



**UNIVERSIDAD MICHOACANA DE SAN NICOLÁS DE HIDALGO**

**FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICO MATEMÁTICAS**

“Mat. Luis Manuel Rivera Gutiérrez”

---

**ESTRUCTURAS DE BANDAS DE CRISTALES FOTÓNICOS EN 2D  
CON SUPERFICIES RUGOSAS QUE CONTIENEN METAMATERIAL  
DISPERSIVO**

---

**TESIS**

Para obtener el grado de

**LICENCIADO EN CIENCIAS FÍSICO MATEMÁTICAS**

PRESENTA:

**LUIS EDUARDO PUENTE DÍAZ**

DIRECTOR DE TESIS:

Doctor en Ciencias en Óptica  
**HÉCTOR I. PÉREZ AGUILAR**

Morelia, Michoacán, Agosto de 2015

## RESUMEN

En el presente trabajo hemos mostrado un estudio teórico y numérico de las estructuras de bandas de un Cristal Fotónico en 2D (CF2D) formado por una celda unitaria cuadrada con una inclusión cilíndrica. El trabajo está motivado en gran parte por la necesidad de una nueva alternativa de desarrollo en la tecnología de telecomunicaciones que sea puramente fotónico. Hemos aplicado una técnica numérica, conocida como el “Método de la ecuación integral”, para calcular las estructuras de bandas de un CF2D con una inclusión cilíndrica que tiene una superficie lisa o aleatoriamente rugosa y que incluye medios dieléctricos o Metamateriales (LHMs). Estas estructuras fueron analizadas para los casos de la polarización del campo eléctrico transversal (TE) y del campo magnético transversal (TM) variando las fracciones de llenado. Debido al elevado tiempo de cómputo requerido para obtener las estructuras de bandas para la inclusión cilíndrica que tiene una superficie aleatoriamente rugosa, se tuvo la necesidad de utilizar la computación en paralelo bajo el protocolo de MPI (Message Passing Interface). Los resultados muestran que la rugosidad aleatoria en la superficie de la inclusión cilíndrica modifica considerablemente las estructuras de bandas del caso ideal (superficies lisas); en particular, genera nuevas bandas prohibidas, lo cual es importante tomar en cuenta en la fabricación de Cristales Fotónicos que contengan LHMs dispersivo.

Palabras Clave: Cristales fotónicos, Metamaterial dispersivo, Computación en paralelo, Estructuras de bandas fotónicas, Método de la ecuación integral, Superficies aleatoriamente rugosas.

## ABSTRACT

In the present work we show a theoretical numerical study of the band structures of a 2D Photonic Crystal (CF2D) formed by a square unit cell with a cylindrical inclusion. The work is motivated largely by the need for a new alternative development in telecommunications technology that is purely photonic. We applied a numerical technique known as “Integral Equation Method” to calculate the band structures of a CF2D with a cylindrical inclusion that has a smooth surface or randomly rough surface and that includes dielectric or left-handed materials (LHM). These structures were analyzed in the case of transverse electric field polarization (TE) and the transverse magnetic field polarization (TM) varying the filling fractions. Because of the high computer time required to obtain the band structures for the cylindrical inclusion that has a randomly rough surface, there was a need to use the parallel computing under the protocol of MPI (Message Passing Interface). The results show that the random roughness in the cylindrical inclusion surface modifies significantly the band structures of the ideal case (smooth surfaces); in particular, it generates new bandgaps, which is important to consider in the manufacture of Photonic Crystals containing dispersive LHM.

**Keywords:** Photonic crystals, Metamaterial dispersive, Parallel computing, Photonic band structures, Integral equation method, Randomly rough surfaces.

# Dedicatorias

Mi dedicación especial en el presente trabajo de tesis está dirigida a mis padres Ofelia Díaz Pérez y Alfredo Puente Medina, por haberme dado el regalo de la vida, educarme y apoyarme en los momentos y circunstancias difíciles de mi vida.

También dedico este trabajo a mis tíos, Alicia Díaz Pérez, José Díaz Pérez y M. Ernesto Soria Marín que estuvieron con migo apoyandome y dandome consejos en el trascurso de mi formación.

Fraternalmente:

Luis Eduardo Puente Díaz

## Agradecimientos

El presente trabajo fue posible llevarlo a cabo, gracias a su arduo apoyo, a su incansable paciencia del Dr. Héctor Pérez Aguilar, quien con sus conocimientos, experiencia, correcciones y aportaciones dedicados a la realización de esta tesis se llegó hasta la meta; es por ello, que les doy mi más amplia gratitud.

A la coordinación de Investigación Científica de la UMSNH que me apoyo con una beca del proyecto de investigación 9.33.

Agradezco en forma especial a los integrantes de mi comité, quienes me hicieron las correcciones y observaciones de mi trabajo de tesis, me refiero al Dr. Mauricio Ortiz Gutiérrez, Dra. Karina Mariela Figueroa, M.C. Gabriel Arroyo y al Dr. Eduardo Tututi, quienes cordialmente aceptaron colaborar para la revisión de dicho trabajo y llegar hasta su objetivo final.

A la institución de educación, la Facultad de Ciencias Físico-Matemáticas, donde en su espacio fue mi segunda casa y fue la fuente donde adquirí los conocimientos más elementales para poder desarrollarme como profesionista y servir a la sociedad con principios y valores de rectitud, probidad, anteponiendo siempre los intereses de la sociedad a los personales; y en el aspecto académico obtuve los conocimientos integrales de la carrera que fueron aprendidos en sus aulas con la opción de elegir una actividad profesional llevando los principios y el valor de un Nicolaita, es por ello mi agradecimiento total a la máxima casa de estudios de nuestro estado, la U.M.S.N.H.

También me es propicio agradecer a todos y cada uno de los catedráticos en el transcurso de la carrera, quienes pusieron su mejor empeño para que un servidor tuviera los conocimientos necesarios de cada materia que ellos impartían, así como sus sabios consejos sobre la profesión y sobre la vida.

De igual forma deseo agradecer con mucho afecto y especial cariño a mi familia, padres, hermana, tíos y demás familiares quienes me dieron una palabra de aliento y me motivaron a seguir con mucho empeño en mis estudios. Para ellos, de corazón mi eterno agradecimiento.

Sinceramente:

Luis Eduardo Puente Díaz

# Contenido

	Página
<b>Resumen</b>	<b>i</b>
<b>Abstract</b>	<b>ii</b>
<b>Dedicatoria</b>	<b>iii</b>
<b>Agradecimientos</b>	<b>iv</b>
<b>Contenido</b>	<b>vi</b>
<b>Lista de Figuras</b>	<b>viii</b>
<b>I. INTRODUCCIÓN</b>	<b>1</b>
I.1. Estructura de la tesis . . . . .	7
<b>II. INTRODUCCIÓN A LOS METAMATERIALES</b>	<b>9</b>
II.1. Historia de los Metamateriales . . . . .	9
II.2. Metamateriales . . . . .	11
II.2.1. Respuesta eléctrica . . . . .	16
II.2.2. Respuesta magnética . . . . .	23
II.3. Aplicaciones de los Metamateriales . . . . .	27
<b>III. MÉTODO DE LA ECUACIÓN INTEGRAL</b>	<b>31</b>
III.1. Descripción del método de la ecuación integral . . . . .	31
III.1.1. Ecuación de onda . . . . .	32
III.1.2. Función de Green para la ecuación de Helmholtz . . . . .	35
III.1.3. Representación integral de la ecuación de Helmholtz . . . . .	36
III.1.4. Discretización de la Ecuación Integral . . . . .	38
III.2. Cálculo de las estructuras de bandas de un CF2D que contiene mate- riales dieléctricos . . . . .	44
III.2.1. Estructuras de bandas de un CF2D con inclusión cilíndrica de superficie lisa . . . . .	44
<b>IV. ESTRUCTURAS DE BANDAS DE CFS EN 2D QUE CONTIENEN LHM DISPERSIVO</b>	<b>47</b>
IV.1. Modelo de un medio con LHM dispersivo . . . . .	48
IV.2. Estructuras de bandas de un CF2D con inclusión cilíndrica que tiene una superficie lisa . . . . .	53
IV.3. Breve descripción del MPI . . . . .	57
IV.3.1. Conceptos básicos . . . . .	57

## Contenido (continuación)

	Página
IV.3.2. Arquitecturas de Memoria . . . . .	59
IV.3.3. Rutinas básicas de la programación con MPI . . . . .	61
IV.3.4. Rutinas básicas de envío y recepción de mensajes bloqueantes . . . . .	63
IV.3.5. Pseudocódigo para comunicación bloqueante . . . . .	65
IV.4. Estructuras de bandas de un CF2D con inclusión cilíndrica que tiene una superficie aleatoriamente rugosa . . . . .	68
<b>V. CONCLUSIONES</b>	<b>72</b>
<b>REFERENCIAS</b>	<b>75</b>



# Lista de Figuras

Figura		Página
1	Ejemplos de una estructura fotónica unidimensional (a), bidimensional (b) y tridimensional (c). En 1D se alternan láminas de alto y bajo índice de refracción. En 2D se muestra una estructura cuadrada de cilindros situados en un medio de distinto índice de refracción. En el ejemplo en 3D, la modulación del índice de refracción surge de ordenar las esferas en una estructura simple cúbica en un medio diferente. . . . .	3
2	Detalles que distingue una onda dependiendo de su longitud de onda. Si la estructura es mucho más pequeña que la longitud de onda, el medio se puede aproximar como continuo. . . . .	5
3	(a) Ejemplo de un solo cuadrado resonador de anillo de division. (b) Celda unitaria de un LHM. (c) Ejemplo de un lente de LHM. Cortesía del Centro de Investigación Glenn de la NASA. . . . .	11
4	En un medio con (a) $\varepsilon(\omega), \mu(\omega) > 0$ , $\mathbf{k}$ y $\mathbf{S}$ van en la misma dirección y con (b) $\varepsilon(\omega), \mu(\omega) < 0$ , van en direcciones opuestas. (c) Vectores $\mathbf{k}$ y $\mathbf{S}$ para una onda electromagnética que viaja de un medio derecho a uno izquierdo, la onda se refracta negativamente. . . . .	14
5	En los LHMs el flujo de energía y la velocidad de grupo se propagan hacia delante pero la velocidad de fase se propaga hacia atrás. . . . .	15
6	Metamaterial compuesto de tubos de metal con el que es posible obtener una respuesta eléctrica negativa. . . . .	21
7	Un resonador de anillo cortado es como un circuito LC. . . . .	24
8	a) SRR doble, b) meta-átomo compuesto por un tubo metálico y un SSR doble. . . . .	25
9	Gráfica que muestra la potencia normalizada como función del ángulo para el LHM y un medio control hecho de Teflón. . . . .	27
10	Lente de índice de Gradiente hechas por Duke en 2009. . . . .	28
11	Imagen de LHM Holey. . . . .	28
12	(a) Una representación en 3-D de un satélite de comunicación compuesto de LHMs. (b) Revestimiento de LHM para el satélite de comunicacion. . . . .	29
13	Antena de LHM para uso de teléfonos celulares. . . . .	29

## Lista de Figuras (continuación)

Figura		Página
14	Arreglo de un SRRs compuesto de impresiones de plata sobre una extensión de polímero. . . . .	30
15	Diagrama de un cristal fotónico bidimensional infinito. La celda unitaria cuadrada de longitud $D$ está compuesta de dos materiales diferentes con constantes dieléctricas $\varepsilon_1(\omega)$ y $\varepsilon_2(\omega)$ . . . . .	33
16	Celda unitaria de un CF2D compuesto de dos materiales diferentes con índices de refracción $n_1(\omega)$ y $n_2(\omega)$ en una celda cuadrada con una inclusión de forma arbitraria con su vector normal $\hat{\mathbf{n}}$ perpendicular al contorno $\Gamma$ . . . . .	38
17	Celda unitaria de un CF2D con una red cuadrada y una inclusión de forma arbitraria compuesta por dos materiales diferentes con índices de refracción $n_1(\omega)$ y $n_2(\omega)$ . Los medios están limitados por los contornos $\Gamma_a, \Gamma_b, \Gamma_c, \Gamma_d$ y $\Gamma_e$ cuyos vectores normales van hacia afuera del medio 1, respectivamente. . . . .	39
18	Celda unitaria cuadrada de un CF2D con inclusión cilíndrica de superficie lisa. La fracción de llenado está relacionada con el radio de la inclusión cilíndrica como $R = \left(\sqrt{\frac{f}{\pi}}\right) D$ , donde el parámetro de red fue tomado como $D = 1$ . . . . .	44
19	Estructuras de bandas para un CF2D con inclusión cilíndrica para dos materiales distintos de constantes dieléctricas $\varepsilon_1 = 1$ y $\varepsilon_2 = 8.9$ , con una fracción de llenado de ((a) y (c)) $f = 0.12$ para la polarización TE y TM, respectivamente, ((b) y (d)) $f = 0.5$ para la polarización TE y TM, respectivamente. El recuadro izquierdo inferior es la celda unitaria en el espacio real y el recuadro derecho inferior corresponde a la primera zona de Brillouin en el espacio $k$ , respectivamente. . . . .	45
20	Función de la permitividad eléctrica y permeabilidad magnética de un LHM dispersivo como función de la frecuencia reducida. . . . .	49

## Lista de Figuras (continuación)

Figura	Página	
21	Estructuras de bandas de un CF2D con una celda unitaria cuadrada con inclusión cilíndrica compuesta por dos medios: vacío ( $\varepsilon_1 = 1$ , $\mu_1 = 1$ ) y LHM dispersivo ( $\varepsilon(\omega)$ y $\mu(\omega)$ ), con $\omega_p = 1.592$ , $\omega_0 = 0.637$ y $F = 0.56$ . Para el caso de la polarización TE con las fracciones de llenado (a) $f = 0.12$ y (b) $f = 0.36$ , (c) $f = 0.50$ y (d) $f = 0.68$ . El recuadro izquierdo representa la celda unitaria en el espacio real y el recuadro derecho corresponde a la primera zona de Brillouin en el espacio $k$ , respectivamente. . . . .	54
22	Estructuras de bandas de un CF2D con una celda unitaria cuadrada con inclusión cilíndrica compuesta por dos medios: vacío ( $\varepsilon_1 = 1$ , $\mu_1 = 1$ ) y LHM dispersivo ( $\varepsilon(\omega)$ y $\mu(\omega)$ ), con $\omega_p = 1.592$ , $\omega_0 = 0.637$ y $F = 0.56$ . Para el caso de la polarización TM con las fracciones de llenado (a) $f = 0.12$ y (b) $f = 0.36$ , (c) $f = 0.50$ y (d) $f = 0.68$ . El recuadro izquierdo representa la celda unitaria en el espacio real y el recuadro derecho corresponde a la primera zona de Brillouin en el espacio $k$ , respectivamente. . . . .	55
23	Modelo Maestro-Esclavo. El nodo con rango 0 actuará como “maestro” y los nodos con rangos 1 a $n - 1$ actuarán como “esclavos”. El nodo maestro enviará una tarea a cada nodo esclavo. . . . .	58
24	Memoria compartida por un conjunto de procesadores. . . . .	60
25	Estructuras de bandas de un CF2D con una celda unitaria cuadrada que tiene una inclusión cilíndrica con una superficie aleatoriamente rugosa compuesta por dos medios; vacío ( $\varepsilon_1 = 1$ , $\mu_1 = 1$ ) y LHM dispersivo ( $\varepsilon(\omega)$ y $\mu(\omega)$ ), con $\omega_p = 1.592$ , $\omega_0 = 0.637$ y $F = 0.56$ . Para el caso de la polarización TE con las fracciones de llenado (a) $f = 0.12$ , (b) $f = 0.36$ , (c) $f = 0.50$ y (d). El recuadro izquierdo representa la celda unitaria en el espacio real y el recuadro derecho corresponde a la primera zona de Brillouin en el espacio $k$ , respectivamente. . . . .	69
26	Estructuras de bandas de un CF2D con una celda unitaria cuadrada que tiene una inclusión cilíndrica con una superficie aleatoriamente rugosa compuesta por dos medios; vacío ( $\varepsilon_1 = 1$ , $\mu_1 = 1$ ) y LHM dispersivo ( $\varepsilon(\omega)$ y $\mu(\omega)$ ), con $\omega_p = 1.592$ , $\omega_0 = 0.637$ y $F = 0.56$ . Para el caso de la polarización TM con las fracciones de llenado (a) $f = 0.12$ , (b) $f = 0.36$ , (c) $f = 0.50$ y (d) $f = 0.68$ . El recuadro izquierdo representa la celda unitaria en el espacio real y el recuadro derecho corresponde a la primera zona de Brillouin en el espacio $k$ , respectivamente. . . . .	71

# Capítulo I

---

## INTRODUCCIÓN

---

Muchos de los avances en tecnología han provenido del conocimiento profundo de las propiedades de los materiales. Más allá del aprovechamiento de las características con las que nos provee la naturaleza, la ingeniería ha alcanzado hoy en día una cota de desarrollo en la que podemos, partiendo de los materiales existentes, diseñar y producir sustancias y elementos cuyas propiedades pueden ser debidamente ajustadas.

Actualmente disponemos de un amplio abanico de materiales artificiales cuyas propiedades mecánicas pueden ser ajustadas a un diseño dado, gracias en gran parte al desarrollo de la industria metalúrgica, de la cerámica y de la industria del plástico. Del mismo modo, durante el último siglo, los investigadores han estado trabajando para poder controlar las propiedades eléctricas de los materiales. Por otro lado, los avances de la industria de los semiconductores han permitido revolucionar el mundo de la electrónica y las comunicaciones, a partir del desarrollo de dispositivos como es el transistor.

En las dos últimas décadas, por otra parte, ha surgido una nueva frontera de desarrollo para poder controlar las propiedades ópticas de los materiales. Si somos capaces de realizar materiales que impidan la propagación de ciertas ondas electromagnéticas, con una cierta longitud de onda, o que permitan su transmisión pero solamente en

unas determinadas direcciones del espacio, o si somos capaces de atrapar y localizar dichas ondas en una región concreta del espacio, entonces seremos capaces de controlar y prever el comportamiento de dichas señales. Este desarrollo tecnológico seguirá su avance.

Pero, ¿qué clase de materiales nos permiten controlar la propagación de las señales ópticas? Para obtener una respuesta a la pregunta, es conveniente repasar ciertos detalles sobre aquellos materiales cuyas propiedades eléctricas, como ya hemos comentado, puedan ser controladas. Un cristal es una disposición periódica de átomos o moléculas; es decir, un cristal se forma cuando un elemento básico de la estructura se repite en el espacio ordenado y periódicamente. A causa de esta ordenación, un cristal presenta un potencial periódico para la propagación de electrones a través del mismo, y es precisamente esta geometría periódica la que determina la mayor parte de las propiedades conductivas del material.

El equivalente óptico del cristal semiconductor es el cristal fotónico (CF) (Joannopoulos *et al.*, 2008). En este tipo de cristales, el potencial periódico en los semiconductores es equivalente a una variación periódica de la constante dieléctrica a lo largo del CF. Si esta variación de la constante dieléctrica en el interior de la estructura es lo suficientemente grande, y la absorción del material a la longitud de onda a la que pretendemos trabajar lo suficientemente pequeña, entonces aparecen (para la propagación de los fotones) muchas de esas mismas propiedades que los cristales semiconductores determinan para la propagación de los electrones.

De este modo, una solución para el diseño de materiales con nuevas e inusuales propiedades ópticas es el CF, un material de constante dieléctrica variable, periódica y ordenada, de bajas pérdidas por absorción, y que permita introducir gaps (es decir, bandas prohibidas) en determinadas zonas del espectro en las cuales se prohíba la

propagación de ondas con determinada frecuencia. Cuando la radiación electromagnética incide sobre la superficie del CF o es emitida desde su interior, la interferencia entre las distintas ondas reflejadas en cada interfaz entre los medios de constante dieléctrica variable da lugar a que ciertos rangos de frecuencias no puedan transmitirse en el cristal. Dicho de otro modo, para esas energías no hay estados disponibles en el interior del material y son, por lo tanto, prohibidas. El valor de las constantes dieléctricas y el periodo espacial de su variación del CF determinan la posición y anchura de las bandas prohibidas. Así, por ejemplo, modulaciones periódicas en distancias del orden del milímetro o del micrómetro darán lugar a bandas prohibidas en el rango de las microondas o el infrarrojo, respectivamente. Por esta razón, los cristales fotónicos (CFs) que constituyen arreglos periódicos de diferentes materiales en una, dos y tres dimensiones con celdas unitarias, cuyas magnitudes son del orden de la longitud de onda de la luz (Ver Fig. 1), han sido el objeto de investigación en los últimos años debido a su potencial para desarrollar circuitos integrados completamente ópticos (Teo *et al.*, 2006).

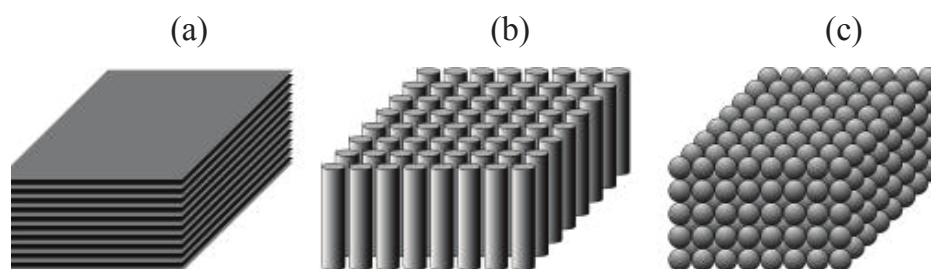


Figura 1. Ejemplos de una estructura fotónica unidimensional (a), bidimensional (b) y tridimensional (c). En 1D se alternan láminas de alto y bajo índice de refracción. En 2D se muestra una estructura cuadrada de cilindros situados en un medio de distinto índice de refracción. En el ejemplo en 3D, la modulación del índice de refracción surge de ordenar las esferas en una estructura simple cúbica en un medio diferente.

En los últimos años se ha demostrado que la adición de nuevos materiales para la estructura de los CFs ha dado nuevas propiedades en estos sistemas que fueron original-

mente concebidos como la composición de materiales puramente dieléctricos. Algunas de las propiedades muy interesantes presentes en estos sistemas son el confinamiento de la luz (Mengens *et al.*, 1999), guías de ondas (Li *et al.*, 2006), la refracción negativa (Yuntuan *et al.*, 2006) y la conmutación de la señal mediante la inclusión de defectos de materiales no lineales (Soljagic *et al.*, 2005).

