4901	1.4910
n WL	1.5801	1.5882	1.5832	1.5830

Das TM Spektrum des Sensors mit der Bezeichnung WL 4 wurde nicht für die Auswertung in Tabelle 8 verwendet.

Mittelwert der PS-Brechungsindizes: $\underline{n = 1.5836}$

Der so ermittelte Brechungsindex wird für alle weiteren Auswertungen benutzt. Er ist identisch mit dem Brechungsindex, der in der Veröffentlichung von W.M. Prest [27] für PS mit einem Molgewicht von 280.000 g/mol beschrieben wurde.

5.2 Asymmetrisches Schichtsystem

Für die Experimente wurden Sensoren aus PMMA | PS | Au, dem Primärschichtsystem, gebaut. Auf ein PMMA-Substrat wurde ein PS-Wellenleiterfilm aufgebracht und ein Gitter mittels Heißprägemethode in den Wellenleiter geprägt. Weiter wurde eine dünne Goldschicht aufgedampft. Die einzelnen Herstellungsschritte sind im Technologieteil beschrieben. Der Sensor wurde mit dem oben beschriebenen optischen Messaufbau in Reflexion vermessen. Durch die spezielle Halterung war es möglich den Sensor gegen verschiedene Deckmedien zu messen. Mit dem Helium-Neon-Laser (Wellenlänge 632.8 nm) wurde durch das Substrat eingestrahlt und die Reflexion über den Winkel aufgezeichnet.
Beim Schichtsystem des Sensors handelt es sich mit den verwendeten Deckmedien Wasser und Ethanol um ein unsymmetrisches Schichtsystem. Für Wasser als Deckmedium wurde es allgemein in 3.2.1 simuliert. Die weiteren Simulationen in diesem Teil dienen zur Auswertung der Messergebnisse.

5.2.1 Deckmedium Luft

Die gebauten Sensoren wurden zuerst ohne Deckmedium bzw. mit Luft als Deckmedium vermessen. Für den Sensor 35-1 ist das Winkelspektrum der reflektierten Intensität in Abb. 57 dargestellt.

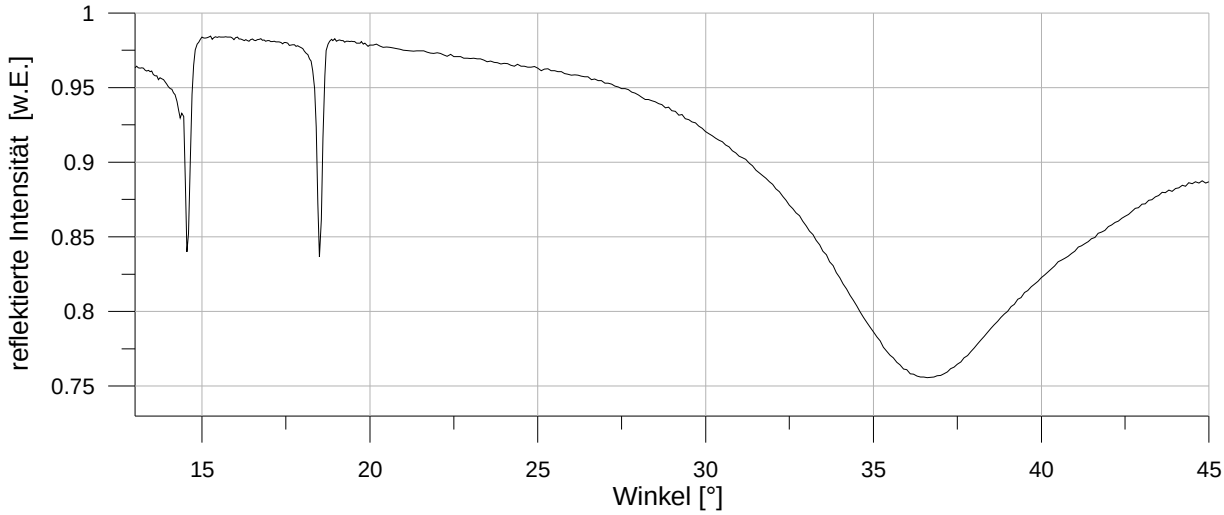

Abb. 57: Winkelspektrum in Reflexion Sensor 35-1. PMMA-Substrat, 1050nm PS-Wellenleiter, 50nm Goldschicht gemessen in Luft; g=511nm, λ=632,8nm.

Das Reflexionsspektrum in Abb. 57 für den Sensor 35-1 weist 3 Minima auf. Die beiden Minima bei kleinen Winkeln sind die 1. und 2. Hybridmode. Das breite Minimum zwischen 35° und 38° ist die Plasmonenmode. Die Messkurve wurde mit einer Auflösung von 0.002° im Bereich der Hybridmoden und mit 0.01° im Bereich der Plasmonenmode aufgenommen. Die Intensität wurde vom Messaufbau mit einer Genauigkeit von $2*10^{-4}$ w.E. aufgenommen. Zur Bestimmung der Minima wurden sie mit Polynomen genähert und die Genauigkeit der Näherung bestimmt. Die Punktzahl der Polynome wurde so gewählt, dass die Polynome im Bereich des Minimums eine Intensitätsauflösung von ca. $1*10^{-5}$ w.E. aufweisen. Die Genauigkeit des Fits, die in den weiteren Tabellen angeben wurden, entspricht dem Winkelschritt der über das Polynom einer Intensitätsänderung von $1*10^{-5}$ w.E. im Minimum der Mode zugeordnet ist. Messfehler wurden in der Fit-Genauigkeit nicht berücksichtigt. Aus den Winkeln wurde der effektive Brechungsindex mit der Gitter-Koppel-Gleichung (2.29) berechnet. Dabei wurde

g=511nm und λ=632.8nm eingesetzt. Die so ermittelten Minima sind in Tabelle 9 dargestellt, hierbei wurde das Schicht-Plasmon mit SP und die Hybridmoden mit H1 und H2 abgekürzt.

Tabelle 9: Werte der Reflexionsmessung.

		Modenwinkel		Genauigkeit	
		[°]	[neff]	[°]	[neff]
Luft	Fit SP	36.6151	1.834793	0.0352	4.93E-04
	Fit H1	18.5057	1.555755	0.0008	1.34E-05
	Fit H2	14.5650	1.489834	0.0014	2.31E-05

Zur weiteren Auswertung wurde das Schichtsystem simuliert, indem die effektiven Indizes der Moden in ATSOS mit den experimentell ermittelten Parametern ausgerechnet wurden. In Tabelle 10 sind die für den Sensor bestimmten Werte und die Werte für die Simulation dargestellt. Die Werte n und k für die Goldschichten wurden nicht experimentell ermittelt. Es wurde hier der Theoriewert verwendet und auf den Sensor angepasst. Bei der Simulation wurden die einzelnen Parameter im Bereich ihrer Toleranz variiert, um größtmögliche Übereinstimmung mit der Messung zu erhalten. Dabei wurde auf die Position und den Abstand der Moden geachtet. Kleine Veränderungen der Größen verschieben die einzelnen Moden unterschiedlich. Auf Grund der Vielzahl der Parameter gibt es zahlreiche Variationsmöglichkeiten. Es konnte nur bis zu einem bestimmten Grad Übereinstimmung erreicht werden.

Tabelle 10: Sensorkennwerte und Simulationsparameter.

Schicht	Sensor	Simulation
PMMA	d_{Sub} = 1.5 mm ± 0.1 mm	d_{Sub} = 5 µm
	n_{Sub} = 1.4826 ± 0.001	n_{Sub} = 1.4826
PS	d_{WL} = 1050 ± 15 nm	d_{WL} = 1062 nm
	n_{WL} = 1.583 ± 0.001	n_{WL} = 1.583
Au	d_{Au} = 50 nm ± 1 nm	d_{Au} = 49.3 nm
	n_{Au} = ? | (Theorie 0.1783)	n_{Au} = 0.1783
	k_{Au} = ? | (Theorie 3.45)	k_{Au} = 3.298

In der Tabelle 10 wurden die Werte in der Spalte Sensor alle experimentell ermittelt. Die Dicke der Wellenleiterschicht wurde mit dem Profilmessgerät ermittelt. Die Goldschichtdicke wurde mit dem Schwingquarz der Aufdampfanlage gemessen, die Genauigkeit wurde abgeschätzt. Für Substrat und Deckmedium wurde eine 5 µm dicke Schicht verwendet. Bei dieser Schichtdicke, fallen die evaneszenten Felder Moden weit vor der äußeren Systemgrenze auf null ab, somit beeinflusst die Begrenzung der Schicht die Moden nicht.
Der Vergleich der ermittelten Messwerte mit den simulierten Werten zeigt, dass die Position der Moden voneinander abweicht. Da alle drei Moden in dieselbe Richtung nahezu gleich weit abweichen, wird für die Messung ein Offset des Nullpunktes angenommen. Die Berechung der Einstellgenauigkeit des Nullpunktes am Messaufbau ergab eine Ungenauigkeit von ca. 0,02°. Um die Messwerte mit dem Offset anzupassen, wurde 0.127° von allen Modenwinkeln abgezogen. Dadurch verringerte sich die Abweichung der Simulation zu den Messwerten um den Faktor 10-50.

