



UNIVERSIDAD MICHOACANA DE SAN NICOLÁS DE HIDALGO

FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICO MATEMÁTICAS

“Mat. Luis Manuel Rivera Gutiérrez”

**ESTUDIO EXPERIMENTAL Y NUMÉRICO DE LAS PROPIEDADES
REFLECTIVAS DE ESTRUCTURAS FOTÓNICAS
BIDIMENSIONALES CON PERIODICIDAD CUADRADA,
CONSTRUIDAS SOBRE SUSTRATOS DE SILICIO**

TESIS

Para obtener el grado de

MAESTRO EN CIENCIAS EN INGENIERÍA FÍSICA

PRESENTA:

MIGUEL ANGEL TÉLLEZ VILLASEÑOR

ASESOR DE TESIS:

Doctor en Ciencias en Óptica
HÉCTOR IGOR PÉREZ AGUILAR

Doctor en Ciencias Físicas
JOSÉ GUADALUPE MURILLO RAMÍREZ

Morelia, Michoacán, Enero de 2017

RESUMEN

En el presente trabajo se hizo un estudio experimental y numérico de las propiedades reflectivas de estructuras fotónicas bidimensionales (CF2D) con periodicidad cuadrada. Sin embargo, es importante señalar que las mediciones experimentales no se compararán con los cálculos numéricos, ya que la misma estructura cristalina se estudió de manera diferente. Es decir, en la parte experimental se realizaron mediciones considerando el sistema en tres dimensiones debido al espesor pequeño del sustrato; mientras que para la parte numérica se realizaron los cálculos para un sistema 2D debido a la limitante del método numérico utilizado. Además, la forma de iluminación fue diferente ya que para el caso experimental se hizo en la dirección perpendicular a la superficie cristalina, a diferencia del modelo numérico que fue en un plano paralelo.

Para el caso experimental mostramos el método del Haz Enfocado de Iones (FIB) para la fabricación de dos estructuras fotónicas con periodicidad cuadrada sobre un sustrato de silicio, conteniendo inclusiones cilíndricas circulares y cuadradas de aire. Los parámetros de una de estas estructuras fabricadas se utilizaron para el estudio numérico calculando la respuesta óptica como función del ángulo de incidencia. Se exponen las técnicas experimentales utilizadas en la caracterización óptica de las estructuras fotónicas fabricadas, donde se midió la reflectancia especular para los casos de la polarización del campo transversal eléctrico (TE) y transversal magnético (TM).

En el caso del estudio numérico se empleó el Método de la Ecuación Integral (IEM), el cual nos permite realizar el cálculo de la estructura de bandas de un cristal fotónico (CF) infinito y adicionalmente el de la propagación de una onda electromagnética a través de un CF finito ya sea en 1D o en 2D. Se muestran los resultados numéricos de varias estructuras de bandas variando la fracción de llenado con inclusiones circulares y cuadradas para polarizaciones TE y TM; así como la reflectancia de las estructuras cristalinas con 70 inclusiones. Como parte de los resultados numéricos se tiene una mayor reflectancia (para ambas polarizaciones) cuando es mayor la fracción de llenado, como es el caso del valor de 0.6. Caso contrario en la transmitancia que disminuye para todas las fracciones de llenado analizadas. Podemos decir entonces que este sistema que representa un CF2D de 70 inclusiones cilíndricas circulares de aire con una fracción de llenado de 0.6 es un buen material reflectante. Es notable que todas las estructuras fotónicas construidas y estudiadas en este trabajo de investigación mostraron una sensibilidad significativa a la polarización de la luz incidente. Por consiguiente, los resultados obtenidos muestran que la dependencia angular permite tener un control de la propagación de la luz debido a la periodicidad del sistema propuesto.

Palabras clave: Estructuras fotónicas bidimensionales, haz enfocado de iones, estructuras de bandas fotónicas, reflectancia óptica, método de la ecuación integral.

ABSTRACT

In this work we made an experimental and numerical study of the reflective properties of two-dimensional photonic structures (CF2D) with square periodicity. However, it is important to note that the experimental measurements will not be compared with the numerical calculations, since the same crystalline structure was studied differently. That is, in the experimental part we made measurements considering the system in three dimensions due to the small thickness of the substrate; while for the numerical part the calculations were made for a 2D system due to the limitation of the numerical method used. In addition, the way we illuminated was different since for the experimental case it was done in the perpendicular direction to the crystalline surface, unlike the numerical model that was in a parallel plane.