Otros tipos de estructuras de materiales que han atraído mucho interés recientemente son los “Metamateriales” o “Materiales Izquierdos” (LHMs<sup>1</sup>) (Veselago, 1968), que deben su nombre al hecho de que los vectores de luz  $\mathbf{E}$ ,  $\mathbf{H}$  y  $\mathbf{k}$  forman una tríada de vectores ortogonales con una orientación Izquierda para una onda que se propaga a través de estos medios. Estos materiales artificiales tienen un índice de refracción negativo dentro de un rango dado del espectro electromagnético. Cabe mencionar que estos materiales no existen en la naturaleza; sin embargo, se pueden construir cumpliendo las propiedades previamente mencionadas. Algunos de los fenómenos ópticos bien conocidos presentan variaciones que los hacen potencialmente útiles para nuevas aplicaciones tecnológicas, como por ejemplo la refracción negativa, la invisibilidad y la transmisión de información (Cui *et al.*, 2010).

Los LHMs son materiales fabricados artificialmente y, en principio, pueden ser diseñados para tener casi cualquier propiedad óptica que deseemos. Para que esto funcione se necesita que la unidad de estructura sea mucho más pequeña que el tamaño de la onda (la longitud de onda) de modo que, al propagarse, la luz no distinga los detalles de la estructura y “vea” un medio continuo (ver Fig. 2). En este caso, la estructura forma un medio efectivo que se puede describir como un material ordinario. A pesar de que esta nueva tecnología ha tenido un gran desarrollo, los LHMs siguen enfrentando mu-

---

<sup>1</sup>Por sus siglas en inglés, Left-Handed Metamaterials.

chos retos y probablemente pasen todavía muchos años antes de que podamos apreciar su verdadero impacto tecnológico.

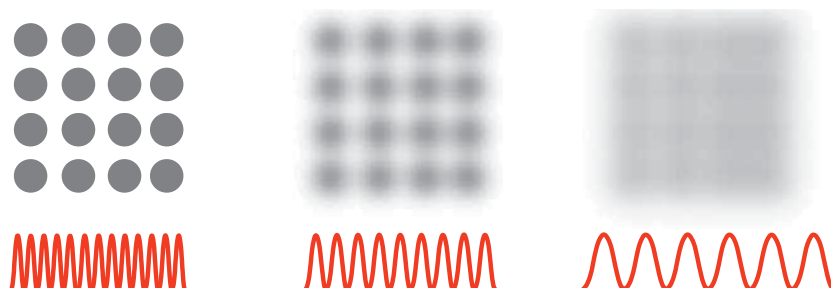


Figura 2. Detalles que distingue una onda dependiendo de su longitud de onda. Si la estructura es mucho más pequeña que la longitud de onda, el medio se puede aproximar como continuo.

La disciplina de los LHMs empezó a desarrollarse en los años noventa, pero el interés en esta nueva tecnología se disparó en el año 2000, cuando un LHM con índice de refracción negativo —una propiedad óptica que no se encuentra en la naturaleza— fue propuesto y construido por un grupo encabezado por David R. Smith (Smith *et al.*, 2000) en la Universidad de California en San Diego. Detrás de esta propuesta también estaba el propio J. B. Pendry cuyas contribuciones habían sido fundamental para establecer las bases teóricas detrás del diseño de los LHMs. Smith y Pendry, en colaboración con David Schuring, construyeron posteriormente (2006) la primera capa de invisibilidad para microondas (Smith *et al.*, 2006), confirmando que, en principio, construir una capa de invisibilidad era posible. Estos primeros diseños “perfectos”, resultan extremadamente difíciles de construir (la capa construida en 2006 era solamente un prototipo aproximado). En 2008, J. Li y J. B. Pendry propusieron un medio más simple que podría funcionar en circunstancias más restrictivas para los detalles de este diseño (Li y Pendry, 2008). En 2009, a partir de este diseño, se realizaron dos experimentos (en la Universidad Cornell y en la Universidad de California en Berkeley) en los que se construyeron capas de invisibilidad para el infrarrojo cercano (Gabrielli



*et al.*, 2009; Valentine *et al.*, 2009), y, posteriormente (Berkeley, 2011), para luz visible (Gharghi *et al.*, 2011). A pesar de estos grandes avances, una capa de invisibilidad como las que se ven comúnmente en producciones de Hollywood está probablemente todavía muy lejana.

Para poder abordar estas líneas de investigación novedosas que tienen trascendencia en el medio internacional, se requiere dominar no sólo los aspectos teóricos si no también el modelaje. Así, el estudio de la propagación de la luz en CFs se basa en métodos numéricos que se aplicaron primero en física del estado sólido para el estudio de estructuras de bandas electrónicas. El más citado puede ser el método de ondas planas (García *et al.*, 2007) que permite calcular las estructuras de bandas fotónicas que implican materiales sin dispersión y absorción. Una desventaja de este método es cuando los bordes afilados están presentes en las inclusiones de la celda unitaria y la expansión de la función dieléctrica, en términos de una serie de Fourier truncada, presenta problemas de convergencia aumentando los requisitos de memoria. Además de un alto contraste entre las propiedades de los materiales que componen, también el método produce cierta inestabilidad en las soluciones. Bajo este contexto, el método integral que estamos considerando en este trabajo (Mendoza-Suárez *et al.*, 2007), presenta algunas ventajas en comparación con el método de ondas planas y otros métodos, ya que tiene la capacidad de estudiar diferentes aspectos de CF2D que involucran geometrías complicadas (superficies aleatoriamente rugosas) y propiedades físicas muy novedosas, como las correspondientes de los LHMs dispersivos.

En la actualidad, gracias a los métodos numéricos es posible modelar ciertos problemas en pocos minutos. Sin embargo, problemas reales y más complejos donde su ejecución requiere muchas horas de cálculo e incluso varios días, es necesario buscar nuevas alternativas basadas en multiprocesamiento, que pueda procesar grandes volúmenes de

datos en forma simultánea. Una solución alternativa es la programación en paralelo, que consiste en la posibilidad de dividir un determinado problema en partes que puedan resolverse de forma independiente.

El interés de este trabajo es poder obtener las estructuras de bandas de un CF2D con superficies aleatoriamente rugosas que contienen medios de LHM y de dieléctrico en una celda unitaria mediante la aplicación de un método numérico conocido como el Método de la Ecuación Integral basado en la segunda identidad de Green para resolver la ecuación de Helmholtz. Para obtener dichas estructuras de bandas del sistema propuesto, se requiere elevado tiempo computacional, por lo cual, hemos tenido la necesidad de utilizar la computación en paralelo con las librerías MPI (Message Passing Interface) FORTRAN, sobre los procesadores de la CPU para reducir el tiempo de cálculo mejorando el rendimiento de cómputo.

## I.1. Estructura de la tesis

Este trabajo de tesis está desarrollado de la siguiente manera.

En el capítulo II se da una definición general de los LHMs y se mencionan características de estos materiales artificiales. Se muestran las funciones que nos dan las propiedades ópticas de los LHMs como son la función dieléctrica y la permeabilidad magnética, las cuales son usadas para modelar numéricamente el comportamiento de estos materiales. Por último, se mencionan algunas aplicaciones.

En el capítulo III se da una descripción del método numérico, conocido como el Método de la Ecuación Integral (Mendoza-Suárez *et al.*, 2007), que utilizaremos para obtener las estructuras de bandas de un CF2D con superficies aleatoriamente rugosas que contienen LHM en una celda unitaria. Este método parte del segundo teorema integral de Green, donde se obtiene un par de ecuaciones integrales con las cuales se

pueden determinar las estructuras de bandas en términos de un par de funciones fuente. Dichas funciones fuente están definidas por el campo magnético y su derivada normal, para el caso de la polarización TM, y por el campo eléctrico y su derivada normal, para la polarización TE, evaluados en la superficie de la celda cuadrada con una inclusión que tiene superficies aleatoriamente rugosas. En la última sección de este capítulo se muestran algunas estructuras de bandas, aplicando el Método de la Ecuación Integral, para un CF2D compuesto de una celda unitaria cuadrada con una inclusión cilíndrica de superficie lisa con un material dieléctrico.

En el capítulo IV se aplica el método descrito en el capítulo III al problema de interés de esta tesis de investigación. En este capítulo presentamos los resultados numéricos de las estructuras de bandas para un CF2D con superficies suaves y aleatoriamente rugosas que contienen LHM en la inclusión cilíndrica de una celda unitaria cuadrada. Para el caso de inclusiones cilíndricas con superficies aleatoriamente rugosas hubo la necesidad de utilizar la computación en paralelo bajo el protocolo de MPI debido al gran tiempo de cómputo requerido para obtener las estructuras de bandas. Por esta razón, se da una breve descripción de la computación en paralelo.

En el capítulo V se dan las conclusiones principales de esta tesis.

## Capítulo II

---

# INTRODUCCIÓN A LOS METAMATERIALES

---

En este capítulo se presenta una breve historia de los LHMs, así como las propiedades que los caracterizan. Se da una definición general de los LHMs y se hace un análisis sobre modelos experimentales creados para obtener una respuesta eléctrica y magnética que cumplan con las propiedades de los LHMs con el objetivo de obtener un par de funciones que nos permitan modelar numéricamente las propiedades ópticas de los LHMs. Por último se mencionan algunas aplicaciones de dichos materiales artificiales.

### II.1. Historia de los Metamateriales

Durante las últimas décadas, una nueva clase de materiales creados artificialmente, conocidos como Metamateriales, han recibido considerable atención tanto en la física como en la ingeniería. Esto es debido a que los Metamateriales pueden ofrecer propiedades electromagnéticas que son difíciles o imposibles de lograr con materiales convencionales de origen natural. Actualmente, no se ha encontrado ningún medio natural que presente índice de refracción negativo como es el caso de los Metamateriales. Un medio de este tipo es llamado Metamaterial “Izquierdo”. El primer término fue aplicado por Veselago

en 1968 (Veselago, 1968), debido a que el vector de onda  $\mathbf{k}$ , el vector de campo eléctrico  $\mathbf{E}$  y el vector de campo magnético  $\mathbf{H}$  forman una tríada de vectores ortogonales con una orientación Izquierda. En su trabajo pionero (Veselago, 1968), Veselago señaló que los Metamateriales Izquierdos (LHMs) tienen simultáneamente permitividad y permeabilidad negativa, lo que permite tener un medio con índice de refracción negativo, para algunas frecuencias de onda de excitación común y algunas propiedades únicas de los LHMs, por ejemplo, el efecto inverso de Snell, el inverso desplazamiento Doppler y la radiación de Cherenkov inversa. Sin embargo, su idea fue olvidada debido a que en ese momento, el equipo necesario para la fabricación de dichos materiales no existía.

En 1999, (Pendry *et al.*, 1999) demostró que materiales con arreglos de resonadores de anillos cortados (SRRs) producen permeabilidad negativa sobre ciertas bandas de frecuencia. Combinando un arreglo bidimensional (2D) de SRRs intercalados con un arreglo 2D de barras metálicas (Pendry *et al.*, 1996; Shalaev y Cai., 2002), dan permitividad negativa, permitiendo así la construcción de los LHMs. En el 2000 el Dr. Smith (Smith *et al.*, 2000), demostró por primera vez la existencia experimental de los LHMs, construyendo el primer medio negativo en la Universidad de California en San Diego. El SSR y la primera celda unitaria de un LHM creados por el Dr. Smith y su grupo de la Universidad de California en San Diego son mostradas en las Figs. 3(a) y (b), y en la Fig. 3(c) se muestra una estructura periódica de estas celdas la cual representa una placa de LHM.

A pesar de esta evidencia y otros experimentos subsecuentes, debemos mencionar que los materiales con índice negativo han sido objeto de polémica desde el momento en el que fueron propuestos. Aunque algunas voces críticas permanecen, el consenso general es que la refracción negativa tiene sentido y que es un fenómeno que vale la pena seguir explorando.

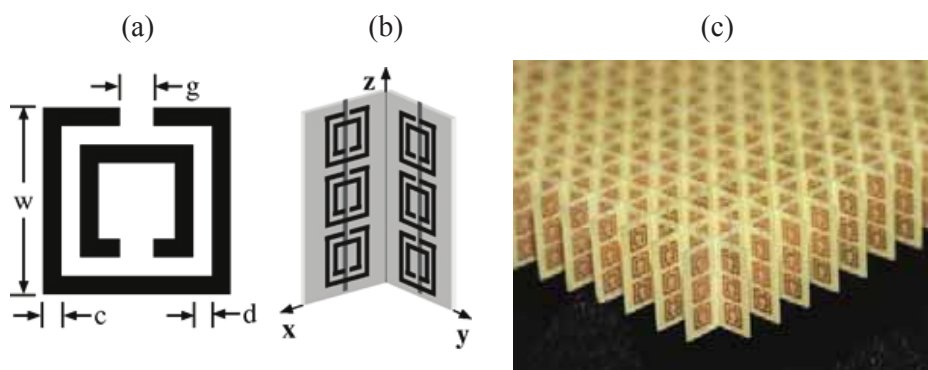


Figura 3. (a) Ejemplo de un solo cuadrado resonador de anillo de division. (b) Celda unitaria de un LHM. (c) Ejemplo de un lente de LHM. Cortesía del Centro de Investigación Glenn de la NASA.

## II.2. Metamateriales

Todos los materiales pueden ser ampliamente definidos por sus propiedades particulares. Estas propiedades, en principio, pueden tomar cualquier valor, y no esperamos que se presenten en los materiales que encontramos en la naturaleza. Esta enorme dificultad promete ser superada con el continuo desarrollo de los llamados Metamateriales. Estos materiales permitirán construir artificialmente medios materiales que tendrían casi cualquier propiedad que deseemos. Como la disciplina de los Metamateriales está todavía en desarrollo, no existe aún una definición que sea aceptada universalmente. Se tomará la definición que propone Vladimir Shalaev, uno de los pioneros de esta nueva rama de la física (Shalaev y Cai., 2010):

“Un Metamaterial es un material estructurado artificialmente, que puede ser periódico o no periódico, que obtiene sus propiedades, no directamente de los materiales que lo constituyen (por ejemplo, la composición química del material), sino a partir de una unidad de estructura. Un Metamaterial tiene una escala mucho más pequeña que la longitud de onda de interés y su respuesta electromagnética se expresa en términos de parámetros de los

materiales como por ejemplo: la permitividad, la permeabilidad y el índice de refracción”.

Como ya se mencionó, los Metatmateriales también son conocidos como “Materiales Izquierdos” (LHMs), los cuales se caracterizan por tener índice de refracción negativo. Recordando que el índice de refracción está dado como  $n^2 = \varepsilon(\omega)\mu(\omega)$ , donde  $\omega$  es la frecuencia de la onda. Si tuviéramos propiedades de signo opuesto ( $\varepsilon(\omega)\mu(\omega) < 0$ ) el índice sería puramente imaginario y no habría propagación de la onda electromagnética. Por otro lado, cuando ambas cantidades tienen el mismo signo ( $\varepsilon(\omega)\mu(\omega) > 0$ ), por otro lado, tenemos un medio transparente que propaga radiación electromagnética. Si las propiedades de los materiales son positivas, el índice de refracción debe ser positivo, y si tenemos cantidades negativas debemos tomar el signo negativo. Este hecho es una consecuencia directa de las ecuaciones de Maxwell.

Consideremos las dos ecuaciones de Maxwell correspondientes a la ley de Faraday y la ley de Ampere, respectivamente, en su forma diferencial para un medio libre sin cargas ni corrientes, cuya permitividad eléctrica  $\varepsilon(\omega)$  y permeabilidad magnética  $\mu(\omega)$  dependen de la frecuencia  $\omega$ ,

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\mu(\omega) \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t}, \quad (1)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = \varepsilon(\omega) \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}, \quad (2)$$

donde  $\mathbf{E}$  y  $\mathbf{H}$  son los campos eléctrico y magnético, respectivamente. Recordemos que las ecuaciones constitutivas de los campos eléctrico y magnético para materiales lineales están dadas como:

$$\mathbf{D} = \varepsilon(\omega) \mathbf{E}, \quad (3)$$

$$\mathbf{B} = \mu(\omega) \mathbf{H}, \quad (4)$$

donde  $\mathbf{D}$  y  $\mathbf{B}$  son los campos de desplazamiento eléctrico e inducción magnética, respectivamente.

Considerando la exponencial compleja para una onda plana armónica,

$$\exp i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t), \quad (5)$$

se tiene que la derivada con respecto al tiempo es

$$\frac{\partial(\exp i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t))}{\partial t} = -i\omega \exp i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t). \quad (6)$$

Ahora calculando la derivada parcial con respecto a una de las variables del espacio; por ejemplo,  $x$ , se obtiene:

$$\frac{\partial(\exp i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t))}{\partial x} = \frac{\partial(\exp i(k_x x + k_y y + k_z z - \omega t))}{\partial x} = ik_x \exp i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t). \quad (7)$$

De ahí que, en la aplicación del operador nabla dado por:

$$\nabla = \hat{i} \frac{\partial}{\partial x} + \hat{j} \frac{\partial}{\partial y} + \hat{k} \frac{\partial}{\partial z}, \quad (8)$$

se deduce fácilmente que

$$\nabla(\exp i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)) = i\mathbf{k} \exp i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t). \quad (9)$$

Por lo tanto, tenemos las siguientes relaciones de operadores

$$\frac{\partial}{\partial t} \longrightarrow -i\omega, \quad (10)$$

$$\nabla \longrightarrow i\mathbf{k}. \quad (11)$$

Aplicando los operadores dados por las Ecs. (10) y (11) en las Ecs. (1) y (2), obtenemos

$$\mathbf{k} \times \mathbf{E} = \omega\mu(\omega)\mathbf{H}, \quad (12)$$

$$\mathbf{k} \times \mathbf{H} = -\omega\varepsilon(\omega)\mathbf{E}. \quad (13)$$



Así, de estas expresiones se tiene que  $\mathbf{k}$ ,  $\mathbf{E}$ ,  $\mathbf{H}$  forman una tríada de vectores ortogonales. La orientación –derecha o izquierda– de la tríada de vectores depende del signo de las propiedades del material como se puede ver en la Fig. 4. Si ambas son positivas ( $\varepsilon(\omega), \mu(\omega) > 0$ ) tenemos una tríada derecha y si ambas son negativas ( $\varepsilon(\omega), \mu(\omega) < 0$ ) tenemos una tríada izquierda. Como el vector de Poynting está dado por  $\mathbf{S} = \mathbf{E} \times \mathbf{H}$ , entonces la tríada ortogonal  $\mathbf{S}$ ,  $\mathbf{E}$ ,  $\mathbf{H}$  siempre es derecha, y, por tanto, cuando  $\varepsilon, \mu < 0$ , tiene la orientación opuesta a  $\mathbf{k}$ ,  $\mathbf{E}$ ,  $\mathbf{H}$ . Esto se traduce en que  $\mathbf{S}$  y  $\mathbf{k}$  son antiparalelos dentro del medio con índice de refracción negativo. Este comportamiento debe implicar que el medio negativo “regresa” el avance de la fase (los frentes de onda), y esto, a su vez, debe traducirse en que la fase viaja en dirección contraria a la propagación de los rayos de luz, dada por el vector de Poynting.

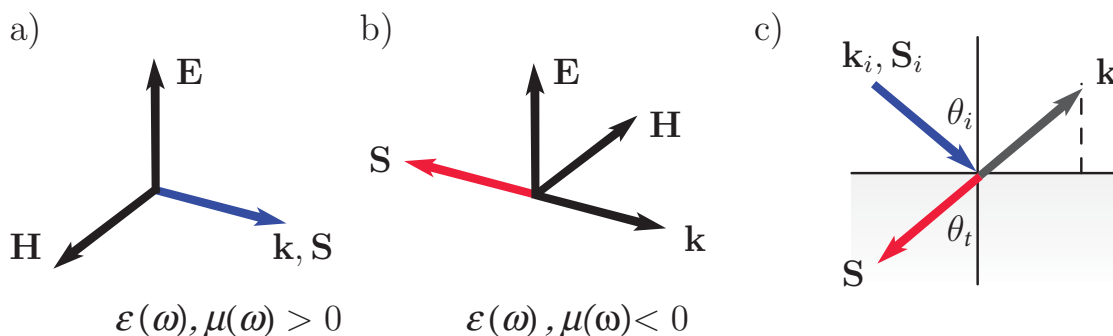


Figura 4. En un medio con (a)  $\varepsilon(\omega), \mu(\omega) > 0$ ,  $\mathbf{k}$  y  $\mathbf{S}$  van en la misma dirección y con (b)  $\varepsilon(\omega), \mu(\omega) < 0$ , van en direcciones opuestas. (c) Vectores  $\mathbf{k}$  y  $\mathbf{S}$  para una onda electromagnética que viaja de un medio derecho a uno izquierdo, la onda se refracta negativamente.

Cuando la onda electromagnética incide desde el vacío en un medio negativo, la componente paralela de  $\mathbf{k}$  debe conservarse (este hecho es una consecuencia de la continuidad de la fase (Griffiths, 1999)) y  $\mathbf{S}$  debe alejarse de la frontera, por lo que el vector de Poynting se refracta en el tercer cuadrante (ver Fig. 4(c)) en lugar de en el cuarto cuadrante como en el caso ordinario. Ese fenómeno se conoce como refracción negativa. Notemos también de la Fig. 4(c) que, como los rayos de la onda electromagnética van

en dirección del vector de Poynting, se conserva la misma ley de la refracción,

$$n_i \sin \theta_i = n_t \sin \theta_t, \quad (14)$$

$$\sin \theta_i = \frac{n_t}{n_i} \sin \theta_t = n_{it} \sin \theta_t, \quad (15)$$

o bien,

$$\sin \theta_i = n \sin \theta_t, \quad (16)$$

con el índice de refracción ( $n$ ) negativo cuando  $\varepsilon(\omega), \mu(\omega) < 0$ .

En un LHM la velocidad de fase en términos del índice de refracción está dado por la expresión  $v_p = c/n(\omega)$ , donde  $c$  es la velocidad de la luz en el vacío y  $n(\omega)$  es el índice de refracción negativo ( $n(\omega) < 0$ ). En esta expresión, se puede ver que  $v_p$  tiene un valor negativo, por lo que la velocidad de fase está en la dirección opuesta al flujo de energía; es decir, en el sentido de que el flujo de energía sale de la fuente y en la onda con una velocidad de fase apuntando hacia atrás como se muestra en la Fig. 5.