Tabelle 11: Vergleich Messung und Simulation bei Luft.

		Modenwinkel [neff]			Genauigkeit des Fit	Differenz Sim - Mess	
		Messung	Simulation				
			ohne off	off -0.127°		ohne off	off -0.127°
Luft	SP	1.83479	1.83677	1.83498	4.93E-04	1.98E-03	1.84E-04
	H1	1.55576	1.55791	1.55580	1.34E-05	2.16E-03	4.00E-05
	H2	1.48983	1.49201	1.48985	2.31E-05	2.18E-03	1.85E-05

Zur näheren Bestimmung der Art der Moden wurde mit Hilfe der Simulationssoftware die Feldverteilungen berechnet und dargestellt. Dabei ist die Schrittweite der x-Achse bei den drei Moden in Abb. 58 gleich groß. Dies gilt auch für alle weiteren Felddarstellungen.

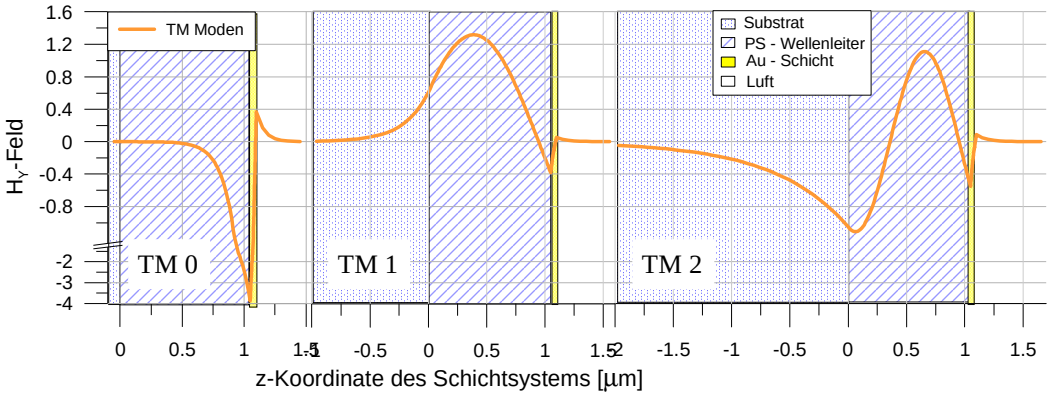

Abb. 58: Feldverteilung der Moden in Luft des Sensors 35-1. Simulationsparameter: λ=632,8nm, Substrat n_S=1.4826, Wellenleiter d_{WL}=1062nm n_{WL}=1.583, Goldschicht d_{Au}=49.3nm n_{AU}=0.1783+i3.298 Deckmedium: Luft n_D=1.

Bei den Darstellungen des transversalen Feldes der Moden in Abb. 58 kann man erkennen, dass die TM0-Mode dem unsymmetrisch gekoppelten Oberflächenplasmon entspricht. Der Hauptteil des Feldes ist an der Substrat Wellenleitergrenzfläche lokalisiert. Die TM1-Mode entspricht der 1. Hybridmode. Das Plasmon an der Goldschicht wird hier im Vergleich zur Wellenleitermode nur schwach angeregt. Bei der TM2-Hybridmode ist das evaneszente Feld der Wellenleitermode im Substrat stark ausgeprägt, da die Mode nahe am unteren Cutoff liegt. Analog zur TM1-Mode wird auch bei der TM2-Mode das Oberflächenplasmon nur schwach angeregt. Auch wenn der Plasmonenanteil nur gering ist, handelt es sich bei TM1 und TM2 um Hybridmoden.

5.2.2 Verhalten bei verschieden Deckmedien

In weiteren Messungen wurden die Sensoren gegen Wasser und Ethanol gemessen. Wasser wurde ausgewählt, da es bei vielen Messverfahren als Deckmedium eingesetzt wird. Um eine Änderung im Deckmedium hervorzurufen, wurde in der Flüssigkeitszelle das Wasser gegen Ethanol ausgetauscht und das Reflexionsspektrum erneut vermessen. Es wurde derselbe Sensor wie bei 5.2.1 verwendet.
Die Reflexionsspektren von den verschiedenen Deckmedien Luft (schwarz), Wasser (blau) und Ethanol (rot) sind in Abb. 59 dargestellt. Man kann erkennen, dass sich die Position des Plasmons stärker verschiebt als die Position der Hybridmoden. Zur besseren Darstellung wurden die Hybridmoden am linken untern Bereich des Diagramms vergrößert.

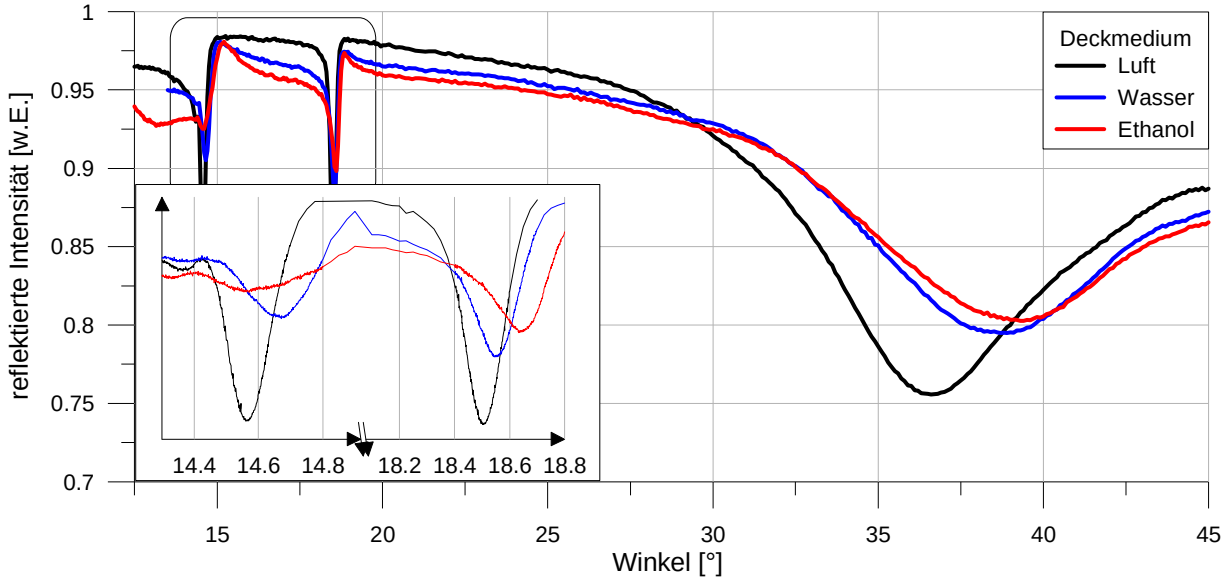

Abb. 59: Messung der reflektierten Intensität Sensor 35-1 bei Luft (schwarz), Wasser (blau) und Ethanol als Deckmedium (rot).

Bei den in Abb. 59 dargestellten Modenspektren bei verschiedenen Deckmedien fällt auf, dass die Minima der Moden bei Wasser und Ethanol schwächer ausgeprägt sind. Dies deutet auf eine Dämpfung der Moden durch das Deckmedium hin. Bei Wasser und Ethanol verschieben sich die TM0 und TM1-Mode jeweils zu größeren Winkeln bzw. effektiven Brechungsindizes. Die 2. Hybridmode verschiebt sich bei der Veränderung des Deckmediums von Luft n=1 zu Wasser n=1.33 zu größeren Winkeln und von Wasser zu Ethanol (n=1.357) wieder zu kleineren Winkeln. Dies widerspricht den Simulationen in 3.2.1 ohne Dämpfung im Deckmedium, deckt sich jedoch mit der Simulation der Auswertung mit Dämpfung.
Zur Bestimmung der Minima wurden die Moden wie unter 5.2.1 mit Polynomen genähert. Die Minima und die Genauigkeit der Näherung sind in Tabelle 12 dargestellt.

Tabelle 12: Moden Minima des Sensors 35-1 bei verschiedenen Deckmedien.

		Modenwinkel		Genauigkeit	
		[°]	[neff]	[°]	[neff]
Luft	Fit SP	36.6151	1.834793	0.0352	4.93E-04
	Fit H1	18.5057	1.555755	0.0008	1.34E-05
	Fit H2	14.5650	1.489834	0.0014	2.31E-05
Wasser	Fit SP	38.6911	1.863477	0.0590	8.03E-04
	Fit H1	18.5529	1.556537	0.0020	3.28E-05
	Fit H2	14.6653	1.491529	0.0015	2.46E-05
Ethanol	Fit SP	39.2670	1.871291	0.0352	4.75E-04
	Fit H1	18.6446	1.558053	0.0032	5.21E-05
	Fit H2	14.5687	1.489898	0.0027	4.61E-05

Da für diese Messungen derselbe Sensor wie bei 5.2.1 verwendet wurde, sind die Schichtparameter für die Simulation die Gleichen. Für Wasser als Deckmedium wurde der Brechungsindex n_W=1.33 mit einer Dämpfung k_W=0.033 eingesetzt. Für Ethanol wurde ein Brechungsindex von n_E=1.357 mit einer Dämpfung k_E=0.033 verwendet. Mit diesen Dämpfungen wurde eine große Übereinstimmung der Moden erreicht.