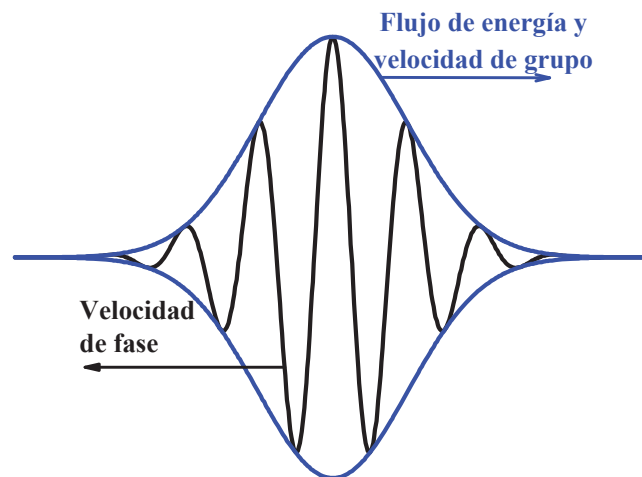


Figura 5. En los LHMs el flujo de energía y la velocidad de grupo se propagan hacia delante pero la velocidad de fase se propaga hacia atrás.

### II.2.1. Respuesta eléctrica

Debido a que los átomos y moléculas no siempre le pueden “seguir el paso” a los campos, la respuesta del medio, en general, es función de la frecuencia de oscilación de los campos. Así definamos a  $\varepsilon$  y  $\mu$  en el espacio de frecuencias y no como funciones del tiempo.

Consideremos LHMs que incluyen inclusiones metálicas, las cuales son altamente disipadoras. En los metales, los electrones de conducción no están asociados a ningún átomo o molécula en particular; sin embargo, se pueden modelar como partículas libres. Debido a la inercia de la conducción de electrones, no podemos usar simplemente  $\mathbf{J} = \sigma \mathbf{E}$  (Ley de Ohm) para la densidad de corriente, donde  $\sigma$  es la conductividad estática. Sino que debemos considerar el movimiento de los electrones bajo la acción del campo eléctrico alternante de la onda de luz.

Dado que los electrones de conducción no están ligados, no hay ninguna fuerza de restauración elástica y por lo tanto la ecuación diferencial del movimiento de electrones está dada por:

$$m \frac{d\mathbf{v}}{dt} + m\tau^{-1}\mathbf{v} = -e\mathbf{E}, \quad (17)$$

donde  $\mathbf{v}$  es la velocidad del electrón,  $e$  es la carga del electrón y  $m\tau^{-1}$  es la constante de dispersión de fricción. Esta constante está relacionada con la conductividad estática de la forma  $m\tau^{-1} = (1/\sigma)(n_e e^2)$ , donde  $n_e$  es el número de electrones de conducción por unidad de volumen (densidad volumétrica).

Por otro lado, tenemos que la densidad de carga está dada por

$$\mathbf{J} = -n_e e \mathbf{v}. \quad (18)$$

Despejando  $\mathbf{v}$  de la Ec. (18) y sustituyéndola en la Ec. (17), se tiene que

$$\frac{d\mathbf{J}}{dt} + \tau^{-1}\mathbf{J} = \frac{n_e e^2}{m} E. \quad (19)$$

Así, el decaimiento de una corriente transitoria está regida por la ecuación homogénea asociada

$$m \frac{d\mathbf{J}}{dt} + \tau^{-1} \mathbf{J} = 0, \quad (20)$$

cuya solución es  $\mathbf{J} = \mathbf{J}_0 \exp(-t/\tau)$ . Por lo que una corriente transitoria decaerá por  $e^{-1}$  para un valor inicial en un tiempo  $\tau$ . Este parámetro es llamado el tiempo de relajación.

Para un campo eléctrico estático, la Ec. (19) se reduce en

$$\mathbf{J} = \left( \frac{n_e e^2}{m} \tau \right) \mathbf{E}, \quad (21)$$

y así, la conductividad estática  $\sigma$  está dada por

$$\sigma = \frac{n_e e^2}{m} \tau. \quad (22)$$

Supongamos ahora una dependencia armónica del tiempo  $e^{-i\omega t}$  para el campo eléctrico  $\mathbf{E}$  y la corriente resultante  $\mathbf{J}$  en la Ec. (19). Entonces, se tiene que

$$(-i\omega + \tau^{-1})\mathbf{J} = \frac{n_e e^2}{m} \mathbf{E} = \tau^{-1} \sigma \mathbf{E}. \quad (23)$$

Resolviendo la Ec. (23) para  $\mathbf{J}$ , se obtiene

$$\mathbf{J} = \frac{\sigma}{(1 - i\omega\tau)} \mathbf{E}. \quad (24)$$

Ahora consideremos las ecuaciones de Maxwell para los campos  $\mathbf{E}$  y  $\mathbf{H}$  macroscópicamente promediados y medios no magnéticos; es decir, la magnetización,  $\mathbf{M}$ , y la densidad volumétrica de carga eléctrica  $\rho$  son ambos cero, dadas por

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\mu_0 \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t}, \quad (25)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = \varepsilon_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{P}}{\partial t} + \mathbf{J}, \quad (26)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = -\frac{1}{\varepsilon_0} \nabla \cdot \mathbf{P}, \quad (27)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{H} = 0. \quad (28)$$

Al aplicar el rotacional a la Ec. (25), se tiene que

$$\nabla \times (\nabla \times \mathbf{E}) = -\mu_0 \nabla \times \left( \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} \right), \quad (29)$$

$$\nabla(\nabla \cdot \mathbf{E}) - \nabla^2 \mathbf{E} = -\mu_0 \frac{\partial}{\partial t} (\nabla \times \mathbf{H}), \quad (30)$$

que al sustituir la Ec. (26) en la Ec. (30) y usando la relación  $1/c^2 = \mu_0 \varepsilon_0$ , se obtiene la ecuación de onda del campo eléctrico

$$\nabla^2 \mathbf{E} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} = \mu_0 \frac{\partial^2 \mathbf{P}}{\partial t^2} + \mu_0 \frac{\partial \mathbf{J}}{\partial t}. \quad (31)$$

Los dos términos del lado derecho de la ecuación anterior se llaman términos fuente. Se derivan de la presencia de cargas de polarización y cargas de conducción dentro del medio, respectivamente. La forma en que la propagación de la luz se ve afectada por las fuentes se puede ver de la solución de la ecuación de onda cuando se incluyen los términos fuente. En el caso de medios no conductores, el término de polarización  $\mu_0 \frac{\partial^2 \mathbf{P}}{\partial t^2}$  es de importancia. Resulta que este término conduce a la explicación de muchos efectos ópticos, incluyendo la dispersión, la absorción, la doble refracción y la actividad óptica, por mencionar sólo algunos. En el caso de los metales el término de conducción  $\mu_0 \frac{\partial \mathbf{J}}{\partial t}$  es relevante, mientras que el término de polarización  $\mu_0 \frac{\partial^2 \mathbf{P}}{\partial t^2}$  se puede despreciar debido a que en este caso los electrones de conducción no están ligados, es decir, no hay ninguna fuerza de restauración elástica como la habría en el caso de medios no conductores. Así, las soluciones resultantes de la ecuación de onda explican la gran opacidad y alta reflectancia de los metales.

Por tanto, la ecuación de onda para medios que incluyan inclusiones metálicas se puede expresar de la siguiente forma:

$$\nabla^2 \mathbf{E} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} + \mu_0 \frac{\partial \mathbf{J}}{\partial t}. \quad (32)$$

Usando la expresión dinámica para  $\mathbf{J}$ , dada por la Ec. (24), en la ecuación de onda

Ec (32), se obtiene

$$\nabla^2 \mathbf{E} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} + \frac{\mu_0 \sigma}{(1 - i\omega\tau)} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}. \quad (33)$$

Para resolver la Ec. (33) proponemos un campo eléctrico

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 e^{i(Kz - \omega t)}, \quad (34)$$

que representa una onda armónica plana. Sustituyendo directamente la Ec. (34) en la Ec. (33) se puede mostrar que esta es una solución, siempre que

$$K^2 = \frac{\omega^2}{c^2} + \frac{i\omega\mu_0\sigma}{1 - i\omega\tau}. \quad (35)$$

La presencia del término imaginario en el denominador implica que el número de onda  $K$  debe ser un número complejo. Expresemos  $K$  en términos de la parte real e imaginaria como:

$$K = k + i\alpha. \quad (36)$$

Esto es equivalente a introducir un índice de refracción complejo,

$$\mathcal{N} = n + i\kappa, \quad (37)$$

por lo que

$$K = \frac{\omega}{c} \mathcal{N}. \quad (38)$$

Entonces, la solución dada por la Ec. (34), se puede escribir como:

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 e^{-\alpha z} e^{i(kz - \omega t)}. \quad (39)$$

El factor  $e^{-\alpha z}$  indica que la amplitud de la onda decrece exponencialmente con la distancia. Esto significa que a medida que la onda avanza, la energía de la onda es absorbida por el medio. La parte imaginaria  $\kappa$  del índice de refracción complejo es

conocido como el índice de excitación. Los dos números  $\alpha$  y  $\kappa$  están relacionados por la expresión

$$\alpha = \frac{\omega}{c}\kappa. \quad (40)$$

De las Ecs. (35) y (38) se obtiene:

$$\mathcal{N}^2 = (n + i\kappa)^2 = 1 + \frac{i\mu_0\sigma c^2}{\omega - i\omega^2\tau}, \quad (41)$$

$$= 1 - \frac{\mu_0\sigma c^2}{\tau(i\omega\tau^{-1} + \omega^2)}, \quad (42)$$

$$= 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\omega\tau^{-1}}. \quad (43)$$

Se introdujo la frecuencia de plasma para el metal, la cual, está definida por la relación

$$\omega_p = \sqrt{\frac{Ne^2}{m\varepsilon_0}} = \sqrt{\frac{\mu_0\sigma c^2}{\tau}}. \quad (44)$$

Al igualar la parte real e imaginaria de la Ec. (43), se obtienen las siguientes dos expresiones:

$$n^2 - \kappa^2 = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + \tau^{-2}}, \quad (45)$$

$$2n\kappa = \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + \tau^{-2}} \left( \frac{1}{\omega\tau} \right). \quad (46)$$

Así, la permitividad eléctrica está relacionada con la parte real e imaginaria del índice de refracción complejo como  $\varepsilon_r(\omega) = n^2 - \kappa^2$  y  $\varepsilon_i(\omega) = 2n\kappa$ . La componente imaginaria de la permitividad es la que describe la absorción de energía en el medio y la componente real nos describe las propiedades materiales reales. Usando las Ecs. (45) y (46), las componentes de la permitividad eléctrica se pueden reescribir como

$$\varepsilon_r(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + \tau^{-2}}, \quad (47)$$

$$\varepsilon_i(\omega) = \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + \tau^{-2}} \left( \frac{1}{\omega\tau} \right). \quad (48)$$

Observemos que si  $\tau^{-2}$  es pequeño en comparación con  $\omega_p$ , cuando  $\omega \ll \omega_p$ , la parte real de la permitividad toma valores negativos hasta llegar a  $\omega_p$  donde  $\varepsilon_r \approx 0$ . Para

la frecuencia  $\omega = \omega_p$  se tiene que  $\varepsilon \rightarrow 1$ . La parte imaginaria toma valores positivos grandes en la región  $\omega \ll \omega_p$  y tiende rápidamente a cero pasando por la frecuencia del plasma. Esta es la razón del porqué los metales sean opacos para frecuencias menores a  $\omega_p$  y se vuelvan transparentes para frecuencias mayores.

Tiempos de relajación típicos de los metales, se deducen de las mediciones de conductividad que son del orden  $\tau = 10^{-13}s$ , los cuales corresponden a frecuencias en la región del espectro infrarrojo. Para frecuencias de plasma de los metales son típicamente de alrededor de  $\omega = 10^{15}s^{-1}$ , correspondiente a las regiones cercanas al visible y al ultravioleta.

Las Ecs. (47) y (48) describen un modelo conocido como el modelo de Drude, donde los electrones no están ligados a los átomos, y son libres de moverse a su alrededor, chocando unos con otros.

### Arreglo de tubos metálicos

Un arreglo de tubos metálicos en aire, como el de la Fig. 6, es quizá el ejemplo más simple de un LHM.



Figura 6. Metamaterial compuesto de tubos de metal con el que es posible obtener una respuesta eléctrica negativa.

El arreglo está caracterizado por tubos de radio  $a$  y una constante de red  $d$ . Si estos



parámetros son mucho más chicos que la longitud de onda de interés, el medio se puede describir con una permitividad efectiva dada por el modelo de Drude (Ecs (47) y (48)). Para este caso supondremos que el campo eléctrico es paralelo a los tubos.

El estudio de la respuesta electromagnética de este arreglo tiene varios precedentes, pero fue John B. Pendry en 1996 quien lo propuso en el contexto de los LHMs (Pendry *et al.*, 1996). De hecho, este artículo es uno de los trabajos más relevantes sobre los LHMs. J. B. Pendry propone que el medio se puede describir como un metal donde debemos considerar una densidad volumétrica efectiva y una masa efectiva del electrón definidas como

$$N_{ef} = n_e \frac{\pi a^2}{d^2}, \quad (49)$$

$$m_{ef} = \frac{\mu_0 n_e a^2 e^2}{2} \ln \left( \frac{d}{a} \right), \quad (50)$$

donde  $n_e$  es la densidad volumétrica,  $a$  es el radio de el tubo,  $d$  es la constante de red,  $\mu_0$  es la constante de permeabilidad magnética en el vacío y  $e$  es la carga del electrón.

El ajuste en la densidad volumétrica se debe a que los electrones, al estar confinados en los tubos metálicos, sólo ocupan una fracción del volumen de la red. El segundo ajuste a considerar se debe a que la auto inductancia de los tubos se opone al cambio de la corriente eléctrica y J. B. Pendry propuso que este efecto se puede representar como un aumento en la masa efectiva del electrón. A partir de estos parámetros efectivos la frecuencia de plasma, dada por la Ec. (44), ahora es:

$$\omega_p = \sqrt{\frac{N_{ef} e^2}{m_{ef} \epsilon_0}} = \sqrt{\frac{2\pi}{\mu_0 \epsilon_0 d^2 \ln(d/a)}} = \sqrt{\frac{2\pi c^2}{d^2 \ln(d/a)}}. \quad (51)$$

Notemos que la frecuencia de plasma queda expresada únicamente en términos de las características geométricas del arreglo; por lo que, podemos ajustar  $\omega_p$  tomando simplemente distintos anchos y densidades para los tubos. Como la densidad volumétrica disminuye y la masa efectiva aumenta, el efecto final es una disminución en la frecuencia

de plasma. Esta disminución puede ser de varios órdenes de magnitud. Aquí debemos comentar que el aumento en la masa efectiva del electrón es una suposición limitada que no se puede aplicar de modo general.

## II.2.2. Respuesta magnética

Controlar la respuesta magnética de los medios es otro de los grandes retos que enfrentan los LHMs. Los medios naturales, de hecho, no presentan respuesta magnética alguna en la óptica. El libro de texto de Landau y Lifshitz (Landau y Lifshitz., 1981) menciona al respecto:

“En contraste con la permitividad eléctrica  $\varepsilon(\omega)$ , cuando se alcanza el dominio de las frecuencias ópticas, carece de sentido utilizar la permeabilidad magnética  $\mu(\omega)$  y al estudiar los correspondientes fenómenos debemos usar  $\mu = 1$ ”.

En la Ref. (Landau y Lifshitz., 1981), los autores calculan el acoplamiento eléctrico y magnético de un átomo y muestran que, en general, se puede despreciar el acoplamiento magnético. Esto implica que los LHMs, no están sujetos a la restricción descrita por Landau y Lifshitz.

En el caso eléctrico se pudo establecer un modelo general pensando en electrones libres. Sin embargo, en este caso, un modelo tan general no es posible y, para determinar  $\mu(\omega)$ , debemos saber exactamente el modo en el que el meta-átomo, unidad de estructura que forma parte de una arquitectura celular que puede ser periódica o no periódica, adquiere un momento magnético.

### Resonador de anillo cortado (SRR)

El único modo de obtener una respuesta magnética es, por tanto, con un material estructurado artificialmente. En 1999, John B. Pendry propuso un meta-átomo que podría lograr esta hazaña, el cual se conoce como resonador de anillo cortado o SRR<sup>1</sup> y exploró explícitamente la idea de estructurar un medio magnético (Pendry *et al.*, 1999). Este anillo resonador es, sin duda, el meta-átomo más famoso y es un símbolo para los LHMs en general. En la Fig. 7 se muestra el esquema básico de un resonador de anillo cortado. El radio promedio del anillo es  $R$  y la circunferencia tiene un pequeño corte de largo  $d$ . Además, el anillo tiene una sección transversal circular de radio  $a$ .

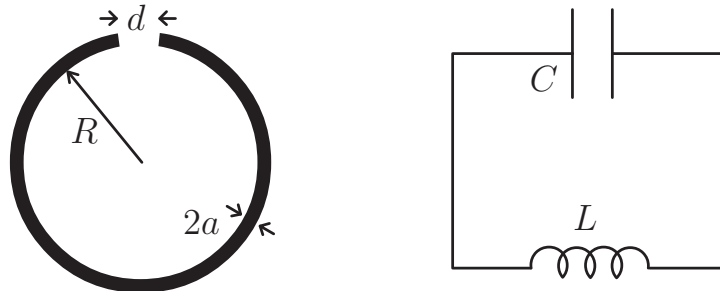


Figura 7. Un resonador de anillo cortado es como un circuito LC.

Como se observa en la Fig 7, la respuesta del meta-átomo se puede modelar como un circuito LC. Cuando un campo magnético atraviesa perpendicularmente el plano del anillo se forma una corriente inducida por lo que el anillo funciona como un inductor y las cargas acumuladas en el corte del anillo funcionan como un capacitor. Si aproximamos la inductancia por la de un anillo cerrado,  $L \approx \mu_0 \pi R L$  y tomando la capacitancia como  $C = \epsilon_0 \pi a^2 / d$ , la frecuencia de resonancia para el circuito LC es

$$\omega_0 = \frac{1}{\sqrt{LC}} = \frac{c}{\pi a} \sqrt{\frac{d}{R}}, \quad (52)$$

<sup>1</sup>Por sus siglas en inglés, Split-Ring Resonator.

donde  $c$  es la velocidad de la luz en el vacío. Vemos entonces que la frecuencia de resonancia depende únicamente de los detalles geométricos del anillo. Este, por su puesto, es un cálculo muy aproximado y no da cuenta de posibles efectos que pueden tomar relevancia.

En su artículo relevante, J. B Pendry no propone exactamente el anillo cortado simple como el de la Fig. 7, sino un anillo doble como el de la Fig. 8a, en el que se forma una capacitancia adicional entre los anillos. El punto importante de esta estructura es que existe un corte que impide que la corriente fluya alrededor de cualquier anillo. Sin embargo, hay una capacitancia considerable entre los dos anillos, lo que permite que la corriente fluya.

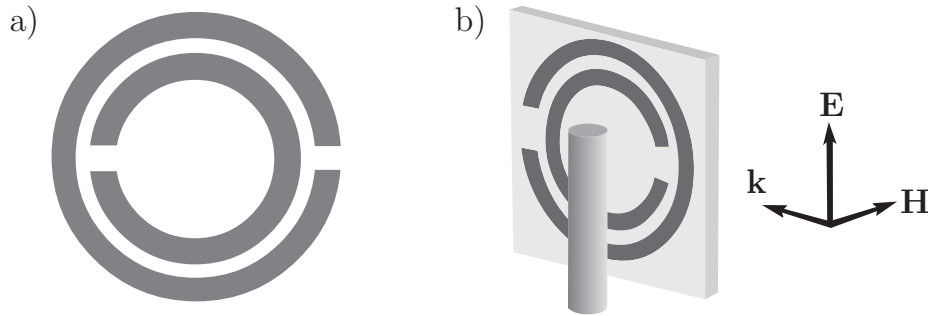


Figura 8. a) SRR doble, b) meta-átomo compuesto por un tubo metálico y un SSR doble.

J. B. Pendry calculó (para más detalles ver (Pendry *et al.*, 1999)) para un arreglo de hojas enrolladas de anillos la permeabilidad magnética efectiva, suponiendo que los anillos son suficientemente próximos entre sí y que las líneas de fuerza magnéticas son debido a las corrientes en los anillos apilados. Esto sólo puede ser cierto si el radio de los anillos es del mismo orden como el lado de celda unidad, obteniendo

$$\mu_{ef}(\omega) = 1 - \frac{\frac{\pi r^2}{a^2}}{1 + i \frac{2l\sigma_1}{\omega r \mu_0} - \frac{3lc^2}{\pi \omega^2 \ln\left(\frac{2c}{d}\right) r^3}}, \quad (53)$$

siendo  $\sigma_1$  la resistencia por unidad de longitud de las hojas medidas alrededor de la circunferencia. La Ec. 53 se puede reescribir como:

$$\mu_{ef}(\omega) = 1 - \frac{\left(\frac{\pi r^2}{a^2}\right) \omega^2}{\omega^2 + i \frac{2l\sigma_1}{r\mu_0} \omega - \frac{3lc^2}{\pi \ln\left(\frac{2c}{d}\right) r^3}} \quad (54)$$

$$\mu_{ef}(\omega) = 1 - \frac{F\omega^2}{\omega^2 + i\gamma\omega - \omega_0^2}, \quad (55)$$

donde se ha definido el parámetro  $F$  como la fracción de volumen de la celda ocupada por el SRR,  $\omega_0$  como la frecuencia de resonancia y  $\gamma$  como el término de amortiguamiento, dados por

$$F = \frac{\pi r^2}{a^2}, \quad (56)$$

$$\omega_0 = \sqrt{\frac{3lc^2}{\pi \ln\left(\frac{2c}{d}\right) r^3}}, \quad (57)$$

$$\gamma = \frac{2l\sigma_1}{r\mu_0}, \quad (58)$$

respectivamente. La Ec. (55) sugiere que  $\mu_{ef}(\omega)$  puede ser negativa alrededor de la frecuencia  $\omega_0$  si el término de amortiguamiento  $\gamma$  tiene un valor pequeño.

Uno de los experimentos más significativos fue llevado a cabo por David J. Smith — quien se convirtió en uno de los colaboradores más cercanos de J. B. Pendry— y Richard A. Shelby en 2001 ver (Shelby *et al.*, 2001). El objetivo del experimento fue construir un medio con índice de refracción negativo, para lo cual, se necesita que  $\varepsilon$  y  $\mu$  sean simultáneamente negativos. El reto es, entonces, lograr que ambas cantidades tomen valores negativos en el mismo rango de frecuencias. La idea para el diseño del medio fue combinar el medio de tubos metálicos (ver Fig. 6) con anillos cortados como se muestra en la Fig. 8(b). En la Fig. 3(c) se mostró una foto del medio utilizado, que en este caso se usaron anillos cuadrados y, en vez de tubos, se usaron tiras de cobre; ambos elementos fueron impresos sobre tablillas dieléctricas para circuitos. El experimento

midió el ángulo de salida de un haz de microondas a través del LHM y el índice de refracción se obtuvo directamente de la ley de Snell. Los resultados del experimento mostraron claramente una refracción consistente con un índice de refracción negativo. En la Fig. 9 se muestra la gráfica con los resultados del experimento. La gráfica muestra la potencia normalizada como función del ángulo para el LHM y un medio control hecho de Teflón. Sin embargo, notemos que como la gráfica sólo muestra la potencia normalizada, no se aprecian las enormes pérdidas de energía asociadas al LHM.

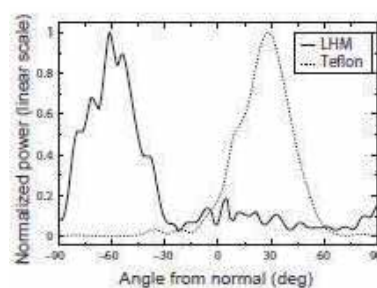


Figura 9. Gráfica que muestra la potencia normalizada como función del ángulo para el LHM y un medio control hecho de Teflón.

Debemos mencionar que controlar la respuesta magnética sigue siendo un reto enorme, y en muchos prototipos de LHM se ha buscado usar propiedades simplificadas para no tener que lidiar con  $\mu(\omega)$ . En el capítulo IV haremos uso de las Ecs. (47) y (55) para modelar un LHM con el método numérico descrito en este trabajo.

### II.3. Aplicaciones de los Metamateriales

En esta sección mencionaremos algunas aplicaciones de los LHMs. En el 2005, una super lente compuesta de LHMs de plata logró reconstruir imágenes en el campo cercano, a menos de una longitud de onda de la fuente (Melville y Blaikie, 2005). Los materiales de índice negativo fueron usados para crear una lente de índice de gradiente (GRIN). Pero hasta finales de 2009, Duke creó una lente GRIN como se muestra en la Fig. 10.

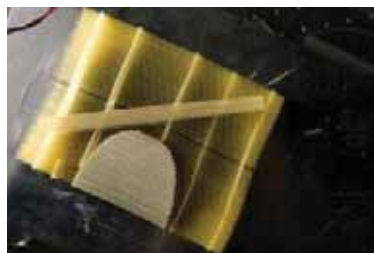


Figura 10. Lente de índice de Gradiente hechas por Duke en 2009.

Una lente GRIN se realiza mediante un LHM creado con un material de fibra de vidrio y cobre, de los cuales están hechas las placas del circuito. Sin embargo, los científicos están tratando de crear una super lente de campo lejano usando LHM. Actualmente, pueden utilizar una lente de LHM para magnificar la propagación de ondas evanescentes, para que sean lo suficientemente grandes como para ser detectables por una lente convencional. Por otro lado, en 2010, fueron utilizados LHMs para crear nano lentes tridimensionales que logra imágenes de super resolución (Casse *et al.*, 2010).

En enero del año, 2011, Shana Leonard escribió un artículo para la Fabricación de Productos Médicos discutiendo la posible mejora de los ultrasonidos utilizando un LHM “holey”. Un ejemplo del LHM “holey” se muestra en la Fig. 11.

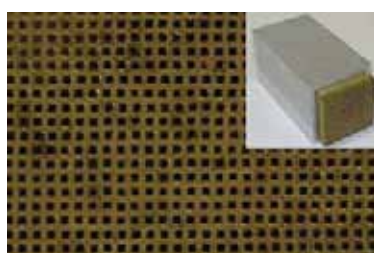


Figura 11. Imagen de LHM Holey.

En el mismo año, en Penn State Live habla del potencial de los LHMs para la creación de satélites de comunicacion, ya que esto ahorraría dinero, haciéndolos más ligeros y más eficientes de energía. Por lo tanto, los satélites serían más baratos de

hacer y de enviar al espacio. Una representación en 3D de un satélite se muestra en la Fig. 12(a), donde el revestimiento del satélite está hecho de LHM como se muestra en la Fig. 12(b)

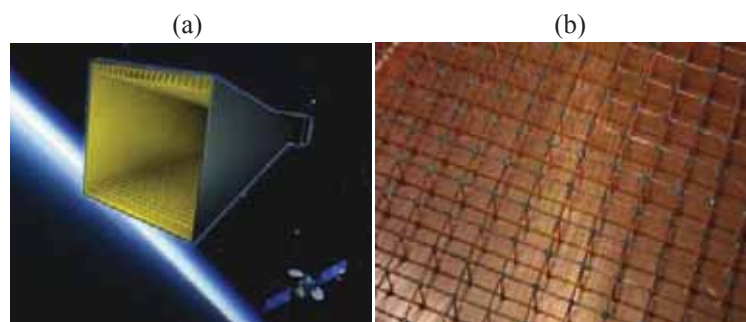


Figura 12. (a) Una representación en 3-D de un satélite de comunicación compuesto de LHMs. (b) Revestimiento de LHM para el satélite de comunicacion.

Otras aplicaciones de los LHMs son la energía solar, los dispositivos de encubrimiento, las antenas de telefonía celular y las antenas moldeadas para que coincida con la forma aerodinámica de un avión. Muchos teléfonos celulares ya contienen antenas de LHMs que pueden manejar múltiples frecuencias. Una de estas antenas se representa en la Fig. 13. Los LHMs se pueden crear para ser absorbentes casi perfectas de la luz. De esta manera, pueden ser útiles en la producción de energía solar. Mientras más fotones se puede absorber, más energía se pueden producir.



Figura 13. Antena de LHM para uso de teléfonos celulares.

Por otro lado, se tiene la esperanza de que los LHMs puedan ser usados para aplicaciones aeroespaciales remotas, en sensores de detección, en la vigilancia de infraestruc-



turas, en la gestión de la energía solar inteligente, en la seguridad pública, en la mejora de sensores ultrasónicos, entre otros.

Un desarrollo de los LHMs es del tipo de LHM sintonizable. Este tipo puede ser sintonizado para responder a las diferentes frecuencias en lugar de frecuencias fijas solamente, como se muestra en la Fig. 14. Varias aplicaciones pueden surgir simplemente a partir de este tipo de LHM, tales como: la energía fotovoltaica, las gafas para bloquear el deslumbramiento y los dispositivos de procesamiento de señales ópticas para acelerar las comunicaciones.

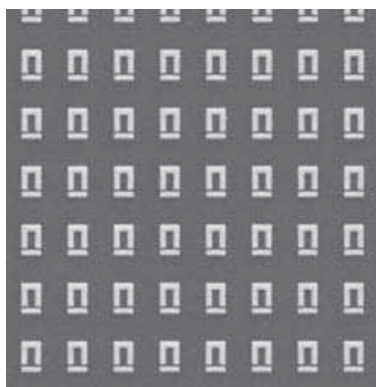


Figura 14. Arreglo de un SRRs compuesto de impresiones de plata sobre una extensión de polímero.

## Capítulo III

---

# MÉTODO DE LA ECUACIÓN INTEGRAL

---

En este capítulo se presenta un desarrollo descriptivo del método integral que nos permite calcular las estructuras de bandas de un cristal fotónico bidimensional (CF2D) formado por una celda cuadrada y con inclusiones que tienen geometrías arbitrarias. Los tipos de medios que forman el CF2D pueden ser dieléctricos o metamateriales.

### III.1. Descripción del método de la ecuación integral

A continuación, se describe un método numérico para calcular las estructuras de bandas de un CF2D, basado en la solución numérica de la ecuación de Helmholtz usando ecuaciones integrales (Mendoza-Suárez *et al.*, 2007). Este método parte del segundo teorema integral de Green permitiendo obtener un par de ecuaciones integrales acopladas que involucran, como incógnitas el modo del campo y su derivada normal evaluados en las fronteras o superficies involucradas. La discretización del sistema resulta en una ecuación matricial homogénea cuya solución determina las funciones fuente, con las que

se puede calcular las estructuras de bandas.

Este método implica ecuaciones independientes del tiempo, por lo que la evolución en el tiempo de los sistemas no es una preocupación, y funciona a lo largo de los contornos de las fronteras involucradas en la geometría que se manejan. Esto presenta algunas ventajas en comparación con otros métodos, ya que sólo tiene en cuenta un número finito de puntos de muestreo a lo largo de los contornos de la celda unitaria, permitiendo una menor cantidad de recursos computacionales. Además, el método integral permite estudiar la propagación de ondas electromagnéticas a través del sistema periódico finito, aunque en este trabajo no se considerará este caso.

### III.1.1. Ecuación de onda

La descripción del siguiente método integral fue tomada de la Ref. (Mendoza-Suárez *et al.*, 2007). Como el objetivo de esta tesis es estudiar un CF2D que contiene un LHM en la inclusión de una celda cuadrada, vamos a describir el método bajo esta consideración; sin embargo, cabe mencionar que el método se puede aplicar también a medios dieléctricos y conductores.

En la Fig. 15 se muestra la geometría de un CF2D formado por una celda cuadrada que contiene una inclusión con una geometría arbitraria. El medio de la inclusión es un dieléctrico o LHM con constante dieléctrica  $\varepsilon_2(\omega)$  y rodeado por otro medio con  $\varepsilon_1(\omega)$ .

Todos los problemas sobre electromagnetismo, siempre que nos mantengamos en una situación macroscópica como es el caso de la propagación de la luz a través de un cristal fotónico que contiene LHM, pueden tratarse a través de las ecuaciones de Maxwell. Para iniciar con el método integral vamos a obtener la ecuación de onda para nuestro sistema propuesto. Consideremos medios sin cargas ni corrientes  $\rho = 0$  y  $J = 0$ , cuyas propiedades del material dadas por la permitividad eléctrica  $\varepsilon(\omega)$  y permeabilidad

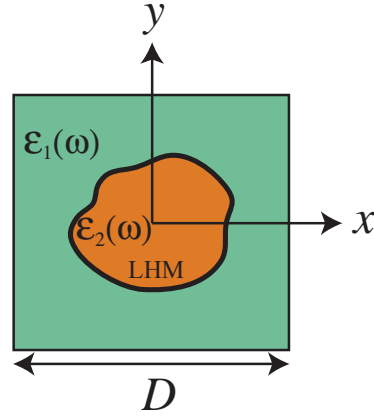


Figura 15. Diagrama de un cristal fotónico bidimensional infinito. La celda unitaria cuadrada de longitud  $D$  está compuesta de dos materiales diferentes con constantes dieléctricas  $\varepsilon_1(\omega)$  y  $\varepsilon_2(\omega)$ .

magnética  $\mu(\omega)$  dependerán de la frecuencia  $\omega$ . Asumiremos además, que la amplitud de los campos es lo suficientemente baja como para no exceder el régimen lineal.

Así, las ecuaciones de Maxwell correspondientes son:

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0, \quad (59)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = 0, \quad (60)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\mu(\omega) \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t}, \quad (61)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}, \quad (62)$$

donde  $\mathbf{E}$  y  $\mathbf{H}$  son los campos eléctricos y magnéticos, respectivamente,  $\mathbf{D}$  y  $\mathbf{B}$  son los campos de desplazamiento eléctrico e inducción magnética, respectivamente. Además tenemos las ecuaciones constitutivas de los campos eléctrico y magnético para materiales lineales dadas por:

$$\mathbf{D} = \varepsilon(\omega) \mathbf{E}, \quad (63)$$

$$\mathbf{B} = \mu(\omega) \mathbf{H}. \quad (64)$$

Al aplicar el rotacional a la Ec. (62), se tiene:

$$\nabla \times (\nabla \times \mathbf{H}) = \nabla \times \left( \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} \right), \quad (65)$$

$$\nabla(\nabla \cdot \mathbf{H}) - \nabla^2 \mathbf{H} = \varepsilon(\omega) \frac{\partial}{\partial t} (\nabla \times \mathbf{E}), \quad (66)$$

y al sustituir la Ec. (59) en la Ec. (66) se obtiene la ecuación de onda del campo magnético

$$\nabla^2 \mathbf{H} - \mu(\omega) \varepsilon(\omega) \frac{\partial^2 \mathbf{H}}{\partial t^2} = 0. \quad (67)$$

Procediendo de manera similar, se obtiene la ecuación de onda del campo eléctrico

$$\nabla^2 \mathbf{E} - \mu(\omega) \varepsilon(\omega) \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} = 0, \quad (68)$$

donde el producto  $\mu(\omega) \varepsilon(\omega) = 1/(v(\omega))^2$  siendo  $v(\omega)$  la velocidad de la onda en el medio que depende de la frecuencia  $\omega$ .

Como las ecuaciones de Maxwell son lineales, podemos separar la dependencia temporal de la dependencia espacial de los campos electromagnéticos, considerándolas independientes. En cuanto a la dependencia temporal, asumiremos que los campos varían sinusoidalmente en función del tiempo. Por ser funciones armónicas, sabemos que por el teorema de Fourier, que cualquier solución a un problema electromagnético puede ser expresada como una combinación lineal de campos armónicos. Así, los campos eléctrico y magnético se pueden expresar de la siguiente manera:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, \mathbf{t}) = \mathbf{E}(\mathbf{r}) e^{-i\omega t}, \quad (69)$$

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}, \mathbf{t}) = \mathbf{H}(\mathbf{r}) e^{-i\omega t}. \quad (70)$$

Estas ecuaciones, permiten transformar a las ecuaciones de onda de los campos eléctrico y magnético como las ecuaciones de Helmholtz

$$\nabla^2 \mathbf{E}(\mathbf{r}) + \mu(\omega) \varepsilon(\omega) \omega^2 \mathbf{E}(\mathbf{r}) = 0, \quad (71)$$

$$\nabla^2 \mathbf{H}(\mathbf{r}) + \mu(\omega) \varepsilon(\omega) \omega^2 \mathbf{H}(\mathbf{r}) = 0. \quad (72)$$

Definiendo  $k^2 = \mu(\omega)\varepsilon(\omega)\omega^2$  como la magnitud del vector de onda y tomando en cuenta que la velocidad en el vacío está dada por  $c = (\mu_0\varepsilon_0)^{-1/2}$  y que el índice de refracción está dado por  $n(\omega) = c/v(\omega)$ , se tiene que la relación de dispersión será:

$$k = n(\omega)\frac{\omega}{c}, \quad (73)$$

donde el índice de refracción  $n(\omega) = \pm\sqrt{\mu_r(\omega)\varepsilon_r(\omega)}$  que involucra las propiedades de los materiales está dado en términos de la permeabilidad magnética  $\mu_r(\omega)$  y de la permitividad eléctrica  $\varepsilon_r(\omega)$  relativas. Ambas funciones dependen de la frecuencia  $\omega$ . El signo que aparece en la ecuación del índice de refracción debe ser tomado como negativo cuando se considere un LHM, y positivo, cuando el medio sea un material dieléctrico. Así las ecuaciones de onda (Ecs. (71) y (72)) para el campo eléctrico y magnético, respectivamente, se pueden reescribir como:

$$\nabla^2\mathbf{E}(\mathbf{r}) + k^2\mathbf{E}(\mathbf{r}) = 0, \quad (74)$$

$$\nabla^2\mathbf{H}(\mathbf{r}) + k^2\mathbf{H}(\mathbf{r}) = 0. \quad (75)$$

Más aún las Ecs. (74) y (75) se pueden expresar en términos de la función  $\Psi$  que representa a cualquiera de los campos electromagnéticos,

$$\nabla^2\Psi(\mathbf{r}) + k^2\Psi(\mathbf{r}) = 0. \quad (76)$$

Es importante mencionar que el método integral será descrito muy brevemente, pero si el lector desea conocer el desarrollo detalladamente puede consultar la Ref. (Jiménez, 2014).

### III.1.2. Función de Green para la ecuación de Helmholtz

Para estudiar el sistema propuesto, la ecuación de Helmholtz se puede escribir como:

$$\nabla^2\Psi_j(\mathbf{r}) + k_j^2\Psi_j(\mathbf{r}) = 0, \quad (77)$$

donde  $j$  indica el  $j$ -ésimo medio,  $\mathbf{r} = x\hat{i} + y\hat{j}$  es el vector de posición del punto de observación que es independiente de  $z$  para el CF2D.  $\Psi_j(\mathbf{r})$  representa el campo eléctrico  $E_z$ , en el caso de la polarización TE y el campo magnético  $H_z$ , en el caso de la polarización TM; ambas en el  $j$ -ésimo medio. Además la magnitud del vector de onda

$$k_j = n_j(\omega) \frac{\omega}{c}, \quad (78)$$

para cada  $j$ -ésimo medio. El índice de refracción  $n_j(\omega) = \pm \sqrt{\mu_j(\omega)\varepsilon_j(\omega)}$  involucra las propiedades de los materiales en términos de la permeabilidad magnética  $\mu_j(\omega)$  y de la permitividad eléctrica  $\varepsilon_j(\omega)$  relativas, ambas funciones dependiendo de la frecuencia  $\omega$ . La velocidad de la luz está indicada por  $c$ . Recordando que el signo que aparece en la expresión del índice de refracción debe ser tomado como negativo cuando se considere un LHM y positivo cuando el medio sea un material dieléctrico.

Para resolver la Ec. (77), consideremos una función de Green  $G_j(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  para el  $j$ -ésimo medio

$$\nabla^2 G_j(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + k_j^2 G_j(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = 4\pi\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (79)$$

donde  $G_j(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  representa el propagador del campo debido a una fuente de luz puntual que emite a la frecuencia  $\omega$  en la posición  $\mathbf{r}'$  y  $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$  es la función delta de Dirac. Una solución de la Ec. (79) está representada por la siguiente función de Green,

$$G_j(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = i\pi H_0^{(1)}(k_j |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|), \quad (80)$$

siendo  $H_0^{(1)}(\zeta)$  la función de Hankel de primera clase y de orden cero (Mendoza-Suárez *et al.*, 2007).

### III.1.3. Representación integral de la ecuación de Helmholtz

Aplicaremos el segundo teorema integral de Green bidimensional para las funciones  $\Psi_j(\mathbf{r})$  y  $G_j(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  en cada región correspondiente al  $j$ -ésimo medio. Para ello, multipli-

caremos la Ec. (77) por  $G_j(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  y la Ec. (79) por  $-\Psi_j(\mathbf{r})$  y sumando ambas ecuaciones que al integrarlas sobre una superficie cerrada  $S_j$  que está limitada por un contorno cerrado  $\Gamma_j$ , se obtiene:

$$\frac{1}{4\pi} \oint_{\Gamma_j} [G_j(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \nabla \Psi_j(\mathbf{r}) - \Psi_j(\mathbf{r}) \nabla G_j(\mathbf{r}, \mathbf{r}')] \cdot \hat{\mathbf{n}} ds = \oint_{S_j} \Psi_j(\mathbf{r}) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') da. \quad (81)$$

siendo  $ds$  el diferencial de la longitud de arco y  $da$  el diferencial de área.

Como la derivada normal está definida como  $\partial \Psi_j / \partial n = \hat{\mathbf{n}} \cdot \nabla \Psi_j$ , la Ec. (81) se puede reescribir como

$$\frac{1}{4\pi} \oint_{\Gamma_j} \left[ G_j(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \frac{\partial \Psi_j(\mathbf{r})}{\partial n} - \Psi_j(\mathbf{r}) \frac{\partial G_j(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{\partial n} \right] ds = \Psi_j(\mathbf{r}') \theta(\mathbf{r}'), \quad (82)$$

donde la integral de superficie se ha representado mediante el producto del campo por la función escalón de Heaviside,

$$\theta(\mathbf{r}') = \begin{cases} 1 & \text{si } \mathbf{r}' \in S \\ 0 & \text{si } \mathbf{r}' \notin S \end{cases}. \quad (83)$$

Considerando la convención de que  $\mathbf{r}$  representa la posición del observador (donde se mide el campo), podemos intercambiar las variables  $\mathbf{r}$  y  $\mathbf{r}'$  en la Ec. (82),

$$\frac{1}{4\pi} \oint_{\Gamma_j} \left[ G_j(\mathbf{r}', \mathbf{r}) \frac{\partial \Psi_j(\mathbf{r}')}{\partial n'} - \Psi_j(\mathbf{r}') \frac{\partial G_j(\mathbf{r}', \mathbf{r})}{\partial n'} \right] ds' = \Psi_j(\mathbf{r}) \theta(\mathbf{r}), \quad (84)$$

de manera que  $\mathbf{r}'$  se desplaza sobre los contornos. Similarmente, hemos tomado en cuenta la definición de la derivada normal para la función de Green que tiene la forma

$$\frac{\partial G_j(\mathbf{r}', \mathbf{r})}{\partial n'} = \hat{\mathbf{n}}' \cdot \nabla' G_j(\mathbf{r}', \mathbf{r}), \quad (85)$$

siendo  $\hat{\mathbf{n}}'$  la normal a la superficie y  $\mathbf{r}'$  el contorno  $\Gamma$  como se muestra en la Fig. 16. De forma similar para  $\partial \Psi_j(\mathbf{r}') / \partial n' = \hat{\mathbf{n}}' \cdot \nabla' \Psi_j(\mathbf{r}')$ .

Por lo tanto, la ecuación de Helmholtz para los campos en un sistema 2D en el punto  $\mathbf{r}'$  se puede representar mediante la ecuación integral

$$\frac{1}{4\pi} \oint_{\Gamma_j} \left[ G_j(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \frac{\partial \Psi_j(\mathbf{r}')}{\partial n'} - \Psi_j(\mathbf{r}') \frac{\partial G_j(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{\partial n'} \right] ds' = \Psi_j(\mathbf{r}) \theta(\mathbf{r}), \quad (86)$$



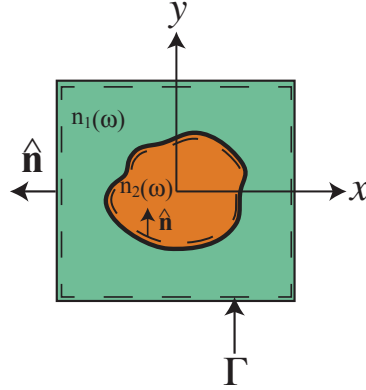


Figura 16. Celda unitaria de un CF2D compuesto de dos materiales diferentes con índices de refracción  $n_1(\omega)$  y  $n_2(\omega)$  en una celda cuadrada con una inclusión de forma arbitraria con su vector normal  $\hat{\mathbf{n}}$  perpendicular al contorno  $\Gamma$ .

donde

$$G_j(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = i\pi H_0^{(1)}(k_j |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|), \quad (87)$$

es la función de Green en medios homogéneos. En la Ec. (86) la superficie  $S_j$  está limitada por el contorno cerrado  $\Gamma_j$  correspondiente y la derivada normal  $\partial/\partial n'$  va hacia afuera del contorno  $\Gamma_j$ .

### III.1.4. Discretización de la Ecuación Integral

Como el objetivo de esta tesis es calcular las estructuras de bandas para un cristal fotónico bidimensional que contiene LHM dispersivo, consideremos una celda unitaria cuadrada compuesta por dos materiales diferentes con índices de refracción  $n_1(\omega)$  y  $n_2(\omega)$  y una inclusión con geometría arbitraria como se muestra en la Fig. 17.