Tabelle 13: Vergleich Messung und Simulation.

		Modenwinkel [neff]			Genauigkeit des Fit	Differenz Sim - Mess	
		Sim	Messung				
			ohne off	off 0.127°		ohne off	off -0.127°
Luft	SP	1.83677	1.83479	1.83657	4.93E-04	-1.98E-03	-1.98E-04
	H1	1.55791	1.55576	1.55786	1.34E-05	-2.16E-03	-5.65E-05
	H2	1.49201	1.48983	1.49198	2.31E-05	-2.18E-03	-3.54E-05
Wasser	SP	1.86358	1.86348	1.86521	8.03E-04	-9.91E-05	1.63E-03
	H1	1.55862	1.55654	1.55864	3.28E-05	-2.08E-03	2.16E-05
	H2	1.49364	1.49153	1.49367	2.46E-05	-2.11E-03	3.00E-05
Ethanol	SP	1.86850	1.87129	1.87301	4.75E-04	2.79E-03	4.50E-03
	H1	1.55878	1.55805	1.56015	5.21E-05	-7.23E-04	1.38E-03
	H2	1.49133	1.48990	1.49204	4.61E-05	-1.43E-03	7.17E-04

Zwischen den einzelnen Messungen wurde nur das Deckmedium in der Flüssigkeitszelle ausgetauscht, die Position des Sensors blieb unverändert. Bei allen Messungen wurde der Offset von 0.127° auf die Messwerte angerechnet.
Die Abweichung der Moden bei der Messung mit Ethanol als Deckmedium ist etwas größer als bei den mit Luft und Wasser. Es war schwierig, eine hohe Übereinstimmung mit den Messwerten für Ethanol zu finden, da sich bei Veränderung der Dämpfung die Moden in unterschiedliche Richtungen verschieben. In den Simulationen des Schichtsystems werden Abweichungen des Sensors, wie Oberflächenrauigkeit und Inhomogenitäten der Schichten oder der Gitter, nicht berücksichtigt. Jedoch ist die Simulation hinreichend genau, um das System zu beschreiben und Aussagen über das Verhalten der Schichtsysteme abzuschätzen.
Wie man in der Messkurve in Abb. 59 sieht, ist der effektive Brechungsindex der 2. Hybridmode bei Ethanol kleiner als bei Wasser. Aus den Simulationen im Theorieteil ohne Dämpfung im Deckmedium geht jedoch hervor, dass der effektive Brechungsindex bei höherbrechenden Deckmedien stetig zunimmt. In der Simulation zur Auswertung wird mit einer Dämpfung im Deckmedium eine weitgehende Übereinstimmung zur Messung erreicht. Um dies zu veranschaulichen, wurde das Deckmedium mit und ohne Dämpfung für den Sensor variiert.

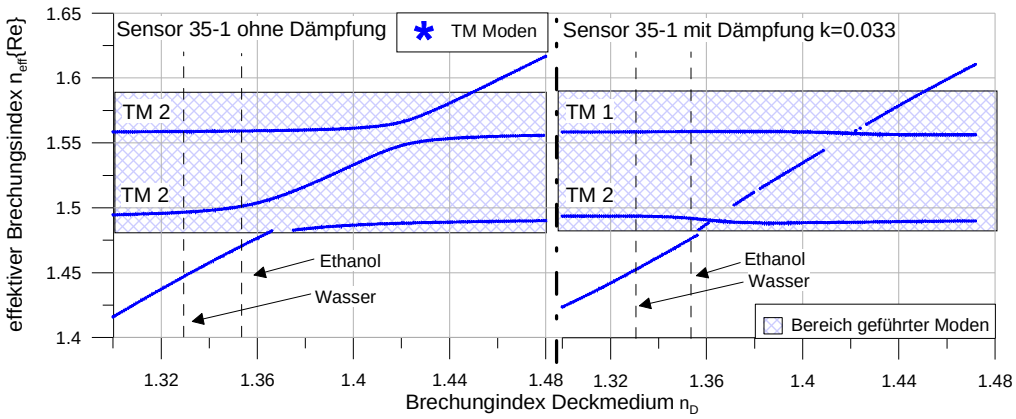

Abb. 60: Variation des Deckmediums bei Sensor 35-1 ohne (links) und mit (rechts) Dämpfung. Simulationsparameter: λ=632,8nm, Substrat n_S=1.4826, Wellenleiter d_{WL}=1062nm n_{WL}=1.583, Goldschicht d_{Au}=49.3nm n_{AU}=0.1783+i3.298.

Der Vergleich der Simulation von variablem Deckmedium mit und ohne Dämpfung für Sensor 35-1 zeigt, dass sich das Verhalten der Hybridmoden TM1 und TM2 bei gedämpftem und ungedämpftem Deckmedium unterscheidet. Während die Moden im ungedämpften System mit

zunehmendem Deckmediumsbrechungsindex stetig ansteigen, fallen diese im gedämpften System leicht ab und werden von der Plasmonen-Mode geschnitten. Bei allen dargestellten Moden handelt es sich um Hybridmoden. Die Abbildung zeigt, dass das optimale Deckmedium für die Verwendung des Sensors zwischen 1.37 und 1.41 liegt. In diesem Bereich hat eine der TM-Moden eine große Steigung. Dies entspricht einer hohen Empfindlichkeit gegenüber Veränderungen im Deckmedium.
Um zu sehen, welche Moden bei den verschieden Deckmedien vorliegen, wurden die Transversalfelder für die in der Messung detektierten Moden in Abb. 61 dargestellt.

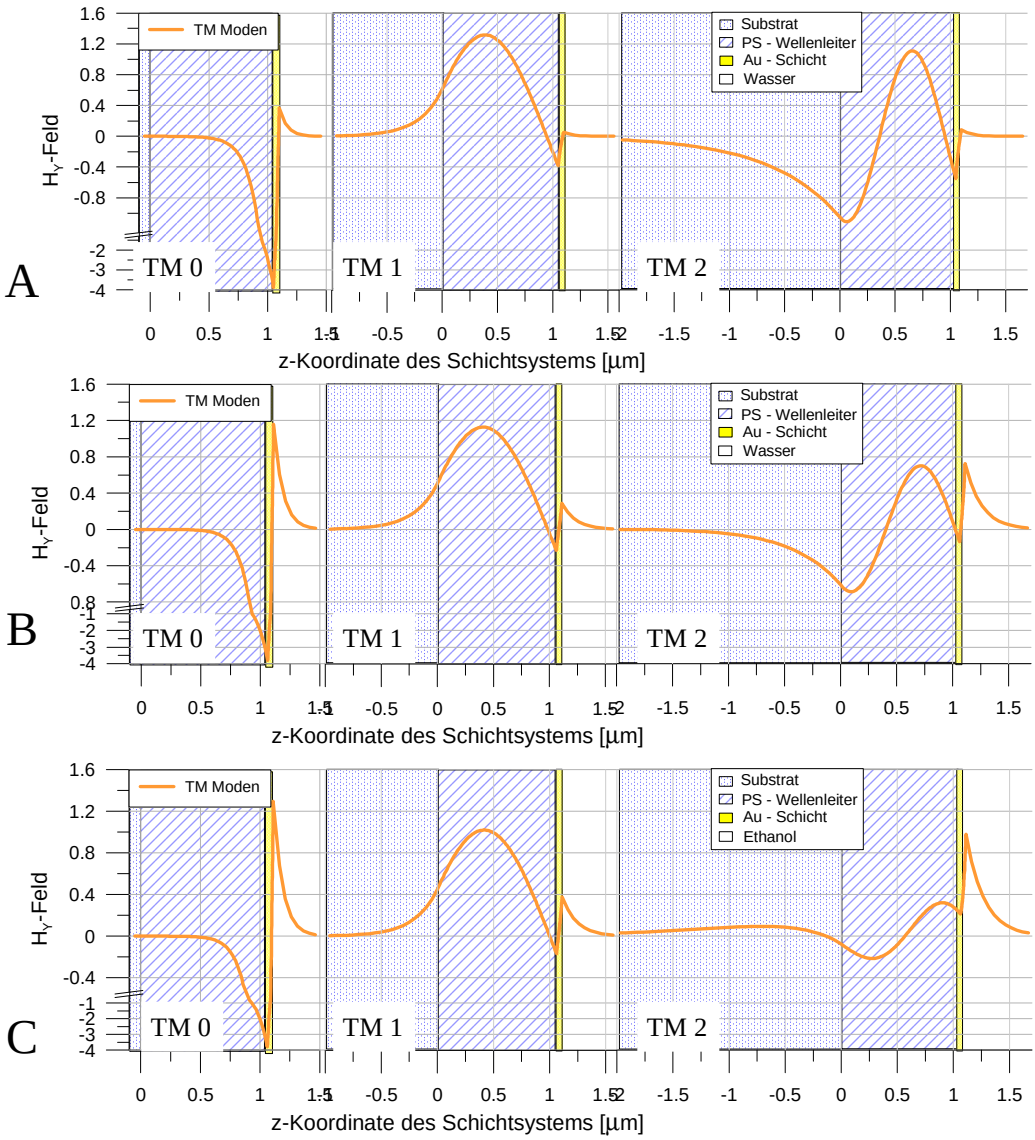

Abb. 61: Feldverteilungen der Moden für den Sensors 35-1. Simulationsparameter: λ=632,8nm, Substrat n_S=1.4826, Wellenleiter d_{WL}=1062nm n_{WL}=1.583, Goldschicht d_{Au}=49.3nm n_{AU}=0.1783+i3.298 Deckmedien: Luft (A) n_D=1, Wasser (B) n_D=1.33+i0,033 und Ethanol (C) n_D=1.357+i0.33.