Aplicaremos el teorema de Green en bidimensional (Ec. (86)) para cada región sobre los contornos  $C_1 = \Gamma_a + \Gamma_b + \Gamma_c + \Gamma_d + \Gamma_e$  y  $C_2 = \Gamma_e$ . Podemos representar un conjunto de ecuaciones integrales acopladas para  $\Psi_j(\mathbf{r}')$  y  $\partial\Psi_j(\mathbf{r}')/\partial n'$  permitiendo que  $\mathbf{r}$  represente los vectores  $\mathbf{R}_a + \xi\hat{\mathbf{n}}_a$ ,  $\mathbf{R}_b + \xi\hat{\mathbf{n}}_b$ ,  $\mathbf{R}_c + \xi\hat{\mathbf{n}}_c$ ,  $\mathbf{R}_d + \xi\hat{\mathbf{n}}_d$  y  $\mathbf{R}_e + \xi\hat{\mathbf{n}}_e$  donde  $\mathbf{R}_a$ ,  $\mathbf{R}_b$ ,  $\mathbf{R}_c$ ,  $\mathbf{R}_d$  y  $\mathbf{R}_e$  son los vectores de posición usados para recorrer los contornos  $\Gamma_a, \Gamma_b, \Gamma_c, \Gamma_d$  y  $\Gamma_e$ ,

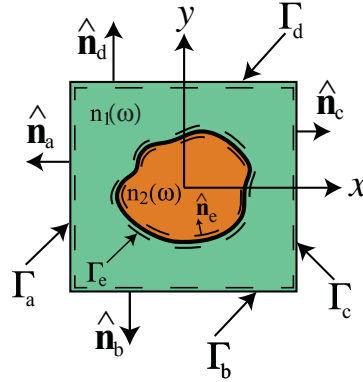


Figura 17. Celda unitaria de un CF2D con una red cuadrada y una inclusión de forma arbitraria compuesta por dos materiales diferentes con índices de refracción  $n_1(\omega)$  y  $n_2(\omega)$ . Los medios están limitados por los contornos  $\Gamma_a, \Gamma_b, \Gamma_c, \Gamma_d$  y  $\Gamma_e$  cuyos vectores normales van hacia afuera del medio 1, respectivamente.

respectivamente. El parámetro  $\xi$  es una cantidad infinitesimal positiva y los vectores normales correspondientes a los contornos son  $\hat{\mathbf{n}}_a, \hat{\mathbf{n}}_b, \hat{\mathbf{n}}_c, \hat{\mathbf{n}}_d$  y  $\hat{\mathbf{n}}_e$  (ver Fig. 17). Por consiguiente, la ecuación integral para la región 1 con índice de refracción  $n_1(\omega)$  es

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{4\pi} \lim_{\xi \rightarrow 0^+} \left\{ \int_{\Gamma_a} \left[ G_1(\mathbf{R}_a + \xi \hat{\mathbf{n}}_a, \mathbf{r}') \frac{\partial \Psi_a}{\partial n'_a} - \Psi_a \frac{\partial G_1(\mathbf{R}_a + \xi \hat{\mathbf{n}}_a, \mathbf{r}')}{\partial n'_a} \right] ds' \right. \\
& \quad + \int_{\Gamma_b} \left[ G_1(\mathbf{R}_b + \xi \hat{\mathbf{n}}_b, \mathbf{r}') \frac{\partial \Psi_b}{\partial n'_b} - \Psi_b \frac{\partial G_1(\mathbf{R}_b + \xi \hat{\mathbf{n}}_b, \mathbf{r}')}{\partial n'_b} \right] ds' \\
& \quad + \int_{\Gamma_c} \left[ G_1(\mathbf{R}_c + \xi \hat{\mathbf{n}}_c, \mathbf{r}') \frac{\partial \Psi_c}{\partial n'_c} - \Psi_c \frac{\partial G_1(\mathbf{R}_c + \xi \hat{\mathbf{n}}_c, \mathbf{r}')}{\partial n'_c} \right] ds' \\
& \quad + \int_{\Gamma_d} \left[ G_1(\mathbf{R}_d + \xi \hat{\mathbf{n}}_d, \mathbf{r}') \frac{\partial \Psi_d}{\partial n'_d} - \Psi_d \frac{\partial G_1(\mathbf{R}_d + \xi \hat{\mathbf{n}}_d, \mathbf{r}')}{\partial n'_d} \right] ds' \\
& \quad \left. + \int_{\Gamma_e} \left[ G_1(\mathbf{R}_e + \xi \hat{\mathbf{n}}_e, \mathbf{r}') \frac{\partial \Psi_e}{\partial n'_e} - \Psi_e \frac{\partial G_1(\mathbf{R}_e + \xi \hat{\mathbf{n}}_e, \mathbf{r}')}{\partial n'_e} \right] ds' \right\} = 0, \tag{88}
\end{aligned}$$

y para la región 2,

$$\frac{1}{4\pi} \lim_{\xi \rightarrow 0^+} \left\{ - \int_{\Gamma_e} \left[ G_2(\mathbf{R}_e + \xi \hat{\mathbf{n}}_e, \mathbf{r}') \frac{\partial \tilde{\Psi}_e}{\partial n'_e} - \tilde{\Psi}_e \frac{\partial G_2(\mathbf{R}_e + \xi \hat{\mathbf{n}}_e, \mathbf{r}')}{\partial n'_e} \right] ds' \right\} = \tilde{\Psi}_e. \tag{89}$$

Es necesario el límite para evitar una singularidad en la función de Green cuando su argumento es cero. La geometría del problema está descrita por la representación de puntos a lo largo del contorno  $\Gamma$  con coordenadas  $x(s), y(s)$  como funciones paramétricas

de la longitud de arco  $s$  y de sus respectivas derivadas hasta de segundo orden,  $x'(s)$ ,  $y'(s)$ ,  $x''(s)$  y  $y''(s)$ . Estas funciones se consideran continuas al menos por tramos.

En las Ecs. (88) y (89) tenemos dos integrales de contorno que llamaremos

$$I_G(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi} \oint_{\Gamma} G_j(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \frac{\partial \Psi_j(\mathbf{r}')}{\partial n'} ds', \quad (90)$$

$$I_{\Psi}(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi} \oint_{\Gamma} \Psi_j(\mathbf{r}') \frac{\partial G_j(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{\partial n'} ds'. \quad (91)$$

Para resolver numéricamente las Ecs. (90) y (91) se realiza una discretización, ya que en el formalismo general, las integrales no se pueden resolver de manera exacta.

Para esto dividimos el contorno  $\Gamma_i$  en  $n$  pequeños segmentos de longitud de arco  $\Delta s$ ,

$$I_G(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi} \sum_n \int_{s_n - \Delta s/2}^{s_n + \Delta s/2} G_j(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \frac{\partial \Psi_j(\mathbf{r}')}{\partial n'} ds', \quad (92)$$

$$I_{\Psi}(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi} \sum_n \int_{s_n - \Delta s/2}^{s_n + \Delta s/2} \Psi_j(\mathbf{r}') \frac{\partial G_j(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{\partial n'} ds'. \quad (93)$$

Si  $\Delta s$  es suficientemente pequeño para un muestreo fino, entonces podemos considerar que el campo  $\Psi_j(\mathbf{r}')$  y su derivada normal  $\partial \Psi_j(\mathbf{r}')/\partial n'$  son aproximadamente constantes. Así, las ecuaciones anteriores se pueden reescribir de la siguiente manera:

$$I_G(\mathbf{r}) \approx \frac{1}{4\pi} \sum_n \Phi_n^j \int_{s_n - \Delta s/2}^{s_n + \Delta s/2} G_j(\mathbf{r}, \mathbf{r}') ds', \quad (94)$$

$$I_{\Psi}(\mathbf{r}) \approx \frac{1}{4\pi} \sum_n \Psi_n^j \int_{s_n - \Delta s/2}^{s_n + \Delta s/2} \frac{\partial G_j(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{\partial n'} ds'. \quad (95)$$

donde se han definido las funciones

$$\Phi_n^j = \left. \frac{\partial \Psi_j(\mathbf{r}')}{\partial n'} \right|_{\mathbf{r}'=\mathbf{r}'_n}, \quad (96)$$

$$\Psi_n^j = \Psi_j(\mathbf{r}')|_{\mathbf{r}'=\mathbf{r}'_n}. \quad (97)$$

Evaluando las integrales de las Ecs. (94) y (95) en el punto de observación  $\mathbf{r} = \mathbf{r}_m$  podemos definir los elementos de matriz como:

$$L_{mn} = \frac{1}{4\pi} \oint_{s_n - \Delta s/2}^{s_n + \Delta s/2} G_j(\mathbf{r}_m, \mathbf{r}') ds', \quad (98)$$

$$N_{mn} = \frac{1}{4\pi} \oint_{s_n - \Delta s/2}^{s_n + \Delta s/2} \frac{\partial G_j(\mathbf{r}_m, \mathbf{r}')}{\partial n'} ds', \quad (99)$$

donde el subíndice  $m$  indica el punto de observación y el subíndice  $n$  el punto de integración.

Estos elementos de matriz (para más detalle ver la Ref. (Jiménez, 2014)), están dados por las expresiones:

$$L_{mn}^{(j)} = \frac{i\Delta s}{4} H_0^{(1)}(k_j R_{mn})(1 - \delta_{mn}) + \left[ \frac{i\Delta s}{4} H_0^{(1)} \left( k_j \frac{\Delta s}{2e} \right) \right] \delta_{mn}, \quad (100)$$

$$N_{mn}^{(j)} = \frac{i\Delta s}{4} k_j H_1^{(1)}(k_j R_{mn}) \hat{\mathbf{n}}_n \cdot \frac{\mathbf{R}_{mn}}{R_{mn}} (1 - \delta_{mn}) + \left[ \frac{1}{2} + \frac{\Delta s}{4\pi} \hat{\mathbf{n}}_n \cdot \hat{\mathbf{t}}'_n \right] \delta_{mn}, \quad (101)$$

siendo

$$\hat{\mathbf{n}}_n \cdot \mathbf{R}_{mn} = -y'(s)(x_m - x_n) + x'(s)(y_m - y_n), \quad (102)$$

$$\hat{\mathbf{n}}_n \cdot \hat{\mathbf{t}}'_n = x'(s)y''(s) - y'(s)x''(s), \quad (103)$$

$$R_{mn} = \sqrt{(x_m - x_n)^2 + (y_m - y_n)^2}. \quad (104)$$

Por tanto, haciendo uso de las Ecs. (98) y (99) podemos reescribir las Ecs. (94) y (95) como:

$$\frac{1}{4\pi} \sum_n \Phi_n^j \oint_{s_n - \Delta s/2}^{s_n + \Delta s/2} G_j(\mathbf{r}_m, \mathbf{r}') ds' \approx \sum_{n=-\infty}^{\infty} L_{mn}^j \Phi_n^j, \quad (105)$$

$$\frac{1}{4\pi} \sum_n \Psi_n^j \oint_{s_n - \Delta s/2}^{s_n + \Delta s/2} \frac{\partial G_j(\mathbf{r}_m, \mathbf{r}')}{\partial n'} ds' \approx \sum_{n=-\infty}^{\infty} N_{mn}^j \Psi_n^j. \quad (106)$$

Ahora sustituyendo las Ecs. (105) y (106) en las Ecs. (88) y (89) obtenemos un conjunto de  $N_{abcd} + 2N_e$  ecuaciones algebraicas homogéneas, donde cada contorno es muestreado en un número finito de puntos igualmente espaciados:  $N_a$  para  $\Gamma_a$  y así sucesivamente;  $N_{abcd} = N_a + N_b + N_c + N_d$  ( $N_c = N_a$ ,  $N_d = N_b$ ).

Para cada región con  $m = 1 + 2, \dots, N_{abcd} + N_e$ , se tiene:

$$\begin{aligned}
& \left[ \sum_{n=1}^{N_a} N_{mn}^1 \Psi_a^n - \sum_{n=1}^{N_a} L_{mn}^1 \Phi_a^n \right] + \left[ \sum_{n=N_a+1}^{N_a+N_b} N_{mn}^1 \Psi_b^n - \sum_{n=N_a+1}^{N_a+N_b} L_{mn}^1 \Phi_b^n \right] \\
& + \left[ \sum_{n=N_a+N_b+1}^{N_{abcd}-N_d} N_{mn}^1 \Psi_c^n - \sum_{n=N_a+N_b+1}^{N_{abcd}-N_d} L_{mn}^1 \Phi_c^n \right] \\
& + \left[ \sum_{n=N_{abcd}-N_d+1}^{N_{abcd}} N_{mn}^1 \Psi_d^n - \sum_{n=N_{abcd}-N_d+1}^{N_{abcd}} L_{mn}^1 \Phi_d^n \right] \\
& + \left[ \sum_{n=N_{abcd}+1}^{N_{abcd}+N_e} N_{mn}^1 \Psi_e^n - \sum_{n=N_{abcd}+1}^{N_{abcd}+N_e} L_{mn}^1 \Phi_e^n \right] = 0
\end{aligned} \tag{107}$$

y para  $m = N_{abcd} + N_e + 1, \dots, N_{abcd} + 2N_e$ ,

$$\sum_{n=N_{abcd}+1}^{N_{abcd}+N_e} N_{mn}^2 \tilde{\Psi}_e^n - \sum_{n=N_{abcd}+1}^{N_{abcd}+N_e} L_{mn}^2 \tilde{\Phi}_e^n = \tilde{\Psi}_e^n. \tag{108}$$

Debido a la geometría del CF2D propuesto (ver Fig. 17), se tiene que en este caso las condiciones de periodicidad son:

$$\Psi_c = \Psi_a \exp(ik_x D_x), \quad \Phi_c = -\Phi_a \exp(ik_x D_x), \tag{109}$$

$$\Psi_d = \Psi_b \exp(ik_y D_y), \quad \Phi_d = -\Phi_b \exp(ik_y D_y), \tag{110}$$

donde el signo menos está presente debido a que los vectores normales a los perfiles  $\Gamma_a$  y  $\Gamma_c$ ,  $\Gamma_b$  y  $\Gamma_d$  son opuestos. Además  $D_x$  y  $D_y$  son las longitudes de la celda rectangular en la dirección  $x$  y  $y$ , respectivamente. Por otro lado, tenemos que las condiciones de frontera para el contorno  $\Gamma_e$  son:

$$\tilde{\Psi}_e = \Psi_e, \quad \tilde{\Phi}'_e = \frac{f_2}{f_1} \Phi_e, \tag{111}$$

siendo la cantidad  $f_j$  dada por

$$f_j = \begin{cases} \mu_j(\omega) & \text{para polarización TE} \\ \varepsilon_j(\omega) & \text{para polarización TM} \end{cases}. \quad (112)$$

Aplicando las condiciones de frontera y de periodicidad en las Ecs. (107) y (108), se tiene

$$\begin{aligned} & \left[ \sum_{n=1}^{N_a} N_{mn}^1 \Psi_a^n - \sum_{n=1}^{N_a} L_{mn}^1 \Phi_a^n \right] + \left[ \sum_{n=N_a+1}^{N_a+N_b} N_{mn}^1 \Psi_b^n - \sum_{n=N_a+1}^{N_a+N_b} L_{mn}^1 \Phi_b^n \right] \\ & + \left[ \exp(ik_x D_x) \sum_{n=N_a+N_b+1}^{N_{abcd}-N_d} N_{mn}^1 \Psi_a^n + \exp(ik_x D_x) \sum_{n=N_a+N_b+1}^{N_{abcd}-N_d} L_{mn}^1 \Phi_a^n \right] \\ & + \left[ \exp(ik_y D_y) \sum_{n=N_{abcd}-N_d+1}^{N_{abcd}} N_{mn}^1 \Psi_b^n + \exp(ik_y D_y) \sum_{n=N_{abcd}-N_d+1}^{N_{abcd}} L_{mn}^1 \Phi_b^n \right] \\ & + \left[ \sum_{n=N_{abcd}+1}^{N_{abcd}+N_e} N_{mn}^1 \Psi_e^n - \sum_{n=N_{abcd}+1}^{N_{abcd}+N_e} L_{mn}^1 \Phi_e^n \right] = 0 \end{aligned} \quad (113)$$

y

$$\sum_{n=N_{abcd}+1}^{N_{abcd}+N_e} (N_{mn}^2 - \delta_{mn}) \Psi_e^n - \frac{f_2}{f_1} \sum_{n=N_{abcd}+1}^{N_{abcd}+N_e} L_{mn}^2 \Phi_e^n = 0. \quad (114)$$

En la Ec. (114) es necesario considerar que  $\Psi_a^n = \Psi_a^{n+N_a+N_b}$  y  $\Phi_a^n = \Phi_a^{n+N_a+N_b}$ , con  $n = 1, 2, \dots, N_a$ . Además de  $\Psi_a^{n+N_a} = \Psi_a^{n+N_a+N_b+N_c}$  y  $\Phi_a^{n+N_a} = \Phi_a^{n+N_a+N_b+N_c}$  con  $n = 1, 2, \dots, N_b$ . Estas ecuaciones determinan una matriz cuadrada  $M$  de dimensión  $N_{abcd} + 2N_e$ . Como el sistema es homogéneo, para obtener una solución no trivial su determinante debe ser cero, lo cual nos permite obtener una relación de dispersión que representamos por medio de las estructuras de bandas.

## III.2. Cálculo de las estructuras de bandas de un CF2D que contiene materiales dieléctricos

En esta sección se presenta un análisis de las estructuras de bandas para un CF2D formado por una celda unitaria cuadrada con inclusión cilíndrica de superficie lisa conteniendo un material dieléctrico. Estos cálculos fueron realizados variando las fracciones de llenado para las polarizaciones TE y TM.

### III.2.1. Estructuras de bandas de un CF2D con inclusión cilíndrica de superficie lisa

Para verificar el método integral consideramos un CF2D con una celda unitaria cuadrada y una inclusión cilíndrica como se muestra en la Fig. 18.

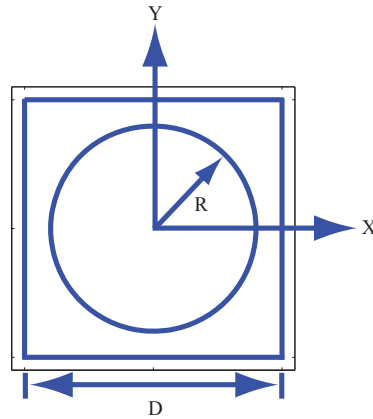


Figura 18. Celda unitaria cuadrada de un CF2D con inclusión cilíndrica de superficie lisa. La fracción de llenado está relacionada con el radio de la inclusión cilíndrica como  $R = \left(\sqrt{\frac{f}{\pi}}\right) D$ , donde el parámetro de red fue tomado como  $D = 1$ .

El cálculo de las estructuras de bandas están en términos de la frecuencia reducida  $\omega_r = \omega D/2\pi c$  y el vector de onda reducido  $k_r = kD/2\pi$  en la primera zona de Brillouin en el espacio  $k$  (recuadro derecho de la Fig. 19) para los diferentes valores de la fracción

de llenado  $f$ , que está relacionado con el radio de la inclusión cilíndrica como  $R = \left(\sqrt{\frac{f}{\pi}}\right) D$ , donde el parámetro de red fue tomado como  $D = 1$ . En la Fig. 19 se muestran las estructuras de bandas de una celda unitaria formada por dos materiales de constantes dieléctricas  $\varepsilon_1 = 1$  y  $\varepsilon_2 = 8.9$ . Para el caso de la polarización TE consideramos las fracciones de llenado  $f = 0.12$  (Fig. 19(a)) y  $f = 0.5$  (Fig. 19(b)). Similarmente, las Figs. 19(c) y (d) muestran las estructuras de bandas para el caso de la polarización TM con las mismas fracciones de llenado de los casos anteriores.

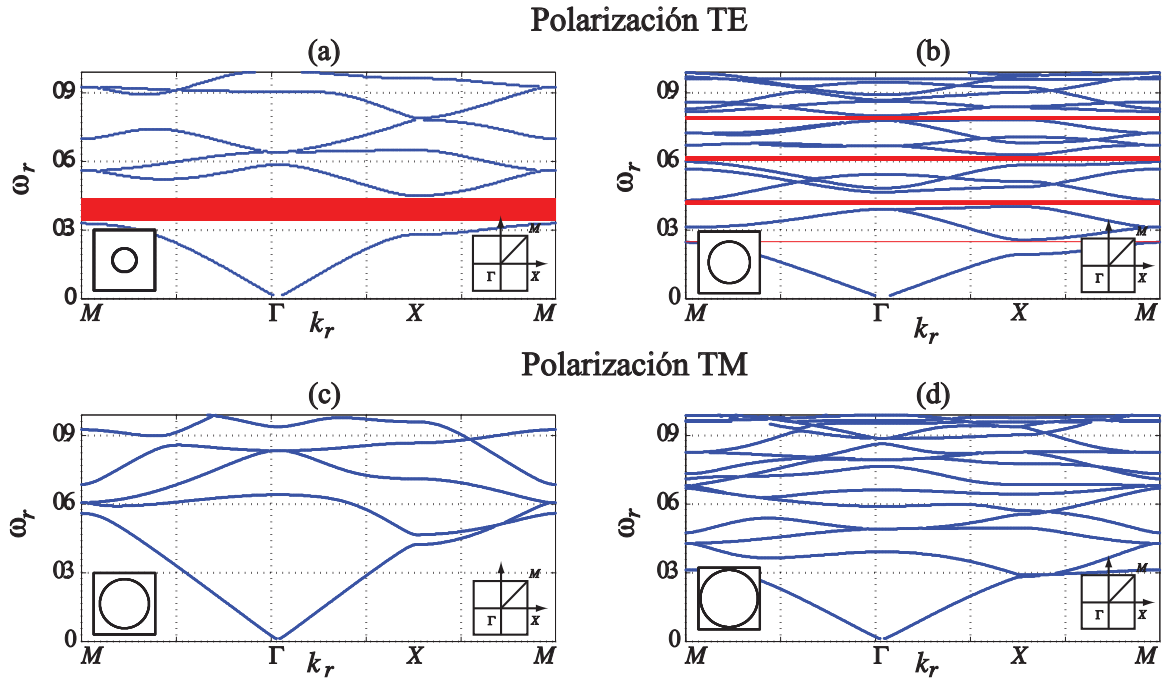


Figura 19. Estructuras de bandas para un CF2D con inclusión cilíndrica para dos materiales distintos de constantes dieléctricas  $\varepsilon_1 = 1$  y  $\varepsilon_2 = 8.9$ , con una fracción de llenado de ((a) y (c))  $f = 0.12$  para la polarización TE y TM, respectivamente, ((b) y (d))  $f = 0.5$  para la polarización TE y TM, respectivamente. El recuadro izquierdo inferior es la celda unitaria en el espacio real y el recuadro derecho inferior corresponde a la primera zona de Brillouin en el espacio  $k$ , respectivamente.

En la Fig. 19(a) podemos observar la aparición de una banda prohibida ancha (franja roja) alrededor de la frecuencia reducida  $\omega_r = 0.4$ . En la Fig. 19(b) podemos apreciar la aparición de cuatro bandas prohibidas muy angostas aproximadamente en



las frecuencias  $\omega_r = 0.25$ ,  $\omega_r = 0.42$ ,  $\omega_r = 0.61$  y en  $\omega_r = 0.79$ . Esto nos indica que al ser iluminado un CF truncado, la luz será reflejada completamente con estas frecuencias bajo la polarización TE. En las Figs. 19(c) y (d) no obtuvimos ninguna banda prohibida. Esto nos dice que bajo la polarización TM se transmitirá la luz a través del cristal para todo el intervalo de frecuencias de  $(0, 0.96)$ . También se puede observar que bajo la polarización TE, entre menor sea la fracción de llenado se puede tener bandas prohibidas más anchas, lo cual permite un mayor control de la propagación de la luz a través de un CF2D. Los cálculos de la Fig. 19(a) corresponden con los resultados publicados en la Ref. (Mendoza-Suárez *et al.*, 2006), lo cual nos indica que el método integral es confiable.

Vale la pena mencionar, que el intervalo de frecuencias de  $(0, 0.96)$  usado en este cálculo de las estructuras de bandas para un CF2D, lo elegimos con el propósito de comparar dichas estructuras con las estructuras de bandas de un CF2D que contiene LHM dispersivo. Para un metamaterial el intervalo de frecuencias está restringido al intervalo abierto  $(0.637, 0.960)$ , debido a que en este intervalo las funciones de permeabilidad magnética y permitividad eléctrica cumplen con las propiedades ópticas de los LHMs, como lo veremos en el siguiente capítulo.

## Capítulo IV

---

# ESTRUCTURAS DE BANDAS DE CFS EN 2D QUE CONTIENEN LHM DISPERSIVO

---

En este capítulo presentamos las características de las funciones de permeabilidad magnética y permitividad eléctrica, las cuales, son usadas para modelar numéricamente las propiedades ópticas de los LHMs. También se hace un análisis numérico con el método integral para calcular las estructuras de bandas de un CF2D formado por una celda unitaria cuadrada (compuesta de dieléctrico) con inclusión cilíndrica de superficie suave y aleatoriamente rugosa que contiene LHM dispersivo. Notaremos que la influencia de la rugosidad en la superficie es muy notoria en las estructuras de bandas, lo cual indica cambios considerables en las propiedades de transmisión en un cristal fotónico real. Esta idea de modelar superficies rugosas es relevante, ya que a pesar de la existencia de una tecnología bien desarrollada para la fabricación de superficies se tienen CFs con defectos.

Debido al elevado tiempo de cómputo requerido para obtener las estructuras de bandas para la superficie cilíndrica aleatoriamente rugosa se tuvo la necesidad de utilizar la computación en paralelo bajo el protocolo de MPI (Message Passing Interface). Por lo

cual, se hace una breve descripción de la programación en paralelo, donde se mencionan los conceptos básicos; así como sus propiedades principales. Mostramos el Pseudocódigo utilizado para obtener las estructuras de bandas del sistema propuesto en un tiempo de cómputo reducido.

## IV.1. Modelo de un medio con LHM dispersivo

En esta sección se presentan las características de las funciones de permeabilidad magnética y permitividad eléctrica, las cuales, nos permiten modelar numéricamente las propiedades ópticas de los LHMs. La celda unitaria que estamos considerando en este trabajo de tesis está compuesta por dos medios, uno de vacío y el otro de LHM dispersivo cuyas propiedades ópticas están dadas por la función de permitividad eléctrica

$$\varepsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \quad (115)$$

y la permeabilidad magnética

$$\mu(\omega) = 1 - \frac{F\omega^2}{\omega^2 - \omega_0^2}. \quad (116)$$

Estas funciones fueron deducidas a partir de las Ecs. (47) y (55) despreciando los  $\tau^{-2}$  y  $\gamma$  por ser cantidades muy pequeñas, respectivamente. Las funciones dadas por las Ecs. (115) y (116) están mostradas en la Fig. 20 con la frecuencias de plasma  $\omega_p = 10c/D$ , la frecuencia de resonancia  $\omega_0 = 4c/D$ , y el factor  $F = 0.56$  Ec. (56). En la Fig. 20 se usaron las unidades reducidas de la frecuencia dada por  $\omega_r = \omega D/2\pi c$  y el vector de onda de Bloch  $k_r = kD/2\pi$ .  $c$  representa la velocidad de la luz y  $D$  es una constante de normalización que elegimos para ser la dimensión del lado de una celda unitaria cuadrada. En unidades reducidas, las frecuencias de plasma y de resonancia son  $\omega_p = 1.592$  y  $\omega_0 = 0.637$ , respectivamente.

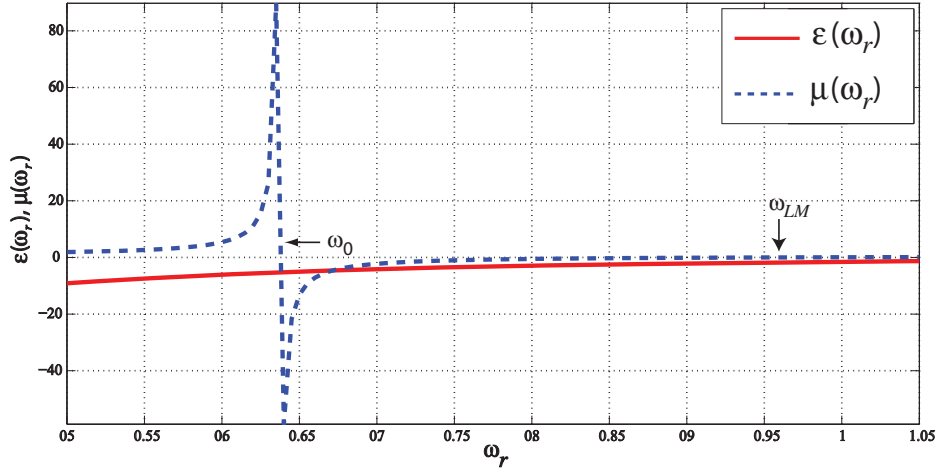


Figura 20. Función de la permitividad eléctrica y permeabilidad magnética de un LHM dispersivo como función de la frecuencia reducida.

Analizando la Ec. (115) se puede observar que cuando  $\omega \ll \omega_p$ , la función de permitividad eléctrica toma valores negativos muy grandes hasta llegar a  $\omega_p$  donde  $\varepsilon \approx 0$ , y pasando este punto,  $\varepsilon \rightarrow 1$ . Como estamos interesados en los valores para los cuales  $\varepsilon(\omega) < 0$  y  $\mu(\omega) < 0$ , simultáneamente, entonces, analicemos para que valores de  $\omega$  se obtienen valores negativos de la función de permeabilidad magnética.

Queremos que  $\mu(\omega) < 0$ , entonces la Ec. (116) se puede escribir como:

$$\frac{\omega^2(1-F) - \omega_0^2}{\omega^2 - \omega_0^2} < 0. \quad (117)$$

Multiplicando ambos miembros de la desigualdad (Ec. (117)) por  $\omega^2 - \omega_0^2$  se deben considerar dos casos.

Caso 1. Cuando  $\omega^2 - \omega_0^2 > 0$ .

Como  $\omega^2 - \omega_0^2 = (\omega - \omega_0)(\omega + \omega_0) > 0$ , entonces, la desigualdad se satisface cuando ambos factores tengan el mismo signo. Esto es, si  $\omega - \omega_0 > 0$  y  $\omega + \omega_0 > 0$  o si  $\omega - \omega_0 < 0$  y  $\omega + \omega_0 < 0$ . Consideremos estos dos nuevos casos.

Caso I.  $\omega - \omega_0 > 0$  y  $\omega + \omega_0 > 0$ . O bien,

$$\omega > \omega_0 \quad \text{y} \quad \omega > -\omega_0. \quad (118)$$

De este modo, ambas desigualdades se cumplen si  $\omega$  se encuentra en el intervalo  $(\omega_0, \infty)$ .

Caso II.  $\omega - \omega_0 < 0$  y  $\omega + \omega_0 < 0$ . Esto es,

$$\omega < \omega_0 \quad \text{y} \quad \omega < -\omega_0. \quad (119)$$

De igual manera, ambas desigualdades se cumplen si  $\omega$  se encuentra en el intervalo  $(-\infty, -\omega_0)$ . Por lo tanto, si combinamos las soluciones para los Casos I y II, se tiene que  $\omega$  satisface la desigualdad  $\omega^2 - \omega_0^2 > 0$  para valores en el intervalo  $(-\infty, -\omega_0) \cup (\omega_0, \infty)$ .

Ahora, multiplicando por  $\omega^2 - \omega_0^2 > 0$  en ambos lados de la desigualdad dada por la Ec. (117), se obtiene

$$\omega^2(1 - F) - \omega_0^2 < 0, \quad (120)$$

$$\omega^2 - \frac{\omega_0^2}{(1 - F)} < 0, \quad (121)$$

$$\left(\omega - \frac{\omega_0}{\sqrt{1 - F}}\right) \left(\omega + \frac{\omega_0}{\sqrt{1 - F}}\right) < 0. \quad (122)$$

La desigualdad dada por la Ec. (122) se satisface cuando ambos factores tengan signos contrarios. Es decir, si  $\omega - \frac{\omega_0}{\sqrt{1 - F}} > 0$  y  $\omega + \frac{\omega_0}{\sqrt{1 - F}} < 0$  o si  $\omega - \frac{\omega_0}{\sqrt{1 - F}} < 0$  y  $\omega + \frac{\omega_0}{\sqrt{1 - F}} > 0$ . Consideremos los dos casos.

Caso A. Cuando  $\omega - \frac{\omega_0}{\sqrt{1 - F}} > 0$  y  $\omega + \frac{\omega_0}{\sqrt{1 - F}} < 0$ . O bien,

$$\omega > \frac{\omega_0}{\sqrt{1 - F}} \quad \text{y} \quad \omega < -\frac{\omega_0}{\sqrt{1 - F}}. \quad (123)$$

Es imposible encontrar un valor para  $\omega$  que satisfaga ambas desigualdades dadas por la Ec. (123) debido a que no existe un valor para  $\omega$  que se encuentre en el intervalo abierto  $\left(\frac{\omega_0}{\sqrt{1 - F}}, \infty\right)$  y a la misma vez que  $\omega$  se encuentre en el intervalo abierto  $\left(-\infty, -\frac{\omega_0}{\sqrt{1 - F}}\right)$ . Por lo tanto, el Caso A no tiene solución.

Caso B. Cuando  $\omega - \frac{\omega_0}{\sqrt{1-F}} < 0$  y  $\omega + \frac{\omega_0}{\sqrt{1-F}} > 0$ . Esto es,

$$\omega < \frac{\omega_0}{\sqrt{1-F}} \quad \text{y} \quad \omega > -\frac{\omega_0}{\sqrt{1-F}}. \quad (124)$$

De este modo, ambas desigualdades se cumplen si  $\omega$  se encuentra en el intervalo  $\left(-\frac{\omega_0}{\sqrt{1-F}}, \frac{\omega_0}{\sqrt{1-F}}\right)$ . Por lo tanto, de los Casos A y B, se tiene que  $\omega$  satisface la desigualdad dada por la Ec. (122) para valores en el intervalo  $\left(-\frac{\omega_0}{\sqrt{1-F}}, \frac{\omega_0}{\sqrt{1-F}}\right)$ .

Así, los valores de  $\omega$  que satisfacen las desigualdades  $\omega^2 - \omega_0^2 > 0$  y  $\omega^2 - \frac{\omega_0^2}{(1-F)} < 0$  es el conjunto de todos los valores que se encuentran en el intervalo  $\left(-\frac{\omega_0}{\sqrt{1-F}}, -\omega_0\right) \cup \left(\omega_0, \frac{\omega_0}{\sqrt{1-F}}\right)$ .

Caso 2. Cuando  $\omega^2 - \omega_0^2 < 0$ .

Procediendo de la misma manera que en el Caso 1 se tiene:

Caso I.  $\omega - \omega_0 > 0$  y  $\omega + \omega_0 < 0$ . O bien,

$$\omega > \omega_0 \quad \text{y} \quad \omega < -\omega_0. \quad (125)$$

Es imposible encontrar un valor para  $\omega$  que satisfagan ambas desigualdades dadas por la Ec. (125). Por lo tanto, el Caso I no tiene solución.

Caso II,  $\omega - \omega_0 < 0$  y  $\omega + \omega_0 > 0$ . Esto es,

$$\omega < \omega_0 \quad \text{y} \quad \omega > -\omega_0. \quad (126)$$

De este modo, ambas desigualdades se cumplen si  $\omega$  se encuentra en el intervalo  $(-\omega_0, \omega_0)$ . Por lo tanto, de los Casos I y II, se tiene que  $\omega$  satisface la desigualdad  $\omega^2 - \omega_0^2 < 0$  para valores en el intervalo  $(-\omega_0, \omega_0)$ .

Multiplicando por  $\omega^2 - \omega_0^2 < 0$  en ambos lados de la desigualdad dada por la Ec. (117) y cambiando el sentido de la desigualdad, se obtiene

$$\left(\omega - \frac{\omega_0}{\sqrt{1-F}}\right) \left(\omega + \frac{\omega_0}{\sqrt{1-F}}\right) > 0. \quad (127)$$

La desigualdad dada por la Ec. (127) se satisface cuando ambos factores tengan signos iguales; es decir, si  $\omega - \frac{\omega_0}{\sqrt{1-F}} > 0$  y  $\omega + \frac{\omega_0}{\sqrt{1-F}} > 0$  o si  $\omega - \frac{\omega_0}{\sqrt{1-F}} < 0$  y  $\omega + \frac{\omega_0}{\sqrt{1-F}} < 0$ . Consideremos los dos casos.

Caso A. Cuando  $\omega - \frac{\omega_0}{\sqrt{1-F}} > 0$  y  $\omega + \frac{\omega_0}{\sqrt{1-F}} > 0$ . Esto es,

$$\omega > \frac{\omega_0}{\sqrt{1-F}} \quad \text{y} \quad \omega > -\frac{\omega_0}{\sqrt{1-F}}. \quad (128)$$

De este modo, ambas desigualdades se cumplen si  $\omega$  se encuentra en el intervalo

$$\left( \frac{\omega_0}{\sqrt{1-F}}, \infty \right).$$

Caso B. Cuando  $\omega - \frac{\omega_0}{\sqrt{1-F}} < 0$  y  $\omega + \frac{\omega_0}{\sqrt{1-F}} < 0$ . O bien,

$$\omega < \frac{\omega_0}{\sqrt{1-F}} \quad \text{y} \quad \omega < -\frac{\omega_0}{\sqrt{1-F}}. \quad (129)$$

De este modo, ambas desigualdades se cumple si  $\omega$  se encuentra en el intervalo  $\left( -\infty, -\frac{\omega_0}{\sqrt{1-F}} \right)$ .

Por lo tanto, si combinamos las soluciones para los Casos A y B, se tiene que  $\omega$  satisface la desigualdad dada por la Ec. (127) para valores en el intervalo  $\left( -\infty, -\frac{\omega_0}{\sqrt{1-F}} \right) \cup \left( \frac{\omega_0}{\sqrt{1-F}}, \infty \right)$ .

De este caso, se concluye que es imposible encontrar un valor de  $\omega$  que satisfaga las desigualdades,  $\omega^2 - \omega_0^2 < 0$  y  $\omega^2 - \frac{\omega_0^2}{(1-F)} > 0$ .

Con los resultados obtenidos podemos concluir que la desigualdad dada por la Ec. (117) se cumple si  $\omega$  se encuentra en el intervalo  $\left( -\frac{\omega_0}{\sqrt{1-F}}, -\omega_0 \right) \cup \left( \omega_0, \frac{\omega_0}{\sqrt{1-F}} \right)$ . Como los valores para  $\omega$  negativos no tienen sentido físico, se concluye que la función de permeabilidad magnética tomará valores negativos si  $\omega$  se encuentra en el intervalo  $\left( \omega_0, \frac{\omega_0}{\sqrt{1-F}} \right)$ . Por lo tanto, la región donde el LHM presenta un índice de refracción negativo está dentro del rango de frecuencias  $\omega_0 < \omega < \omega_{LM}$  con  $\omega_{LM} = \omega_0/\sqrt{1-F}$ .

## IV.2. Estructuras de bandas de un CF2D con inclusión cilíndrica que tiene una superficie lisa

En esta sección se analizan las estructuras de bandas de un CF2D formado por una celda unitaria cuadrada (compuesta de dieléctrico) con inclusión cilíndrica que tiene una superficie lisa que contiene LHM dispersivo. Las estructuras se obtuvieron con diferentes fracciones de llenado para las polarizaciones TE y TM.

Primeramente presentamos las estructuras de bandas para el caso de la polarización TE, en términos de la frecuencia reducida  $\omega_r = \omega D/2\pi c$  y el vector de onda reducido  $k_r = kD/2\pi$  en la primera zona de Brillouin en el espacio  $k$ . Recordemos que la fracción de llenado  $f$ , está relacionada con el radio de la inclusión cilíndrica como  $R = \left(\sqrt{\frac{f}{\pi}}\right) D$ , donde el parámetro de red fue tomado como  $D = 1$ .

En la Fig. 21 mostramos las estructuras de bandas de un CF2D con una celda unitaria cuadrada que tiene inclusión cilíndrica compuesta por dos medios; vacío o aire, con constante dieléctrica  $\varepsilon_1 = 1$  y constante de permeabilidad magnética  $\mu_1 = 1$ , y LHM dispersivo, cuyas propiedades ópticas están dadas por las funciones de permitividad eléctrica  $\varepsilon_2(\omega)$  y permeabilidad magnética  $\mu_2(\omega)$  descritas en la sección anterior. Para estos cálculos usamos los parámetros  $\omega_p = 1.592$ ,  $\omega_0 = 0.637$  y  $F = 0.56$ , variando la fracción de llenado  $f = 0.12$  (Fig. 21(a)),  $f = 0.36$  (Fig. 21(b)),  $f = 0.50$  (Fig. 21(c)) y  $f = 0.68$  (Fig. 21(d)) para los intervalos de  $k_r$  con 2895 puntos y de  $\omega_r \in (0.68, 0.959)$  con 2700 puntos. En los recuadros izquierdos se muestran las celdas unitarias cuadradas con sus inclusiones cilíndricas para los diferentes valores de la fracción de llenado  $f$ , y en los recuadros derechos se muestra la primera zona de Brillouin en el espacio  $k$ .

En las Figs. 21(a) y (b) podemos observar la aparición de bandas prohibidas angostas, aproximadamente en las frecuencias reducidas  $\omega_r = 0.697$  y  $\omega_r = 0.745$ , re-



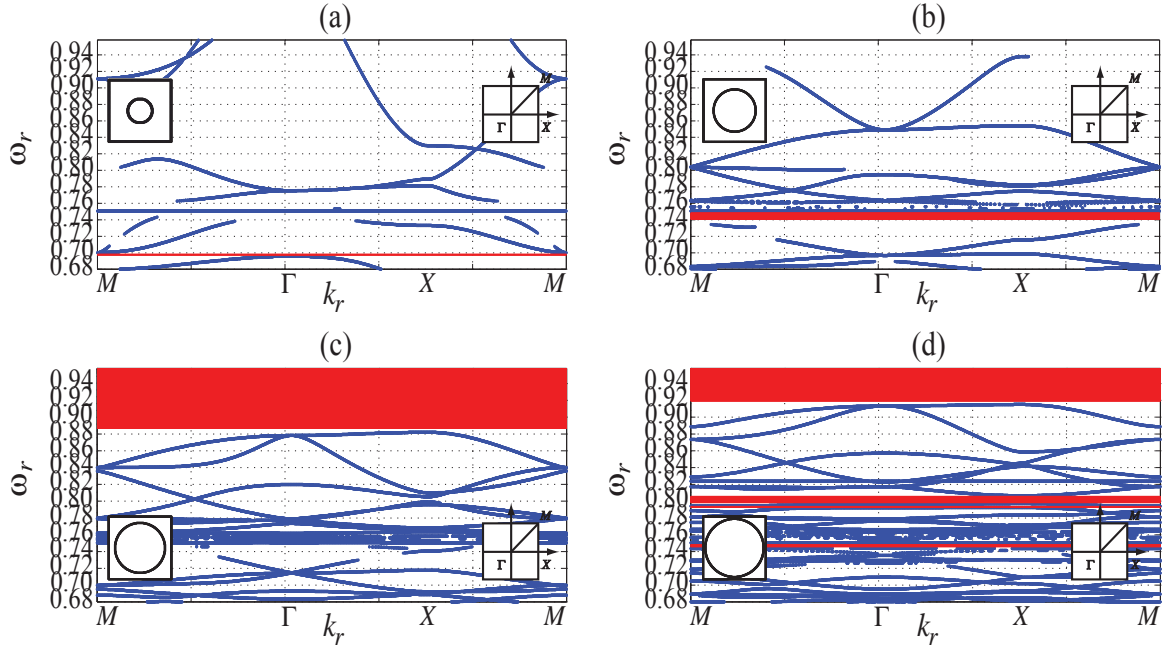


Figura 21. Estructuras de bandas de un CF2D con una celda unitaria cuadrada con inclusión cilíndrica compuesta por dos medios: vacío ( $\varepsilon_1 = 1$ ,  $\mu_1 = 1$ ) y LHM dispersivo ( $\varepsilon(\omega)$  y  $\mu(\omega)$ ), con  $\omega_p = 1.592$ ,  $\omega_0 = 0.637$  y  $F = 0.56$ . Para el caso de la polarización TE con las fracciones de llenado (a)  $f = 0.12$  y (b)  $f = 0.36$ , (c)  $f = 0.50$  y (d)  $f = 0.68$ . El recuadro izquierdo representa la celda unitaria en el espacio real y el recuadro derecho corresponde a la primera zona de Brillouin en el espacio  $k$ , respectivamente.

spectivamente. En la Fig. 21(c), claramente observamos una banda prohibida bastante ancha para la región de altas frecuencias al igual que en la Fig. 21(d), cuya banda es más angosta en comparación con la que aparece en la Fig. 21(c). Además, en la Fig. 21(d) aparecen tres bandas más alrededor de las frecuencias reducidas  $\omega_r = 0.747$ ,  $\omega_r = 0.793$  y  $\omega_r = 0.802$ . Esto nos indica que al ser iluminado un CF truncado, la luz será reflejada completamente para estas frecuencias bajo la polarización TE. También se puede observar que entre mayor es la fracción de llenado, se puede tener mayor control de la propagación de la luz a través de un CF2D que contiene LHM dispersivo debido a la influencia de las bandas prohibidas.