In Abb. 61 sind die Transversalfelder der Moden des Sensors 35-1 bei verschiedenen Deckmedien dargestellt. Die TM0 Mode ist das nichtgekoppelte Oberflächenplasmon, dessen Feld ist bei höherem Deckmedium-Brechungsindex stärker an der Gold Deckmediumsgrenzfläche lokalisiert. Bei der 1. Hybridmode koppelt die 1. Wellenleitermode mit dem Oberflächenplasmon. Der Anteil der Plasmonen Mode steigt mit zunehmendem Deckmediums Brechungsindex an. Bei der 2. Hybridmode koppelt die 2. Wellenleitermode mit dem Oberflächenplasmon an der Goldschicht. Von Luft zu Ethanol nimmt der Plasmonen-Anteil der Mode so stark zu,

dass das Feldmaximum des Plasmonenteils das Maximum des Wellenteils übersteigt. Da die 2. Hybridmode sehr nahe am unteren Cutoff liegt, bildet sich an der Substrat-Wellenleiter-Grenzfläche ein großes evaneszentes Feld aus.

5.3 Symmetrisches Schichtsystem

Bei den Simulationen im Theorieteil hat sich gezeigt, dass die Sensoren die höchste Empfindlichkeit in symmetrischen Schichtsystemen aufweisen. Der PMMA-PS-Au-Sensor ist mit Wasser als Deckmedium ein unsymmetrisches System. Durch Erhöhen des Brechungsindex des Deckmediums erhält man mit dem PMMA-PS-Au-Sensor ein symmetrisches System. Hiermit konnte man testen, wie gut sich die Moden im symmetrischen System anregen lassen. Für diese Experimente wurde ein PMMA-PS-Au-Sensor mit einer Wellenleiterdicke von ca. 1100 nm verwendet. Er wurde zuerst gegen Luft und Wasser vermessen. Um das System symmetrisch zu machen wurde das Wasser gegen Index-Match-Öl n=1.5017 ausgetauscht und das Reflexionsspektrum erneut aufgenommen. Die drei Messkurven sind in Abb. 62 dargestellt.

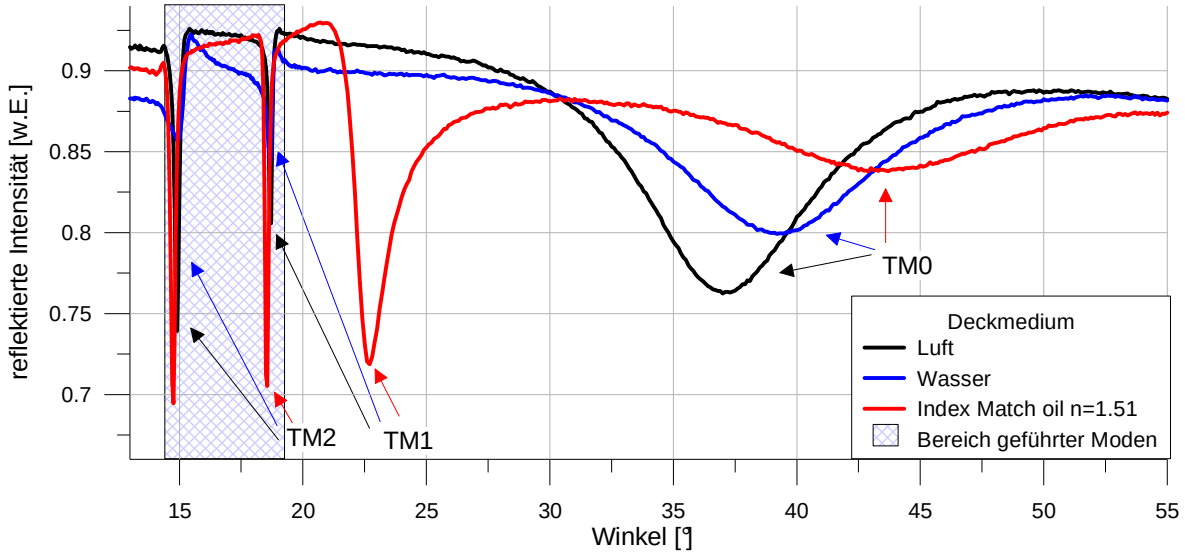

Abb. 62: Reflexionsspektren des Sensors 35-2; PMMA-Substrat, 1100nm PS-Wellenleiter, 49nm Au-Schicht, Deckmedien: Luft (schwarz), Wasser (blau) und Index-Match-Oil (rot); g=511nm, λ=632,8nm.

In den Reflexionsspektren in Abb. 62 sieht man, dass mit zunehmendem Deckmediumsbrechungsindex die TM0-Mode sich zu größeren Winkel verschiebt. Bei dem Spektrum mit Index-Match-Oil liegt die TM1-Mode oberhalb des Bereiches der geführten Wellenleitermoden. Die TM1-Mode ging von einer Hybridmode bei Luft und Wasser in eine reine Oberflächenplasmonenmode bei Index-Match-Oil über. Die Feldverteilungen der Moden sind in Abb. 63 dargestellt.

Tabelle 14: Experimentelle werte für 35-2.

		Modenwinkel		Genauigkeit	
		[°]	[neff]	[°]	[neff]
Luft	**Fit SP**	37.0636	1.841058	-0.0945	1.32E-03
	Fit H1	18.6864	1.558744	-0.0022	3.57E-05
	Fit H2	14.8995	1.495480	-0.0026	4.37E-05
Wasser	**Fit SP**	39.2500	1.871061	-0.0933	1.26E-03
	Fit H1	18.6389	1.557959	-0.0020	3.26E-05
	Fit H2	14.9088	1.495637	-0.0055	9.29E-05
Index Match 1	**Fit SP**	43.5335	1.927135	-0.1864	2.36E-03
	Fit H1	22.6863	1.624041	-0.0082	1.32E-04
	Fit H2	18.5300	1.556158	-0.0012	2.04E-05
	Fit H3	14.7353	1.492709	-0.0012	2.04E-05

Die Minima der gemessen Moden wurden mit Polynomen genähert und sind in Tabelle 14 dargestellt. Die angegebene Genauigkeit bezieht sich auf die Näherung mit den Polynomen (siehe 5.2.1). Abweichungen durch das Festlegen des Nullpunktes werden erst in Tabelle 16 berücksichtigt.

Tabelle 15: Sensorkennwerte und Simulationsparameter für Sensor 35-2.

Schicht	Sensor	Simulation
PMMA	d_{Sub} = 1.5 mm ± 0.1 mm	d_{Sub} = 5 µm
	n_{Sub} = 1.4826 ± 0.002	n_{Sub} = 1.4826
PS	d_{WL} = 1105 ± 15 nm	d_{WL} = 1100 nm
	n_{WL} = 1.583 ± 0.002	n_{WL} = 1.583
Au	d_{Au} = 49 nm ± 1 nm	d_{Au} = 45.2 nm
	n_{Au} = ? | (Theorie 0.1783)	n_{Au} = 0.1783
	k_{Au} = ? | (Theorie 3.45)	k_{Au} = 3.335

Die Simulationsparameter sind in Tabelle 15 dargestellt. Da der Brechungsindex und die Dämpfung der Goldschicht des Sensors unbekannt sind, wurden, ausgehend von den Theoriewerten, die Schichtparameter so lange variiert, bis die größte Übereinstimmung der Moden erreicht wurde. Die Dicke der Goldschicht und die Dämpfung der Goldschicht beeinflussen sich wechselseitig. So hat eine dicke Goldschicht mit niedriger Dämpfung nahezu denselben Einfluss auf die Mode wie eine dünnere Goldschicht mit höherer Dämpfung. Eine Übereinstimmung der Moden konnte nur bei einer relativ dünnen Goldschicht erreicht werden. Diese liegt unterhalb der Schichtdicke, die beim Aufdampfen ermittelt wurde.

Tabelle 16: Vergleich von Messung und Simulation des Sensors 35-2.

		Modenwinkel [neff]			Genauigkeit des Fit	Differenz Sim - Mess	
		Simulation	Messung				
			ohne off	off 0.056°		ohne off	off 0.056°
Luft	SP	1.84191	1.84106	1.84182	1.32E-03	8.54E-04	8.86E-05
	H1	1.55956	1.55874	1.55965	3.57E-05	8.16E-04	-9.33E-05
	H2	1.49654	1.49548	1.49641	4.37E-05	1.06E-03	1.28E-04
Wasser	SP	-	1.87106	1.87180	1.26E-03	-	-
	H1	1.56036	1.55796	1.55887	3.26E-05	2.40E-03	1.49E-03
	H2	1.49904	1.49564	1.49656	9.29E-05	3.40E-03	2.47E-03
Index Match	SP	-	1.92713	1.92783	2.36E-03	-	-
	H1	1.62577	1.62404	1.62493	1.32E-04	1.73E-03	8.41E-04
	H2	1.55770	1.55616	1.55707	2.04E-05	1.55E-03	6.35E-04
	H3	1.49450	1.49271	1.49364	2.04E-05	1.79E-03	8.65E-04

In Tabelle 16 sind die simulierten und gemessenen effektiven Brechungsindizes der Moden sowie deren Differenz dargestellt. Die Messwerte wurden um einen Offset von 0.056° verschoben. Dies liegt im Bereich der Einstellgenauigkeit des Nullpunktes von ± 0.2°.
Bei der Simulation des Schichtsystems wurden die TM0-Moden für Wasser und Index-Match-Oil nicht gefunden. Durch Verschieben der Startwerte in die komplexe Ebene wurden diese Moden nicht gefunden. Für Moden mit hohem effektiven Brechungsindex wird die Modendispersionsfunktion sehr groß. Es wird ab einer bestimmten Größe nicht mehr möglich, die Minima der Modendispersionsfunktion genau zu bestimmen. Dies hängt unter anderem mit der numerischen Genauigkeit der numerischen Berechnung und dem Lösungsalgorithmus des Programms zusammen.
Für die gefundenen Moden konnten die Transversalfelder H_Y berechnet werden. Bei den Felddarstellungen in Abb. 63 wurde dieselbe Schrittweite in x- und y-Richtung verwendet.

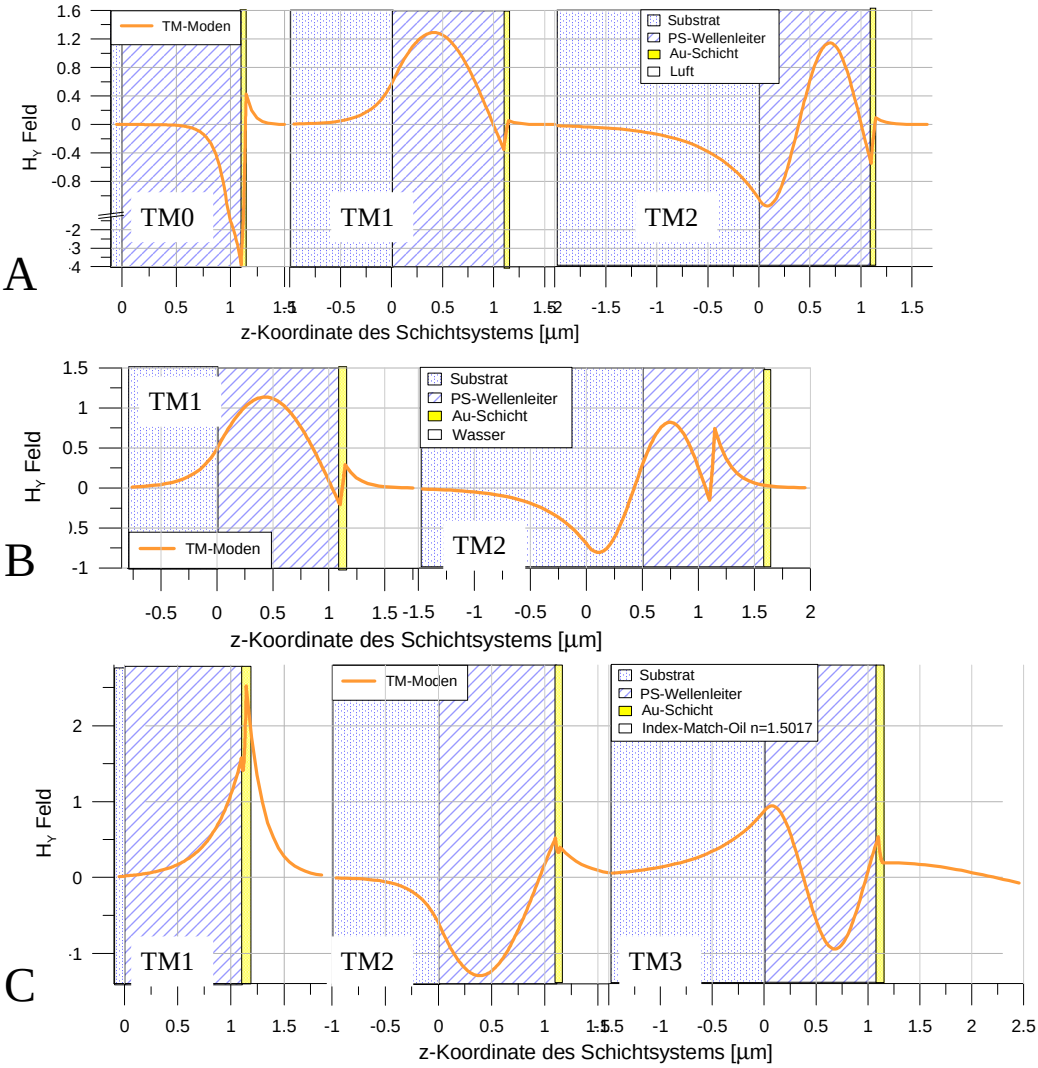

Abb. 63: Feldverteilungen der Moden für den Sensor 35-2; Simulationsparameter: λ=632,8nm, Substrat n_S=1.4826, Wellenleiter d_{WL}=1100nm n_{WL}=1.583, Goldschicht d_{Au}=45.2nm n_{AU}=0.1783+i3.33 Deckmedien: Luft (A) n_D=1, Wasser (B) n_D=1.33+i0,033 und Index-Match-Oil (C) n_D=1.5017.

In Abb. 63 sind die Feldverteilungen der einzelnen Moden des Sensors 35-1 bei Luft (A), Wasser (B) und Index-Match-Oil (C) dargestellt. Die TM0-Mode konnte in Wasser und Index-Match-Oil mit der Simulationssoftware nicht gefunden werden. Die Feldverteilung sollte ähnlich der Feldverteilung der TM0-Mode bei dem Sensor 35-1 sein. In Luft ist der Plasmonenanteil der TM1-Mode gering. Er steigt bei Wasser als Deckmedium an und geht bei Index-Match-Oil in eine reine Oberflächenplasmonenmode (C TM1) über. Die Feldverteilung der TM1-Mode ähnelt der Feldverteilung des Long-Range-Plasmons, da die Feldmaxima auf beiden Seiten der Goldschicht dasselbe Vorzeichen haben. Die TM2-Mode verhält sich in Luft und Wasser analog zu Sensor 35-1. Der Punkt, an dem die Welle in das Plasmon übergeht, verschiebt sich mit zunehmendem Deckmediumsbrechungsindex von einer unsymmetrischen Feldkopplung des Plasmons zu einer symmetrischen Feldkopplung. Eine unsymmetrische Feldkopplung entspricht im symmetrischen System ohne Wellenleiter dem Short-Range-Plasmon und eine symmetrische Feldkopplung dem eines Long-Rage-Plasmon. Die TM3-Mode, die an der Grenzfläche zum Deckmedium an Strahlung koppelt, bildet sich nur bei Index-Match-Oil aus. Mit dem Gitter konnte die Mode angeregt werden, da die Einstrahlung von der Substratseite erfolgte, an welcher die Mode nicht and Strahlung koppelt.

Zur besseren Veranschaulichung des Verhaltens der Moden bei verschiedenen Deckemedien wurde für den Sensor 35-2 der Deckmediumsbrechungsindex variiert.

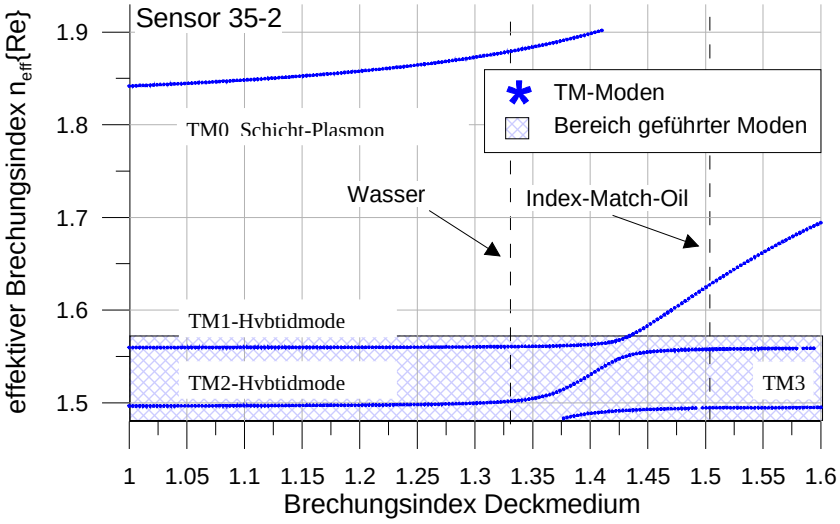

Abb. 64: Veränderung des Deckmediums bei Sensor 35-2 ohne Dämpfung. Simulationsparameter: λ=632,8nm, Substrat n_S=1.4826, Wellenleiter d_{WL}=1100nm n_{WL}=1.583, Goldschicht d_{Au}=45.2nm n_{AU}=0.1783+i3.33 .