Ahora vamos a analizar el caso para la polarización TM. En la Fig. 22 presentamos

las estructuras de bandas de un CF2D bajo las mismas condiciones del caso anterior. Similarmente usamos las mismas fracciones de llenado  $f = 0.12$  (Fig. 22(a)),  $f = 0.36$  (Fig. 22(b)),  $f = 0.50$  (Fig. 22(c)) y  $f = 0.68$  (Fig. 22(d)) para los intervalos de  $k_r$  con 1929 puntos y de  $\omega_r \in (0.68, 0.959)$  con 1700 puntos.

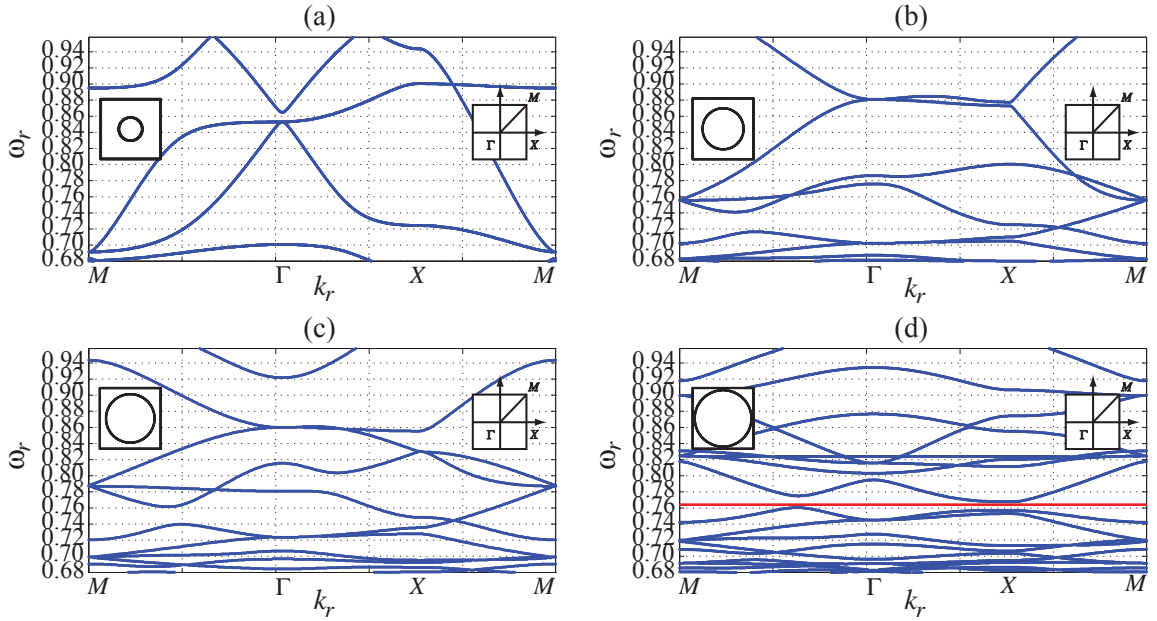


Figura 22. Estructuras de bandas de un CF2D con una celda unitaria cuadrada con inclusión cilíndrica compuesta por dos medios: vacío ( $\varepsilon_1 = 1$ ,  $\mu_1 = 1$ ) y LHM dispersivo ( $\varepsilon(\omega)$  y  $\mu(\omega)$ ), con  $\omega_p = 1.592$ ,  $\omega_0 = 0.637$  y  $F = 0.56$ . Para el caso de la polarización TM con las fracciones de llenado (a)  $f = 0.12$  y (b)  $f = 0.36$ , (c)  $f = 0.50$  y (d)  $f = 0.68$ . El recuadro izquierdo representa la celda unitaria en el espacio real y el recuadro derecho corresponde a la primera zona de Brillouin en el espacio  $k$ , respectivamente.

En las Figs. 22(a), (b) y (c) no obtuvimos alguna banda prohibida en comparación con el caso de la polarización TE. Esto nos dice que bajo la polarización TM se transmitirá la luz a través del CF para todo intervalo de frecuencias de  $(0.68, 0.959)$ . Sin embargo, en la Fig. 22(d) se puede observar la aparición de una banda prohibidas angosta, aproximadamente en la frecuencia reducida  $\omega_r = 0.764$ , lo cual nos indica que, para esta frecuencia reducida, la luz será reflejada completamente. Al igual que en el caso de la polarización TE se puede observar que para una fracción de llenado grande (bajo

la polarización TM) se puede tener un mayor control de la propagación de la luz en un CF2D que contiene LHM dispersivo debido a la influencia de las bandas prohibidas.

Con esto podemos concluir que, bajo la polarización TE y para una fracción de llenado grande, se puede tener un mayor control de la propagación de la luz a través de un CF2D que contiene LHM dispersivo. También se puede observar que las estructuras de bandas de un CF2D que contiene LHM dispersivo tienen una estructura distinta para cada polarización y cada fracción de llenado a diferencia de un CF2D con ambos medios dieléctricos.

Es importante mencionar que en el cálculo de la estructura de bandas de la Fig. 21(a) para un intervalo de muestreo  $\Delta s = 1/60$  se tuvo un rango de la matriz de 384 para la polarización TE, se requirió un tiempo de cómputo de 6 horas. Para las otras figuras previamente mostradas en este capítulo se necesitó un tiempo de cómputo menor. Como nuestro objetivo es analizar las estructuras de bandas de un CF2D formado por una celda unitaria cuadrada (compuesta de dieléctrico) que contiene una inclusión cilíndrica con una superficie aleatoriamente rugosa que contiene LHM dispersivo, requerimos una discretización mayor para poder modelar el sistema propuesto. Esto implica un tiempo mayor de cómputo (alrededor de 3.6 meses) para obtener las estructuras de bandas en forma secuencial (como lo veremos en la sección IV.4), por lo que tuvimos la necesidad de utilizar la computación en paralelo. En la siguiente sección se hace una breve descripción de la programación en paralelo. Si el lector está interesado en un desarrollo más detallado de la programación, puede consultar la Ref. (Hernández, 2015).

## IV.3. Breve descripción del MPI

En esta sección se da una breve descripción de la programación en paralelo bajo el protocolo de MPI (Message Passing Interface). Mencionamos los conceptos básicos; así como las rutinas básicas utilizadas para la implementación en MPI. Además, presentamos el pseudo código utilizado para reducir los tiempos de cómputo y así obtener las estructuras de bandas del sistema propuesto.

### IV.3.1. Conceptos básicos

La computación en paralelo es una técnica de programación en la que muchas instrucciones se ejecutan simultáneamente. Se basa en el principio de que los problemas grandes se pueden dividir en partes más pequeñas que pueden resolverse de forma concurrente (“en paralelo”).

La programación en paralelo consiste en enlazar y hacer llamadas dentro del programa por medio de bibliotecas que manejarán el intercambio de datos entre los procesadores. En esta tesis se hace uso del paso de mensajes bajo el protocolo de MPI (Message Passing Interface) que es un modelo de comunicación ampliamente usado en computación paralela.

En MPI uno de los principales esquemas que se emplean en la comunicación y generación de los procesos es el modelo de Maestro-Esclavo. Un proceso maestro divide y distribuye el trabajo en sub-tareas, las cuales las asigna a cada nodo conocido como “trabajador” o “esclavo” (Ver Fig. 23). Al terminar cada “trabajador” su parte, envían los resultados al maestro para que este recopile la información y la presente.

MPI, es entonces, un estándar para la implementación de sistemas de paso de mensajes diseñado para funcionar en una amplia variedad de computadoras en paralelo y de tal forma que los códigos sean portables. MPI proporciona una librería para C, C++

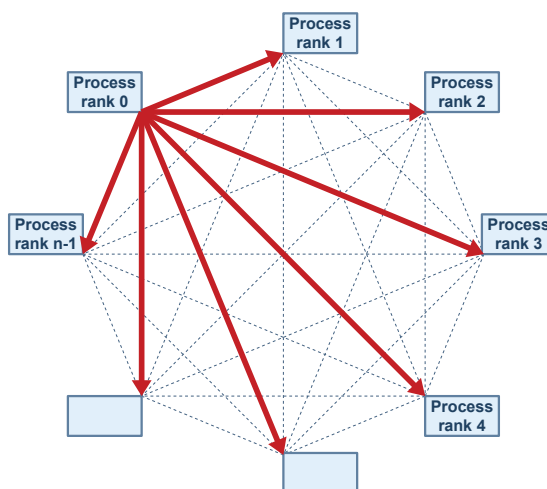


Figura 23. Modelo Maestro-Esclavo. El nodo con rango 0 actuará como “maestro” y los nodos con rangos 1 a  $n - 1$  actuarán como “esclavos”. El nodo maestro enviará una tarea a cada nodo esclavo.

o Fortran.

Presentamos ahora algunos de los conceptos relacionados con la computación en paralelo.

#### **Tarea:**

Sección lógica discreta de trabajo computacional. Suele ser un programa o un conjunto de instrucciones que es ejecutable por un procesador.

#### **Tarea en paralelo:**

Tarea que puede ser ejecutada de forma segura (produciendo resultados correctos) por múltiples procesadores simultáneamente.

#### **Ejecución en paralelo:**

Ejecución de un programa por más de una tarea, siendo cada tarea capaz de ejecutar la misma expresión o una diferente, y todas en un mismo instante de tiempo.

#### **Memoria distribuida:**

En el sentido del hardware, se refiere a un acceso a memoria basado en red para una memoria física que no es común. Como modelo de programación, las tareas sólo pueden

ver lógicamente la memoria de la máquina local y deben utilizar comunicaciones para acceder a la memoria de otras máquinas donde se ejecutan el resto de las tareas.

#### **Comunicaciones:**

Típicamente, las tareas paralelas necesitan intercambiar datos. Hay varios caminos para realizar esto, tales como tener una memoria compartida en bus o sobre una red. Sin embargo, en la actualidad, el hecho de intercambiar datos se le denomina comunicaciones, independientemente del método empleado.

#### **Sincronización:**

Es la coordinación de tareas paralelas en tiempo real, ocasionalmente a menudo asociado a las comunicaciones. La forma en que se implementa la sincronización entre tareas es poniendo un punto de sincronismo dentro del código de una aplicación, de modo que las tareas no continuarán con su trabajo hasta que todas las tareas hayan llegado al mismo punto de sincronismo. La sincronización implica la espera de, al menos una tarea y, por lo tanto, puede causar el incremento del tiempo de ejecución de la aplicación paralela.

### **IV.3.2. Arquitecturas de Memoria**

Existen diferentes arquitecturas de memoria en los ordenadores utilizados para la programación en paralelo. En este trabajo de tesis estamos interesados en la arquitectura de Memoria compartida. En esta arquitectura, una máquina paralela con memoria compartida (una computadora con muchos CPU's o núcleos que acceden al mismo espacio de memoria), los mensajes pueden ser enviados depositando sus contenidos sobre un área de memoria compartida (ver Fig. 24).

Una de las ventajas del método de memoria compartida es que el espacio de direccionamiento global presenta un fácil manejo desde el punto de vista del programador a

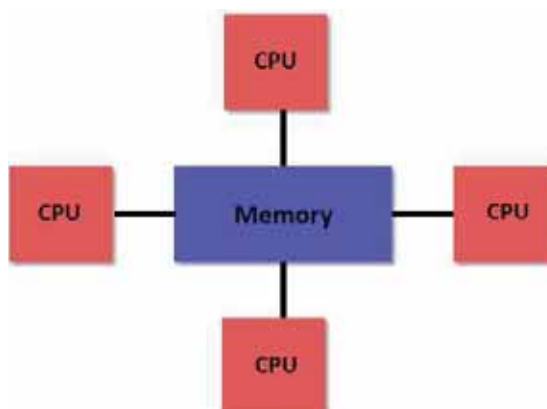


Figura 24. Memoria compartida por un conjunto de procesadores.

la hora de acceder a memoria. Además, la compartición de datos entre tareas es rápido y uniforme, debido a la proximidad de la memoria a las CPU's. Por el contrario, una gran desventaja que presenta este sistema es que al añadir más CPU's incrementa de forma geométrica el tráfico asociado con la gestión de la memoria.

El modelo básico de paralelismo que implementa MPI es SPMD (Single Program Multiple Data) donde todos los procesadores trabajan con el mismo programa, pero los datos pueden ser diferentes. También se puede trabajar con un modelo MPMD (Multiple Program Multiple Data) que ejecutan programas diferentes en los distintos nodos.

Por último, debemos tener en cuenta que, solo se podrán paralelizar aquellos problemas cuya estructura lógica subyacente sea de naturaleza paralela; es decir, que nuestro problema pueda ser analizado a partir de la descomposición de sus partes, y estas partes tengan cierto grado de independencia.

### IV.3.3. Rutinas básicas de la programación con MPI

Como mencionamos anteriormente, MPI es una librería de rutinas y funciones, la cual está disponible en los lenguajes C, C++ y Fortran. En este trabajo se hará uso del lenguaje Fortran 90. Para el desarrollo de programas en paralelo con MPI se debe conocer dichas rutinas (en Fortran). Debemos mencionar que todas las rutinas comienzan con el prefijo `MPI_`.

Todos los programas escritos en MPI deben contener la directiva de preprocesador *include* `'mpi.h'` para Fortran. El archivo `mpi.h` contiene las definiciones macros y prototipos de función necesarios para compilar los programas MPI.

Antes de mencionar las principales rutinas de MPI, es importante conocer las siguientes definiciones:

#### Grupos

En MPI se considera a un *grupo* como un conjunto ordenado de procesos, y cada proceso se identifica por medio de un número entero denominado rango (*rank*).

#### Comunicador

La definición del comunicador es esencial ya que es este el que permite enviar mensajes de una computadora a otra. El intercambio de información (comunicaciones) entre grupos se hace a través del elemento fundamental de MPI.

Un comunicador especifica un dominio de comunicación; es decir, identifica a un grupo de procesos y el contexto en el cual se llevará a cabo una operación. Proporciona también mecanismos para identificar subconjuntos de procesos para el desarrollo de programas modulares, garantizando que los mensajes concebidos para diferentes propósitos no sean confundidos.

Cada proceso tiene una identidad (*rank*) dentro del comunicador, que va de 0 a  $N - 1$ , donde hay  $N$  procesos. Actualmente se puede disponer de dos tipos de comu-



nicadores, un intracomunicador para comunicaciones dentro de un grupo o un intercomunicador para comunicaciones entre grupos. Para programas simples sólo se usan intracomunicadores pues no suele ser necesario más que un grupo y generalmente se usa el comunicador por defecto **MPI\_COMM\_WORLD** que engloba a todos los procesos dentro de una aplicación.

### Identificadores

En un programa paralelo es importante conocer en todo momento, ¿Cuántos procesos hay? y ¿Qué procesos están ejecutándose? Algunas veces el *rank* es llamado “process ID”. Los *ranks* son contiguos y empiezan desde cero. Es usado por el programador para identificar la fuente y destino de los mensajes y con frecuencia se utiliza con un condicional.

Ahora, mencionaremos las principales rutinas de MPI. Antes de que podamos llamar a cualquier otra rutina de MPI debemos hacer una llamada a **call MPI\_INIT(ierr)**. Esta rutina sólo debe ser llamada una vez, ya que inicializa el proceso en MPI y bloquea la ejecución hasta que todos los procesos hayan sido inicializados. Después de que el programa haya acabado de utilizar la librería MPI debemos hacer una llamada a **call MPI\_FINALIZE(ierr)**. Esta rutina termina la conexión MPI y bloquea la ejecución hasta que todos los procesos terminen; además, limpia todos los trabajos no finalizados por MPI (por ejemplo, envíos pendientes que no hayan sido completados, etc.).

Otras de las preguntas importantes en todo programa paralelo son: ¿Cuántos procesos hay?, ¿Quién soy yo? y ¿En dónde estoy corriendo? El valor para el “número de procesos” ejecutados en el grupo **MPI\_COMM\_WORLD** se obtiene con la rutina **call MPI\_COMM\_SIZE(MPI\_COMM\_WORLD,nproces,ierr)**, para “quién soy yo” (número de rango del proceso actual) con **call MPI\_COMM\_RANK(MPI\_COMM\_WORLD,rank,ierr)** y para “en dónde

estoy corriendo” con `MPI_GET_PROCESSOR_NAME(hostname,resultlength,ierr)`.

El identificador o rango es un número entre cero (0) y el total de procesos menos uno (`procesos-1`).

MPI maneja un sistema de memoria para almacenamiento de mensajes y representaciones de objetos por medio de grupos, comunicadores y tipos de datos. El usuario no puede acceder directamente a esta memoria y los objetos ahí almacenados.

#### **IV.3.4. Rutinas básicas de envío y recepción de mensajes bloqueantes**

El mecanismo de comunicación básico de MPI es la transferencia de mensajes entre un par de procesadores, de un lado el emisor (el que envía) y del otro lado el receptor (el que recibe). Es decir, la transmisión de datos se realiza mediante una comunicación uno a uno, comúnmente llamado Punto a Punto. En la comunicación Punto a Punto es posible transmitir valores escalares y arreglos continuos de valores para tipos definidos por MPI.

El envío y recepción de un mensaje involucra el intercambio de información entre procesos. La operación de envío en el emisor de un procesador origen a otro es realizada por la rutina `call MPI_SEND(buf1,count1,datatype1,dest1,tag1,comm1,ierr)`. El procesador origen espera a que el procesador destinatario haya recibido el mensaje antes de continuar trabajando. Al ser bloqueante significa que hasta que el mensaje no haya sido enviado (que salga del búfer de salida) no se continúa la ejecución.

La operación de recepción de mensajes de un procesador a otro es realizada mediante la función `call MPI_RECV(buf2,count2,datatype2,source2,tag2,comm2,status2,ierr)`.

Esta función bloquea el proceso hasta que se reciba un mensaje con las características especificadas, lo cual significa que el procesador destinatario no puede continuar su

trabajo hasta haber recibido dicho mensaje.

Los parámetros usados en las rutinas de envío y recepción tiene el siguiente significado:

buf1: dirección inicial del bufer de envío

count1: número de elementos a enviar

datatype1: tipo de dato de cada elemento que se va a enviar

dest1: identificador del proceso destino

tag1: entero que representa la etiqueta del mensaje

comm1: comunicador utilizado para la comunicación

buf2: dirección del bufer de recepción

count2: número máximo de elementos que se espera recibir

datatype2: tipo de dato de cada elemento que se va a recibir

dest2: identificador del proceso enviador

tag2: etiqueta del mensaje

comm2: comunicador utilizado para la comunicación

status2: contiene datos relevantes sobre el mensaje

Los nombres predefinidos para los tipos de datos más comunes son:

Tipo de datos en MPI	Tipo de dato en Fortran
MPI_INTEGER	INTEGER
MPI_REAL	REAL
MPI_DOUBLE_PRECISION	DOUBLE PRECISION
MPI_COMPLEX	COMPLEX
MPI_LOGICAL	LOGICAL
MPI_CHARACTER	CHARACTER

Con esta breve descripción de la programación en paralelo bajo el protocolo de MPI

la usaremos para cumplir el objetivo de este trabajo de tesis.

### IV.3.5. Pseudocódigo para comunicación bloqueante

A continuación se presenta el pseudocódigo para el cálculo de las estructuras de bandas de un CF2D con una inclusión cilíndrica formada con una superficie aleatoriamente rugosa que contiene LHM dispersivo usando comunicación bloqueante.

---

**Pseudocódigo 1** Cálculo de las estructuras de bandas de un CF2D bajo la programación en paralelo con MPI FORTRAN usando comunicacion bloqueante

---

```

1: entero MAESTRO, nproceso, numworkers, chunksize, nkas, nwas, extra, indice, indice2,
   vini
2: real Determinante(nkas*nwas), Omegas(nkas*nwas), Vectorks(nkas*nwas), correlación, sigma, kmin, kmax
3: {Medimos el tiempo inicial de ejecución}
4: {Bloque de instrucciones del padre}
5: si (Soy MAESTRO) entonces
6:     para nproceso= 1 hasta numworkers hacer
7:         chunksize=nkas/numworkers
8:         extra= MOD(nkas,numworkers)
9:         si (nproceso  $\leq$  extra) entonces
10:             chunksize= chunksize+1
11:             indice=1+chunksize*(nproceso-1)
12:             indice2=1+nwas*(chunksize)*(nproceso-1)
13:         si no
14:             indice=1+chunksize*(nproceso-1)+extra
15:             indice2=1+nwas*(chunksize)*(nproceso-1)+nwas*extra
16:         fin si

```

```

17:         {Se envía a los esclavos los arreglos, así como los índices inicial y final con
           los que van a trabajar}
18:         enviar(indice)
19:         enviar(indice2)
20:         enviar(chunksize)
21:         enviar(Determinante(indice2))
22:         enviar(Omegas(indice2))
23:         enviar(Vectorks(indice2))
24:     fin para
25:     {Se colecta el resultado de los esclavos}
26:     abrir(Determinante.dat)
27:     para nproceso=1 hasta numworkers hacer
28:         recibir(indice)
29:         recibir(indice2)
30:         recibir(chunksize)
31:         recibir(Determinante(indice2))
32:         recibir(Omegas(indice2))
33:         recibir(Vectorks(indice2))
34:         {Se guarda el determinante en Determinante.dat}
35:         para vini=indice2 hasta indice2+nwas*chunksize-1 hacer
36:             escribir(Vectorks(vini),Omegas(vini),Determinante(vini))
37:         fin para
38:     fin para
39:     Cierre(Determinante.dat)
40:     call CreaBandas(Determinante(nkas,nwas))
41: si no

```

```

42:     {Los esclavos reciben los arreglos, así como los índices inicial y final con los que
      van a trabajar}
43:     recibir(indice)
44:     recibir(indice2)
45:     recibir(chunksize)
46:     recibir(Determinante(indice2))
47:     recibir(Omegas(indice2))
48:     recibir(Vectorks(indice2))
49:     call celdaRugosidad(correlación,sigma)
50:     call KBloch(kmin,kmax)
51:     {Distribuimos el trabajo a cada esclavo}
52:     para k=indice hasta indice+chunksize-1 hacer
53:         para kk=1 hasta nwas hacer
54:             Vectorks((k-1)*nwas+kk)=k
55:             Omegas((k-1)*nwas+kk)= call VecTrabajo(wmin,wmax)
56:             Determinante((k-1)*nwas+kk)= call Det(M(nkas,nwas))
57:         fin para
58:     fin para
59:     {Enviamos los resultados de cada esclavo al MAESTRO}
60:     enviar(indice)
61:     enviar(indice2)
62:     enviar(chunksize)
63:     enviar(Determinante(indice2))
64:     enviar(Omegas(indice2))
65:     enviar(Vectorks(indice2))
66: fin si
67: {Medimos el tiempo final de ejecución}

```

## IV.4. Estructuras de bandas de un CF2D con inclusión cilíndrica que tiene una superficie aleatoriamente rugosa

En esta sección analizaremos el cálculo de las estructuras de bandas de un CF2D formado por una celda unitaria cuadrada (compuesta de dieléctrico) con una inclusión cilíndrica que tiene una superficie aleatoriamente rugosa que contiene LHM dispersivo. Las estructuras se obtuvieron con diferentes fracciones de llenado para las polarizaciones TE y TM.