In Abb. 64 ist das Verhalten des Sensors 35-2 bei verschiedenen Deckmediums-Brechungsindizes ohne Dämpfung dargestellt. Die Leckmoden, die unterhalb des Wellenleiter-Cutoffs liegen, spielen für diese Betrachtung keine Rolle und wurden daher nicht berechnet. Die Mode mit dem größten effektiven Brechungsindex ist das Oberflächenplasmon TM0. Mit zunehmendem Deckmediumsbrechungsindex steigt sein effektiver Brechungsindex an. Die Simulationssoftware kann diese Mode in dieser Schichtkonfiguration nur bis zu einem Deckmediumsbrechungsindex von 1.42 berechnen. Bei Deckmedien mit Dämpfung liegt dieser Wert noch tiefer. Bei Luft n=1 können neben dem Oberflächenplasmon noch zwei Hybridmoden existieren. Der effektive Brechungsindex der Hybridmoden verändert sich bis zu Deckmedien mit Brechungsindex n_D=1.3 kaum. Danach steigt die TM2-Mode auf den Wert der TM1-Mode an und die TM1 verlässt den geführten Bereich und wird zur reinen Oberflächenplasmonenmode. Die Kopplung von Wellenleitermoden und Oberflächenplasmonen findet nur in dem Bereich in dem sich Wellenleitermoden ausbreiten können statt. Für das PMMA-PS-Schichtsystem ist dies vom Substratbrechungsindex n_S=1.4826 bis zum Wellenleiterbrechungsindex n_{WL}=1.583.

6. Zusammenfassung

Im Rahmen dieser Arbeit wurden gittergekoppelte Hybridmodensensoren aus einer Schichtkombination aus Polymethylmethacrylat-Substrat, Polystyrol-Wellenleiter und 50nm Goldschicht gebaut und charakterisiert. Mit den Sensoren konnten die Hybridmoden und das unsymmetrische Oberflächenplasmon in Reflexionsmessung von der Substratseite gegen Luft und Wasser nachgewiesen werden. Im Bereich der Symmetrie von Substrat und Deckmedium konnte in dem Sensor zusätzlich eine Long-Range-Plasmonen-Mode angeregt werden. Durch die Messungen konnte die weitgehende Übereinstimmung mit den Simulationen gezeigt werden. Weiter wurden für verschiedene Schichtsysteme Simulationen zur Empfindlichkeit und dem Verhalten der Moden durchgeführt.
Hybridmoden sind Wellenleitermoden gekoppelte Oberflächenplasmonen. Bei dem Sensor wird eine TM-polarisierte planare Wellenleitermode über ein Gitter angeregt. Die wellenleitende Schicht grenzt an eine Goldschicht, wodurch die Wellenleitermode an der Goldschicht ein Oberflächenplasmon anregen kann. Die Anregung der Moden erfolgt durch das Substrat, dies ermöglicht, wie bei der Oberflächenplasmonen-Spektroskopie in Kretschmann-Konfiguration, gegen verschiedene Deckmedien zu messen, ohne dass das einfallende Licht durch das Deckmedium strahlt.
Es wurden Simulationen zu verschieden Schichtsystemen durchgeführt. Dabei hat sich gezeigt, dass geführte Hybridmoden nur im Bereich der geführten Wellenleitermoden existieren. Moden die oberhalb des oberen Wellenleiter-Cutoffs liegen, sind reine Plasmonenmoden und weisen keine Wellenleiterkopplung auf. Der effektive Brechungsindex n_{eff} der TM0-Mode (Oberflächenplasmon) liegt bei allen untersuchten Systemen weit über dem Bereich der Wellenleitermoden. Es handelt sich hierbei im symmetrischen System um das Short-Range-Plasmon. Das Feld ist mit zunehmender Unsymmetrie der Schichten an der Grenzfläche zum höherbrechenden Medium lokalisiert. Moden die unterhalb des unteren Wellenleiter-Cuttoffs liegen, sind Leckmoden oder strahlende Plasmonenmoden. Die Wellenleiterleckmoden regen an der Goldgrenzfläche ein Oberflächenplasmon an.
Für die Hybridmoden gilt, dass jede TM-polarisierte Wellenleitermode an der Goldgrenzschicht ein Oberflächenplasmon anregt. Der Anteil des Plasmons an der Gesamtmode hängt dabei von der Sensorkonfiguration ab. Da die Hybridmode über das evaneszente Feld des Plasmons sensitiv für Änderungen im Deckmedium ist, entspricht ein großer Plasmonenanteil an der Hybridmode einer hohen Empfindlichkeit. Mit Hilfe von Berechungen der Empfindlichkeit der Hybridmoden für eine 5 nm dicke Adlayerschicht (n_{Ad}=1.5) bei verschiedenen Schichtsystemen wurde der Einfluss von Substrat, Wellenleiter und Deckmedium untersucht. Dabei zeigte sich, dass symmetrische Schichtsysteme die höchste Empfindlichkeit aufweisen. Die Symmetrie bezieht sich auf Substrat und Deckmedium. Weiter zeigte sich, dass bei höherer Differenz zwischen Wellenleiter- und Substratbrechungsindex die Empfindlichkeit der Moden höher ist. Die Symmetrie beeinflusst die Empfindlichkeit der Moden wesentlich stärker als der Wellenleiterbrechungsindex.
Der experimentelle Nachweis der Hybridmoden erfolgte mit Sensoren aus PMMA-PS-Au-Kombinationen. Es wurden PMMA-Substrate verwendet, auf die Polystyrolfilme aufgeschleudert und mittels Heißprägemethode eine Gitterstruktur erzeugt wurde. Auf den Polystyrol-Wellenleiter wurde eine dünne Goldschicht aufgedampft.
Es hat sich beim Herstellen der Sensoren gezeigt, das man mit der Heißprägmethode in relativ kurzer Zeit gute optische Gitter herzustellen kann. Es wurde eine Masterstruktur auf einem Siliziumwaver verwendet. Da PMMA und Polystyrol eine Glastemperatur T_G um 100°C haben,

schmolz beim Prägen das Substrat zusammen mit dem Wellenleiter auf. Dadurch konnten geringe Unebenheiten zwischen der Masterstruktur und dem Prägestück ausgeglichen werden. Das Prägen auf Substrate die nicht mit aufschmelzen wurde getestet, jedoch waren die Gitter Qualitativ schlechter. Durch optimieren des Prägeprozesses sollte es in Zukunft möglich sein dieselbe Gitterqualität zu erreichen.
Das Schichtsystem PMMA-PS-Au wies in den Simulationen eine niedrigere Empfindlichkeit als andere untersuchte Schichtsysteme auf, war jedoch zum Vergleich von Simulation und Theorie ausreichend. Die Messungen wurden für die Deckmedien Luft, Wasser, Ethanol und Index-Match-Oil durchgeführt. Luft galt dabei als Referenzmessung, Wasser und Ethanol wurde gewählt um das Verhalten des Sensors bei verschiedenen Deckmedien zu untersuchen. Die Messungen mit Index-Match-Oil n_D=1.5017 hatten den Hintergrund das Verhalten der Moden im Symmetrienahen Schichtsystem zu untersuchen.
Beim Vergleich verschiedener Deckmedien fiel auf, dass sich die TM2-Mode von Wasser zu Ethanol zu kleineren effektiven Brechungsindizes verschob. Dies widersprach den vorangegangenen Simulationen. Bei weiteren Berechnungen konnte unter Berücksichtigung der Flüssigkeitsdämpfung dieses Verhalten simuliert werden und so eine Übereinstimmung von Simulation und Experiment erreicht werden. Durch die Dämpfung der Flüssigkeiten waren die Moden im Reflexionsspektrum bei Wasser und Ethanol weniger ausgeprägt als in Luft.
Bei der Messung im nahezu symmetrischen Schichtsystem konnten neben zwei Hybrid-Moden und der TM0-Mode noch ein Long-Range-Plasmon angeregt werden. Auch hier konnte die weitgehende Übereinstimmung von Experiment und Simulation gezeigt werden.

Ausblick:

Als Abschluss dieser Arbeit soll noch kurz aufgezeigt werden, welche Punkte in Zukunft noch untersucht werden sollten und welches Potential das Sensorkonzept zum jetzigen Zeitpunkt aufweist.

Für den Bereich Simulation:
Für weitere Untersuchungen von Hybridmoden-Schichtsystemen sollten Systeme mit Substratbrechungsindizes zwischen Quarz (n=1.457) und Moldflon (n=1.31) untersucht werden. Da Moldflon nur ein symmetrienahes System ist, kann es durchaus sein, dass die maximale Empfindlichkeit im streng symmetrischen System zu finden ist.
Weiter sollten Empfindlichkeiten für dicke Adlayerschichten, wie z.B. Hydrogele, durch eine Änderung des Deckmediumsbrechungsindex simuliert werden. Bei dicken Schichten befindet sich das gesamte oder ein Großteil des evaneszenten Feldes in der Adlayerschicht. Die Eindringtiefe des evaneszenten Feldes sollte hier einen direkten Einfluss auf die Empfindlichkeit der Mode haben. Dadurch sollten sich die Positionen der Empfindlichkeitsmaxima gegenüber der Position bei dünnen Adlayerschichten verschieben.
Die Messungen mit Ethanol haben gezeigt, dass das Verhalten der Moden von der Dämpfung des Deckmediums stark beeinflusst wird. Bei weiterführenden Untersuchungen sollte dieser Effekt systematisch untersucht werden, da er für die Anwendung des Sensors eine wichtige Rolle spielt.

Experimente:
Um das Verhalten der Hybridmodensensoren zu untersuchen, sollten Sensoren mit symmetrischem Schichtaufbau realisiert werden und deren Verhalten bei verschiedenen Adlayerschihten untersucht werden. Es sollte sich hierbei zeigen, dass die Empfindlichkeit dieser Sensoren wesentlich höher ist, als bei Sensoren mit unsymmetrischen Schichtaufbau.

Weiter sollte durch Anlagern bekannter Adlayerschichten die Simulationen für die Empfindlichkeit der Moden untersucht werden. Dabei sollte die Dicke der Adlayerschicht variiert werden, um die Veränderung der Empfindlichkeit bei unterschiedlichen Dicken zu bestimmen.
Weitere Untersuchungen sollten sich dem Verhalten der Sensoren bei verschieden dämpfenden Deckmedien widmen.

Potential:
Da der Sensor nur für ganz bestimmte Deckmedien sinnvoll zu verwenden ist, sollte die zu untersuchende Problemstellung in die Konstruktion des Sensors einfließen. Die Simulationen zeigten, dass für bestimmte Schichtkonfigurationen die Empfindlichkeit der Hybridmoden höher und der Imaginärteil kleiner ist, als bei reinen Plasmonenmoden. Somit sollte es möglich sein, mit symmetrischen Systemen hochsensitive Sensoren zu realisieren.
Ein Vorteil der in dieser Arbeit realisierten Sensoren ist, dass die Sensoren vollständig aus Polymeren aufgebaut wurden. Mit der verwendeten Heißprägemethode ging die Herstellung, im vergleich zu einzeln hergestellten holographischen Gittern, sehr schnell. Es bietet sich so in Zukunft die Möglichkeit, kostengünstige Plasmonen-Sensoren auf Polymerbasis als Massenprodukt für spezielle Anwendungen herzustellen.

7 Anhang

7.1 Literaturverzeichnis

[1] International Human Genome Sequencing Consortium. *Finishing the euchromatic sequence of the human genome.* Nature Bd. 431, S. 931ff

[2] Kambhampati Dev. K., Wolfgang Knoll. *Surface Plasmon optical techniques*. Current Opinion in Colloid & Interface Sience 4 (1999), S. 273-280

[3] Chien F.-C.. *A sensitivity comparison of optical biosensors based on four different surface plasmon resonance modes*. Biosensors and Bioelectronics 20 (2004) 633-642

[4] Kretschmann E.. *Die Bestimmung optischer Konstanten von Metallen durch Anregung von Oberflächenplasmaschwingungen.* Z. Physik 241,313-324 (1971)

[5] Schröter U.. Oberflächenplasmonen auf modulierten Silberfilmen. Dissertation, Universität Hamburg, 2000

[6] Lukosz W.. *Principles and sensitivities of integrated optical and surface plasmon sensors for direct affinity sensing and immunosensing*. Biosensrs & Bioelectronics 6 (1991) 215-225

[7] Homola J.et al. A surface resonance based integrated optical sensor. Sensors and Actuators B 38-39 (1997) 286-290.

[8] Dostalek et al. *Surface plasmon resonance biosensor based on integrated optical waveguide.* Sensors and Actuators B, 76:8-12, 2001.

[9] Stöcker Peter. *Herstellung und Charakterisierung eines Wellenleitermoden- Oberflächenplasmonen- Sensors für Echtzeitmessungen.* Diplomarbeit, Fachhochschule Wiesbaden, 2002.

[10] Yeh Pochi. *Optical Waves in Layered Media*. John Wiley & Sons, Inc., 1988.

[11] Kathe Wolfgang, *Integrierte Optik.* Akademische Verlagsgesellschaft Geest & Portik 1991.

[12] Snyder Allen W.. *Optical Waveguide Theory*. Chapman & Hall. 1991.

[13] Gerken M.. *Transfer - Matrix - Methode*. Uni Karlsruhe (TH), SS2007

[14] Chilwell et al. *Thin-films flield .transfer matrix theory of planar multilayer waveguides and reflection from prism-loaded waveguides.* Optical Society of America. 1984

[15] Steinmann W.. *Optical Plasma Resonances in Solids.* phys. stat. sol.28, 437 (1968)

[16] Knoll Wolfgang. *Interfaces and thin films as seen by bound electromagnetic Waves.* Annu.Rev.Phys.Chem.1998.49:569-638. 1998

[17] Otto Andreas. *Excitation of nonradiative surface plasmoa waves in silver by the method of frustrated total Reflection.* Zeitschrift für Physik 216,398-410 (1968)

[18] Branzen Samuel. *Thermo-optische Detektion von Oberflächenplasmonen*. Diplomarbeit, Fachhochschule Wiesbaden, 2005

[19] Zayats Anatoly V. et al. *Nano-optics of surface plasmon polaritons*. Physics Reports 408 (2005) 131-314

[20] Lukosz W.. *Sensitivity of integrated optical grating and prism couplers as (bio)chemical sensor.* Sensors & Actors 15 (1988) 273-284

[21] Moldflon® *Die neue Dimension der PTFE Verarbeitung*. Elring Klinger Kunstofftechnik GMBH.

[22] Buck Warren H. *Properties of Amorphous Fluoropolymers Based on 2,2-Bistrifluromethyl-4,5-Difluoro-1,3-Dioxole (Teflon AF).* Du Pont

[23] Ziegler Jochen. *Schichtpräparation und Charakterisierung von Wellenleitern aus Polymeren*. Dissertation, Johannes Gutenberg - Universität Mainz, 2000.

[24] Hamdorf Marc. *Beweglichkeit polymerer Glasbildner an Grenzflächen*. Dissertation, Johannes Gutenberg-Universität - Mainz, 1999.

[25] Kasry Amal. *Optical Biosensors; New Aspects in Surface Plasmon and Fluorescence Spectroscopy*. Dissertation, Johannes Gutenberg-Universität Mainz, 2006.

[26] Block Paul. Entwicklung und Erprobung einer Messzelle für Wellenleiter- und Plasmonenspektroskopie. Diplomarbeit, Fachhochschule Wiesbaden, 2007.

[27] Prest W. M., Jr. and D.J.Luca. *The alignment of polymers during the solvent - coating process*. J.Appl. Phys. 51(10), Oct 1980

[28] Harris R. D. et al. Waveguide Surface Plasmon Resonance Sensors. University of Southhampton. Sensors Actors B 29 (1995) 261-267

[29] Chien F.-C. at al. Coupled waveguide-surface plasmon resonanve biosensor with subwavelength grating. Biosensrs & Bioelectronics 22 (2007) 2737-2742

[30] Petigk Thomas. *Optimierung der Schichteigenschaften von PECVD- Siliziumnitrid / Siliziumoxinitrid –Wellenleitern und Realisierung eines planaren Biosensors.* Diplomarbeit, Fachhochschule Wiesbaden, 2002.

[31] Stöcker Peter. *Multimode waveguide mode surface plasmon coupling: a sensitivity and device realizability study*. Sensors and Actuators A 116 (2004) 224-231.

[32] Igarashi S.at al. *Swelling signals of polymer films measured by a combination of micromechanical cantilever sensor and surface plasmon resonance spectroscopy.* Sensors and Actuators B: Chemical, 117(1), (2006) 43-49.

[33] Kasry A., Knoll W.), *Long range surface plasmon fluorescence spectroscopy*. Applied Physics Letters, 89(10), 2006

[34] Mittler Silvia, Menges Bernhard. *Surface Nanophotonics. Principles and Applications.* Springer-Verlag, New York (2007)

[35] Beines, Patrick W. at al. *Responsive Thin Hydrogel Layers from Photo-Cross-Linkable Poly(N-isopropylacrylamide) Terpolymers.* Langmuir *23* (2007) 2231-2238