A pesar de la existencia de una tecnología bien desarrollada se tienen defectos en la fabricación de superficies para los CFs. Por esta razón, estamos interesados en estudiar la influencia de la rugosidad en las paredes de un CF2D real. Para estudiar los efectos de la rugosidad, consideramos un perfil de superficie aleatorio sobre la inclusión cilíndrica de la celda unitaria. Este perfil está definido por una realización de un proceso aleatorio de correlación Gaussiana que obedece una función de densidad de probabilidad exponencial negativa (para más detalles ver la Ref. (Maradudin *et al.*, 1990)).

En la Fig. 25, mostramos las estructuras de bandas de un CF2D formado por una celda unitaria cuadrada con inclusión cilíndrica que tiene una superficie aleatoriamente rugosa. La celda está compuesta por dos materiales: vacío o aire, con constante dieléctrica  $\varepsilon_1 = 1$  y constante de permeabilidad magnética  $\mu_1 = 1$ , y LHM dispersivo, cuyas propiedades ópticas están dadas por las funciones de permitividad eléctrica  $\varepsilon_2(\omega)$  y permeabilidad magnética  $\mu_2(\omega)$ , ya descritas anteriormente. Para comparar los resultados con el caso de superficies lisas (Fig. 21), usamos los mismos parámetros para diferentes fracciones de llenado  $f = 0.12$  (Fig. 25(a)),  $f = 0.36$  (Fig. 25(b)),  $f = 0.50$  (Fig. 25(c)) y  $f = 0.68$  (Fig. 25(d)) para los intervalos de  $k_r$  con 2895 puntos y de

$\omega_r \in (0.68, 0.959)$  con 2600 puntos, bajo la polarización TE. En los recuadros izquierdos se muestran las celdas unitarias cuadradas con sus inclusiones cilíndricas que tienen una superficie aleatoriamente rugosa. Para modelar la superficie consideramos un perfil que tiene rugosidad aleatoria con una longitud de correlación  $a = 0.05236$  y una desviación estándar de las alturas  $\delta = 0.02$ , para los diferentes valores de la fracción de llenado  $f$ . En los recuadros derechos se muestra la primera zona de Brillouin en el espacio  $k$ .

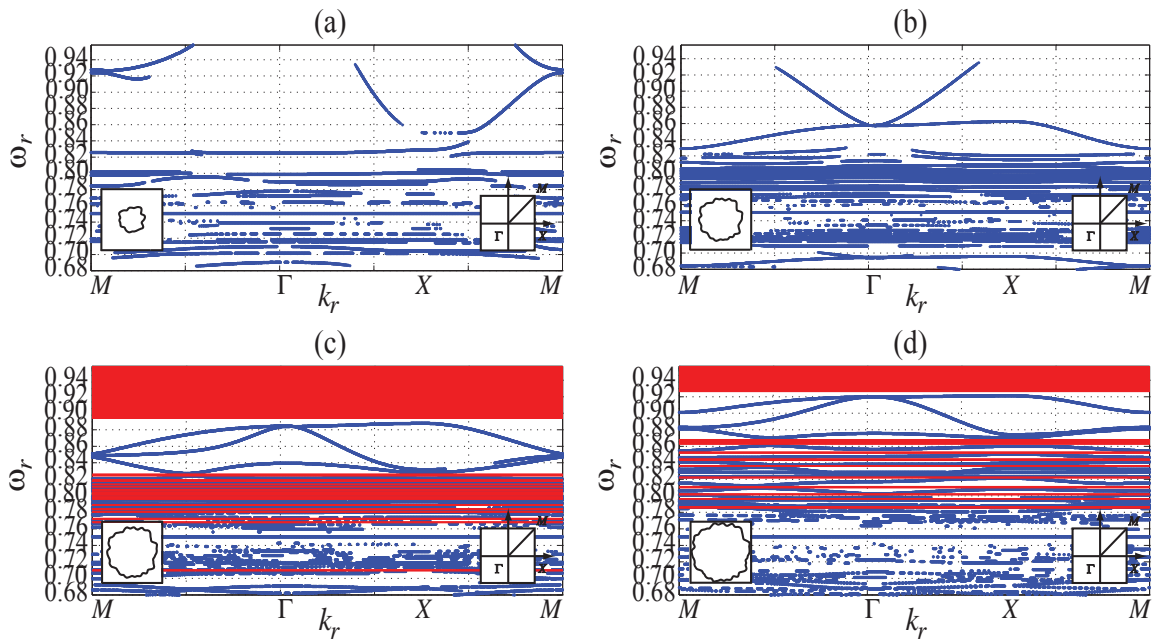


Figura 25. Estructuras de bandas de un CF2D con una celda unitaria cuadrada que tiene una inclusión cilíndrica con una superficie aleatoriamente rugosa compuesta por dos medios; vacío ( $\varepsilon_1 = 1$ ,  $\mu_1 = 1$ ) y LHM dispersivo ( $\varepsilon(\omega)$  y  $\mu(\omega)$ ), con  $\omega_p = 1.592$ ,  $\omega_0 = 0.637$  y  $F = 0.56$ . Para el caso de la polarización TE con las fracciones de llenado (a)  $f = 0.12$ , (b)  $f = 0.36$ , (c)  $f = 0.50$  y (d). El recuadro izquierdo representa la celda unitaria en el espacio real y el recuadro derecho corresponde a la primera zona de Brillouin en el espacio  $k$ , respectivamente.

Como observamos en la Fig. 25, el efecto de la rugosidad modifica considerablemente las estructuras de bandas. Podemos apreciar que para frecuencias grandes (longitudes de ondas pequeñas) la rugosidad provoca que algunas zonas de las bandas permitidas cambien notablemente de posición con respecto a las frecuencias. Más aún el efecto de



la rugosidad hace que las bandas prohibidas se hagan ligeramente más angostas, como se puede observar al comparar las bandas prohibidas de las Figs. 21(c) y (d) con las Figs.25(c) y (d). Por otro lado para frecuencias pequeñas (longitudes de ondas grandes) la rugosidad afecta la forma de las estructuras de bandas con nuevas bandas prohibidas a diferencia de las Figs. 21(c) y (d); como se muestra en las Figs.25(c) y (d). Cabe mencionar que en el cálculo de la estructura de bandas de la Fig. 25(a) para un intervalo de muestreo  $\Delta s = 1/140$  se tuvo un rango de la matriz de 1048 para la polarización TE, por lo que se requirió un tiempo de cómputo de 7.3 días empleando la programación en paralelo con el compilador gfortran en la estación de trabajo de la FCFM. La estación de trabajo tiene 2 procesadores “Intel Xeon Processor 8 Cores E5-2640 (20M Cache, 2.00 GHz)” con 64 GB de memoria (8 X 8GB) y sistema operativo Linux CentOS 6.2 x86\_64.

Ahora en la Fig. 26 presentamos las estructuras de bandas de un CF2D para la polarización TM con las mismas condiciones que el caso anterior. Así, tomamos en cuenta los mismos parámetros que en el caso de un perfil rugoso (Fig. 25) para las diferentes fracciones de llenado  $f = 0.12$  (Fig. 26(a)),  $f = 0.36$  (Fig. 26(b)),  $f = 0.50$  (Fig. 26(c)) y  $f = 0.68$  (Fig. 26(d)) para los intervalos de  $k_r$  con 1929 puntos y de  $\omega_r \in (0.68, 0.959)$  con 1700 puntos. Para el caso de la Fig. 26(a) para un intervalo de muestreo  $\Delta s = 1/220$  se tuvo un rango de la matriz de 1392 para la polarización TE, se requirió un tiempo de cómputo de 8.6 días empleando la programación en paralelo en la estación de trabajo.

Como se observa en la Fig. 26, el efecto de la rugosidad también modifica considerablemente las estructuras de bandas para la polarización TM. En particular, genera nuevas bandas prohibidas. Puede observarse que para frecuencias pequeñas (longitudes de ondas grandes) la rugosidad modifica ligeramente algunas estructuras de bandas

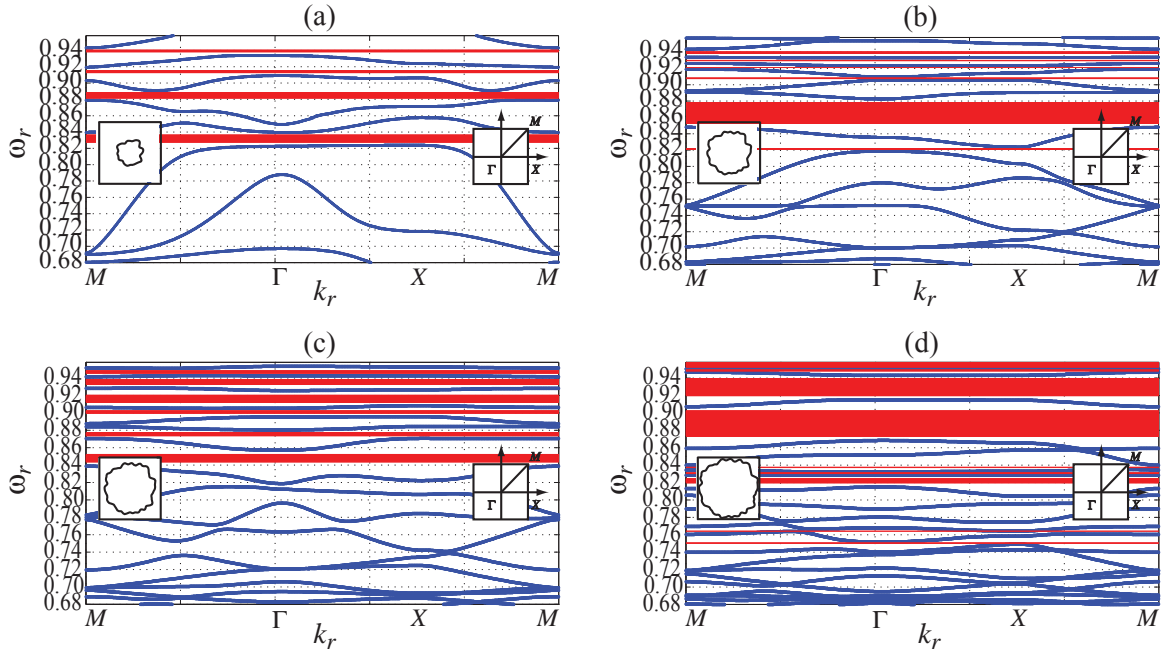


Figura 26. Estructuras de bandas de un CF2D con una celda unitaria cuadrada que tiene una inclusión cilíndrica con una superficie aleatoriamente rugosa compuesta por dos medios; vacío ( $\varepsilon_1 = 1$ ,  $\mu_1 = 1$ ) y LHM dispersivo ( $\varepsilon(\omega)$  y  $\mu(\omega)$ ), con  $\omega_p = 1.592$ ,  $\omega_0 = 0.637$  y  $F = 0.56$ . Para el caso de la polarización TM con las fracciones de llenado (a)  $f = 0.12$ , (b)  $f = 0.36$ , (c)  $f = 0.50$  y (d)  $f = 0.68$ . El recuadro izquierdo representa la celda unitaria en el espacio real y el recuadro derecho corresponde a la primera zona de Brillouin en el espacio  $k$ , respectivamente.

(ver Figs. 22 y 26). En cambio para frecuencias más grandes (longitudes de ondas pequeñas) la rugosidad afecta considerablemente la forma de las estructuras de bandas y generando nuevas bandas prohibidas. En particular, para una fracción de llenado grande, la Fig. 26(d) muestra bandas prohibidas anchas a diferencia del caso sin rugosidad que no presenta bandas prohibidas. Estos resultados son muy importantes porque indican que los defectos sobre las superficies de un CF2D modifican considerablemente las estructuras de bandas; en particular, genera nuevas bandas prohibidas, lo cual es importante tomar en cuenta en la fabricación de los CF.

## Capítulo V

---

### CONCLUSIONES

---

En este capítulo mencionamos un breve resumen y en base a los resultados obtenidos enunciamos las conclusiones más importantes del trabajo.

Hemos aplicado un método numérico para calcular la estructura de bandas de un CF2D con geometrías complicadas y propiedades físicas muy novedosas como las correspondientes a los metamateriales dispersivos (LHMs).

La técnica numérica que se utilizó en este trabajo se le conoce como el método de la ecuación integral. Este método parte del segundo teorema integral de Green permitiendo obtener un par de ecuaciones integrales acopladas que involucran, como incógnitas el modo del campo y su derivada normal evaluados en las fronteras o superficies involucradas. La discretización del sistema resulta en una ecuación matricial homogénea cuya solución determina las funciones fuente, con las que se puede obtener las estructuras de bandas. Con este método calculamos las estructuras de bandas de un CF2D formado por una celda unitaria cuadrada con una inclusión cilíndrica que tiene una superficie lisa o aleatoriamente rugosa. Para medios dieléctricos o LHMs estas estructuras fueron analizadas para los casos de la polarización del campo eléctrico transversal (TE) y del campo magnético transversal (TM).

El método integral tiene una gran ventaja en comparación de otros métodos; la cual es sólo tener en cuenta un número finito de puntos de muestreo a lo largo de los contornos de la celda unitaria y de su inclusión, en lugar de toda la superficie permitiendo así una menor cantidad de recursos computacionales. Además, el método permite estudiar diferentes aspectos de estos sistemas que tienen geometrías complicadas; en particular la rugosidad en la superficie de los CFs que contienen LHM dispersivo.

El cálculo de las estructuras de bandas para un CF2D formado con una celda unitaria cuadrada con una inclusión cilíndrica que tiene una superficie lisa y que está compuesto por dos materiales dieléctricos diferentes nos permite concluir, que entre menor sea la fracción de llenado se puede tener bandas prohibidas más anchas. Esto para la polarización TE permite un mayor control de la propagación de la luz a través de el CF2D. En cambio para el caso de la polarización TM no se obtuvo ninguna banda prohibida, lo cual nos indica que se transmitirá la luz a través del cristal para todo intervalo de frecuencias.

Además, se calcularon las estructuras de bandas para un CF2D con una celda unitaria cuadrada y una inclusión cilíndrica con una superficie lisa que tiene un medio de LHM dispersivo. Los resultados muestran que entre mayor es la fracción de llenado, también se pueden obtener más bandas prohibidas bajo la polarización TE. Sin embargo, para el caso de la polarización TM no obtuvimos bandas prohibidas relevantes para las diferentes fracciones de llenado consideradas.

Los efectos de la rugosidad aleatoria sobre la superficie de la inclusión cilíndrica que contiene LHM dispersivo, modifican considerablemente la estructura de bandas. Para el caso de la polarización TE se puede concluir, que el efecto de la rugosidad modifica la forma y la posición de las estructuras de bandas, Es decir, para frecuencias grandes (longitudes de ondas pequeñas) la rugosidad provoca que algunas zonas de las

bandas permitidas cambien notablemente de posición con respecto a las frecuencias y que las bandas prohibidas se hagan ligeramente más angostas. Para frecuencias pequeñas (longitudes de ondas grandes) la rugosidad afecta mucho más la forma de las estructuras de bandas generando nuevas bandas prohibidas. Por otro lado, para el caso de la polarización TM se tiene que el efecto de la rugosidad modifica considerablemente la forma de las estructuras de bandas para todas las fracciones de llenado. En particular, genera nuevas bandas prohibidas a diferencia del caso de superficies sin rugosidad.

Estos resultados son muy importantes porque indican que la rugosidad sobre las superficies de los CFs se debe tomar en cuenta en la fabricación. Además, modificando las superficies con defectos es otra forma de obtener bandas prohibidas en todo intervalo de las frecuencias para un LHM dispersivo. Esto permite tener un mayor control de la propagación de la luz a través del CF2D propuesto.

Además, debido al elevado tiempo de cómputo requerido para obtener las estructuras de bandas para la superficie cilíndrica aleatoriamente rugosa se tuvo la necesidad de utilizar la computación en paralelo, de lo cual podemos concluir que para el caso secuencial el tiempo de cómputo requerido para obtener la estructuras de bandas de nuestro sistema propuesto con un sólo procesador fue de 3.6 meses; mientras que empleando la programación en paralelo con 16 procesadores fue de 7.3 días. Esto nos indica que fue posible realizar el cálculo casi 15 veces más rápido haciendo la partición de las tareas en varios procesadores.

A pesar de que en este trabajo no hicimos un análisis para un CF finito, sabemos que también este método integral permite estudiar la propagación de ondas electromagnéticas a través del sistema periódico finito. Esto permite darle continuación como trabajo futuro.

## Referencias

- Casse, B. D. F., Lu, W. T., Huang, Y. J., Gultepe, E., Menon, L., y Sridhar, S. (2010). Super-resolution imaging using a three-dimensional metamaterials nanolens. *Appl. Phys. Lett.*, **96**(023114): 1–3.
- Cui, T. J., Smith, D. R., y Liu, R. (2010). *Metamaterials Theory, Design and Applications*. Springer, USA, primera edición.
- Gabrielli, L. H., Cardenas, J., Poitras, C. B., y Lipson, M. (2009). Silicon nanostructure cloak operating at optical frequencies. *Nature Photonics*, **3**: 461–463.
- García, R. A., Martínez, M. B. M., y Martínez, J. M. (2007). Una descripción del método de ondas planas para el cálculo de bandas fotónicas. *Rev. Boliviana de Fis.*, **13**: 79–85.
- Gharghi, M., Gladden, C., Zentgraf, T., Liu, Y., Yin, X., Valentine, J., y Zhang, X. (2011). A carpet cloak for visible light. *Nano Letters*, **11**: 2825.
- Griffiths, D. J. (1999). *Introduction to Electrodynamics*. Prentice Hall, USA, tercera edición.
- Hernández, E. P. (2015). *Estudio numérico de la propagación de la luz en guías de ondas periódicas y onduladas usando la programación en paralelo*. Págs. 148.
- Jiménez, T. P. C. (2014). *Estructuras de bandas de cristales fotónicos en 2D con superficies rugosas usando un método integral*. Págs. 100.
- Joannopoulos, J. D., Johnson, S. G., Winn, J. N., y Meade, R. D. (2008). *Photonic crystals: molding the flow of light*. Princeton University Press, USA, segunda edición.
- Landau, L. D. y Lifshitz, E. M. (1981). *Electrodinámica en los medios continuos*. Reverté.
- Li, J. y Pendry, J. B. (2008). A new strategy for cloaking. *Phys. Rev. Lett.*, **101**: 203901.
- Li, J., Huang, W., y Han, Y. (2006). Tunable photonic crystals by mixed liquids. *Colloids Surf.*, **279**: 213–217.
- Maradudin, A. A., Michel, T., McGurn, R. A., y Mndez, E. R. (1990). Enhanced backscattering of light from a random grating. *Ann. Phys. (N.Y.)*, **203**: 255–307.
- Melville, D. O. S. y Blaikie, R. J. (2005). Super-resolution imaging through a planar silver layer. *Optical Society of America*, **13**(6): 2127–2134.

- Mendoza-Suárez, A., Villa-Villa, F., y Gaspar-Armenta, J. A. (2006). Numerical method based on the solution of integral equations for the calculation of the band structure and reflectance of one and two dimensional photonic crystals. *J. Opt. Soc. Am. B*, **23**(10): 2249–2256.
- Mendoza-Suárez, A., Villa-Villa, F., y Gaspar-Armenta, J. A. (2007). Band structure of two-dimensional photonic crystals that include dispersive lefthanded materials and dielectrics in the unit cell. *J. Opt. Soc. Am. B*, **24**(12): 3091–3098.
- Mengens, M., Wijnhoven, J., Lagendijk, A., y Vos, W. L. (1999). Light sources inside photonic crystals. *J. Opt. Soc. Am. B*, **16**: 1403–1408.
- Pendry, J. B., Holden, A., Stewart, W. J., y Youngs, I. (1996). Extremely low frequency plasmons in metallic mesostructures. *Phys. Rev. Lett.*, **76**: 4773–4776.
- Pendry, J. B., Holden, A. J., Stewart, W. J., y Youngs, I. (1999). Extremely low frequency plasmons in metallic mesostructures. *IEEE*, **47**: 2075–2084.
- Shalaev, V. y Cai, W. (2002). Electrodynamics of metallic photonic crystals and the problem of left-handed materials. *Phys. Rev. Lett.*, **89**: 093901.
- Shalaev, V. y Cai, W. (2010). *Optical Metamaterials*. Springer, USA.
- Shelby, R. A., Smith, D. R., y Schultz, S. (2001). Experimental verification of a negative index of refraction. *Science*, **292**(11): 5514.
- Smith, D. R., Padilla, W., Vier, D. C., Nemat-Nasser, S. C., y Schultz, S. (2000). Composite medium with simultaneously negative permeability and permittivity. *Phys. Rev. Lett.*, **84**: 4184–4187.
- Smith, D. R., Schuring, D., Pendry, J. B., Mock, J. J., Cummer, S. A., Justice, B. J., y Starr, A. F. (2006). Metamaterial electromagnetic cloak at microwave frequencies. *Science*, páginas 314–317.
- Soljacic, M., Luo, C., Joannopoulos, J. D., y Fan, S. (2005). Nonlinear photonic crystal microdevices for optical integration. *Opt. Lett.*, **28**: 637–639.
- Teo, S. H. G., A.Q.Liu, Yu, M. B., y Singh, J. (2006). Fabrication and demonstration of square lattice two-dimensional rodtype photonic band gap crystal optical intersections. *Photonics Nanostruct. Fundam. Appl.*, **4**: 103–115.
- Valentine, J., Li, J., Zentgraf, T., Bartal, G., y Zhang, X. (2009). An optical cloak made of dielectrics. *Nature Materials*, **8**: 568–571.
- Veselago, V. (1968). The electrodynamics of substances with simultaneously negative values. *Sov. Phys. Usp.*, **10**(4): 509–514.
- Yuntuan, F., Haijin, S., y Tinggen, S. (2006). New evidences of negative refraction in photonic crystals. *Opt. Mater.*, **28**: 1156–1159.