7.2 Abbildungsverzeichnis

Abb. 1: Kretschmann-Konfiguration zur Oberflächenplasmonen-Anregung. 5
Abb. 2: Schema eines integrierten Plasmonen Sensors mit Wellenleiterkopplung[7]..... 6
Abb. 3: Schema des Sensorschichtsystems mit Adlayerschicht. 6
Abb. 4: TE-polarisiertes Licht an einer Grenzfläche (+) vorwärts, (-) rückwärts laufend..... 9
Abb. 5: Schema eines Schichtsystem für die Transfermatrix. 10
Abb. 6: Schema einfacher planarer Wellenleiter $n_2 > n_1, n_3$. 12
Abb. 7: Brechungsindizes für das Schichtsystem in Abb. 6. 12
Abb. 8: Modenkarte für eine Wellenleiter Polystyrol n=1.6 auf PMMA Substrat n=1.49. 13
Abb. 9: Feldverteilung von TE-Moden in PMMA/PS-Wellenleiter, erstellt mit ATSOS. 14
Abb. 10: Schematische Darstellung eines Oberflächenplasmon an einer Grenzfläche 15
Abb. 11: Dispersionsrelation über k_x für Luft ω_L Prisma ω_P und Oberflächen Plasmon $\omega_{SP.}$ .. 16
Abb. 12: Schema des Oberflächenplasmons in einer dünnen Metallschicht.. 16
Abb. 13: Anregung eines Oberflächenplasmons mit Gitter. 17
Abb. 14: Oberflächenplasmonen im symmetrischen Schichtsystem. 18
Abb. 15: Feldverteilung der Moden bei dAu=50nm des Schichtsystems aus Abb. 14..... 18
Abb. 16: Oberflächenplasmonen im unsymmetrischen Schichtsystem 19
Abb. 17: Transversal Feldverteilung der Oberflächenplasmonen..... 19
Abb. 18: Variation von n_S in einem Schichtsystem. 20
Abb. 19: TM-Moden im unsymmetrischen Schichtsystem..... 21
Abb. 20: Normiertes H_Y -Feld der TM 2 Mode nahe am Cutoff.. 22
Abb. 21: Substratseitige Anregung mit symmetrischem Gitter 23
Abb. 22: Schematische Darstellung des Sensorschichtsystems. 24
Abb. 23: Modenkarte PMMA | PS | Au (50nm) | Wasser. 26
Abb. 24: Modenkarte für Strahlungsmoden analog zu Abb. 23..... 26
Abb. 25: Vergleich von Δn_{eff} und Imaginärteil für die TM-Moden im 1. System..... 27
Abb. 26: Feldverteilung der TE und TM-Moden bei d_{WL}=417nm im 1. System. 28
Abb. 27: H_Y-Feld der TM-Moden bei d_{WL}=965nm im 1. System. 28
Abb. 28: Normiertes H_Z -Feld der Moden vom 1. System..... 29
Abb. 29: Änderung des Deckmediums Brechungsindex. 29
Abb. 30: Modenkarte für 2. System Quarz | PS | Au (50nm) | Wasser 30
Abb. 31: Modenkarte für Strahlungsmoden des Systems 2 analog zu Abb. 30. 30
Abb. 32: Darstellung der Empfindlichkeit Δn_{eff} und n_{eff} {Im} für das 2. Systems. 31
Abb. 33: H_Y -Feld der TM-Moden von System 2 bei d_{WL}=375nm. 31
Abb. 34: H_Y -Feld der TM-Moden von System 2 bei d_{WL}=800nm. 32
Abb. 35:Empfindlichkeit Δn_{eff} des Oberflächenplasmons (TM0) 33
Abb. 36: Δn_{eff} {Re} bei variablem Substratbrechungsindex..... 33
Abb. 37: Empfindlichkeit Δn_{eff} aller Systeme für die TM1-Mode 34
Abb. 38: Empfindlichkeit aller Systeme für die TM2-Mode bei variabler Wellenleiterdicke. 35
Abb. 39: Modenkarte für Moldflon | PS | Au (50nm) | Wasser 36
Abb. 40: Darstellung der Empfindlichkeit Δn_{eff} und n_{eff} {Im} 37
Abb. 41: H_Y -Feld der TM-Moden in System 7 bei d_{WL}=250nm..... 37
Abb. 42: H_Y -Feld der TM-Moden in System 7 bei d_{WL}=700nm..... 38
Abb. 43: Normiertes H_Y -Feld der der TM1-Moden in System 7 38
Abb. 44: Schema eines Profilmessgerätes..... 40
Abb. 45: Diagramm Polystyrol-Schichtdicke in Abhängigkeit der Drehzahl..... 42
Abb. 46: Prägegerät mit Heiztisch. 43

Abb. 47: Aufbau zum Silanisieren der Masterstruktur. 44
Abb. 48: AFM Aufnahmen Topographie und Schnitt der Masterstruktur 46
Abb. 49: Erhitzen von Substrat und Prägemaster auf der Heizplatte. 47
Abb. 50: Schema des Optischen Messaufbaus. 48
Abb. 51: Probenhalter mit integrierten Laserdioden. 50
Abb. 52: Reflexionsgitter in Littrow - Anordnung. 51
Abb. 53: AFM Topographie eines geprägten Gitters 52
Abb. 54: Winkelspektrum der Reflexion (TM) eines PMMA Substrates. 53
Abb. 55: TM Wellenleiterspektrum zur Bestimmung des PS-Brechungsindex. 54
Abb. 56: Dicken Brechungsindex-Abhängigkeit in Multiwave. 55
Abb. 57: Winkelspektrum in Reflexion Sensor 35-1. 56
Abb. 58: Feldverteilung der Moden in Luft des Sensors 35-1.. 58
Abb. 59: Messung der reflektierten Intensität Sensor 35-1 59
Abb. 60: Variation des Deckmediums bei Sensor 35-1 60
Abb. 61: Feldverteilungen der Moden für den Sensors 35-1. 61
Abb. 62: Reflexionsspektren des Sensors 35-2 62
Abb. 63: Feldverteilungen der Moden für den Sensor 35-2 65
Abb. 64: Veränderung des Deckmediums bei Sensor 35-2 66

7.3 Tabellenverzeichnis

Tabelle 1: Sensorsysteme (Au n = 0.1783 + i 3.45; Wasser n = 1.33). 25
Tabelle 2: Prozessschritte zur Herstellung des Sensors auf PMMA 40
Tabelle 3: Verwendete Polystyrollösungen. 41
Tabelle 4: Rauigkeitswerte von PS V. 42
Tabelle 5: Brewsterwinkel der PMMA-Substrate. 53
Tabelle 6: Gefittete Modenwinkel aus dem Winkelspektrum in Abb. 54. 54
Tabelle 7: n_{eff} der TM-Moden aus Abb. 54. 55
Tabelle 8: Brechungsindizes der 4 gemessenen Sensoren. 55
Tabelle 9: Werte der Reflexionsmessung. 57
Tabelle 10: Sensorkennwerte und Simulationsparameter. 57
Tabelle 11: Vergleich Messung und Simulation bei Luft. 58
Tabelle 12: Moden Minima des Sensors 35-1 bei verschiedenen Deckmedien. 59
Tabelle 13: Vergleich Messung und Simulation. 60
Tabelle 14: Experimentelle werte für 35-2. 63
Tabelle 15: Sensorkennwerte und Simulationsparameter für Sensor 35-2. 63
Tabelle 16: Vergleich von Messung und Simulation des Sensors 35-2. 64

7.4 Danksagungen

Ich danke allen die zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen und mich in dieser Zeit unterstützt haben.

Ich bedanke mich bei Herrn Prof. Dr. Uwe Langbein für die Betreuung der Diplomarbeit, sowie die fachliche Unterstützung bei theoretischen Fragen.

Für die freundliche Betreuung und gute Zusammenarbeit sowie viele gute Tips und Ratschläge möchte ich meinem Koreferenten Bernhard Menges vom Max-Plank-Institut für Polymerforschung in Mainz danken.

Weiter gilt mein Dank Wolfgang Knoll der mich herzlich in seine Arbeitsgruppe aufgenommen und mir das Schreiben dieser Arbeit ermöglichte.

Viel Dank geht an Andreas Unger, der mir in vielen Gesprächen und bei vielen Problemen die richtigen Wege aufgezeigt hat

Weiterer Dank geht an Paul Block der den Messaufbau konstruiert und aufgebaut und mir umfangreiche Messzeiten zur Verfügung stellte.

Der gesamten Gruppe Nicht-Lineare-Optik von Bernhard Mengens möchte ich meinen Dank aussprechen. insbesondere Sabir Okba für die gute Zusammenarbeit beim Herstellen der Sensoren, Antun Peic für gute Tips, sowie Christopf Hoffmann.

Ich danke auch Sven Brüninghoff und Jens Weinberg, durch die das Arbeiten insbesondere an den Wochenenden nicht zur Last wurde.

Dank geht auch an Helma Burg für die schnelle Anfertigung der AFM-Aufnahmen.

Herzlichen Dank geht an die gesamte Arbeitsgruppe Knoll mit ihrem sehr positiven und entspannten Arbeitsklima.

Für die Unterstützung in theoretischen Fragen und während des gesamten Studiums möchte ich Martin Soukup und Daniel Werner danken.

Ferner gilt meinen herzlichen Dank meiner Familie und meiner Freundin ohne deren Unterstützung das Studium und das Schreiben dieser Diplomarbeit nicht möglich gewesen währe.

Michael Flockert

7.5 Lebenslauf

Persönliche Daten

Name	Michael Flockert
Geburtsdatum	10.02.1982
Geburtsort	Speyer, Deutschland
Nationalität	deutsch
Konfession	evangelisch
Anschrift	Beethovenstr. 30 67454 Haßloch

Schulbildung

1988 – 1992	Ernst-Reuter-Grundschule in Haßloch
1992 – 1998	Sophie-Scholl-Realschule in Haßloch, Mittlere Reife
2002 – 2003	Fachoberschule Bildungsgang für Technik Ludwigshafen, Fachhochschulreife

Berufsausbildung

1998 – 2001	Ausbildung zum Zentralheizugs- und Lüftungsbauer bei der Firma Otto Müller GmbH, Haßloch

Beruf

2001 – 2002	Geselle bei der Firma Otto Müller GmbH, Haßloch

Studium

seit WS 03/04	Physikalische Technik an der FH Wiesbaden
Auslandssemester	University of Tokushima, Tokushima, Japan