For the experimental case, we show the Focused Ion Beam (FIB) method to produce two photonic structures with square periodicity on a silicon substrate, containing circular and square inclusions of air. The parameters of one of these fabricated structures were used for the numerical study calculating the optical response as a function of the incidence angle. We present the experimental techniques used in the optical characterization of the photonic structures manufactured, where specular reflectance was measured for the electric transverse field (TE) and magnetic transverse field (TM) polarizations.

In the case of the numerical study, the Integral Equation Method (IEM) was used, which allows us to calculate the band structure of an infinite photonic crystal and additionally we are able to calculate the electromagnetic waves propagation through a finite photonic crystal either in 1D or 2D. We show numerical results of some band structures varying the fill fraction with circular and square inclusions for TE and TM polarizations; as well as the reflectance of the crystalline structures with 70 inclusions. As part of the numerical results we have a higher reflectance (for both polarizations) when the filling fraction is higher, as in the case of the value of 0.6. Otherwise, the transmittance decreases for all the filling fractions analyzed. We can say then that this system representing a CF2D of 70 circular cylindrical inclusions of air with a filling fraction of 0.6 is a good reflective material. It is remarkable that all the photonic structures constructed and studied in this research work showed a significant sensitivity to the polarization of incident light. Consequently, the obtained results show that the angular dependence allows to have a control of the light propagation due to the proposed system periodicity.

Keywords: Two-dimensional photonic structures, focused ion beam, photonic band structures, optic reflectance, integral equation method.

*A mis padres, por su amor
y apoyo incondicional*

Agradecimientos

Agradezco de manera especial al Dr. Héctor I. Pérez Aguilar, por la enorme paciencia y apoyo que me brindó en todo momento, por las herramientas y consejos otorgados para la realización de este trabajo de tesis, por el interés y dedicación en el asesoramiento de mi trabajo, sin duda no pude haber hecho mejor elección de asesor.

A mis padres, por todo el amor, cariño y comprensión que siempre me dan, por los principios y valores que me inculcaron, además de su ejemplo que me hace ser una mejor persona y me motivan a mejorar cada día.

A mi novia Zaira Dorely, por ser mi compañera, mi amiga y mi confidente, por su comprensión y motivación en momentos de desánimo y por su amor sincero.

A mis hermanas Tere y Liz, mis sobrinos Jessi, Migue, Dani, Lizbeth, Monse y Elías y mis cuñados Miguel y Chago, por ser parte de mi maravillosa familia quienes me dan la fuerza y motivación para culminar cada proyecto que me propongo.

A mis compañeros y amigos Ricardo, Hugo, Victor, Bernardo, David, Cindy, Fernando, Claudia, Yuritzzy, Hermelinda, Tania y Andrés, por su amistad, apoyo y compañía durante este proceso académico que vivimos juntos.

Al Dr. José G. Murillo Ramírez, por las facilidades prestadas durante mi estancia en el CIMAV en Chihuahua para realizar la parte experimental de mi trabajo.

A mis abuelos que ya no están conmigo pero los llevo en mi corazón.

Agradezco el apoyo otorgado por CONACyT mediante una beca de estudios de maestría y por la UMSNH con una extensión de beca para finalizar mi trabajo de tesis.

Por ultimo, pero no menos importante agradezco al resto de mi familia y amigos, que sería difícil nombrar a cada uno ya que son muchos, pero que siempre los tengo presentes y son parte importante de mi vida.

Contenido

	Página
Resumen	i
Abstract	ii
Dedicatoria	iii
Agradecimientos	iv
Contenido	v
Lista de Figuras	vii
I. INTRODUCCIÓN	1
I.1. Antecedentes	1
I.2. Objetivos	5
I.3. Hipótesis	6
I.4. Justificación	6
I.5. Estructura de la tesis	6
II. CRISTALES FOTÓNICOS	8
II.1. Introducción a los cristales fotónicos	8
II.2. Cristales fotónicos y parámetros característicos	9
II.2.1. Parámetros que definen un cristal fotónico	11
II.2.2. Red cristalina fotónica	13
II.3. Métodos numéricos aplicables a los CF's	15
II.4. Estructura de bandas	17
II.5. Métodos de fabricación de CF2D's	19
II.5.1. Litografía	22
II.5.2. Electroquímica	23
II.5.3. Oxidación vertical selectiva	25
II.5.4. Haz enfocado de iones (FIB)	25
II.6. Aplicaciones	27
III. METODOLOGÍA EXPERIMENTAL	31
III.1. Caracterización del haz de luz de incidencia	31
III.1.1. Potencia emitida en los láseres	32
III.1.2. Distribución espacial de intensidades y diámetro del haz de luz	33
III.2. Caracterización morfológica de los CF's	34
III.3. Caracterización óptica de los CF's	35

Contenido (continuación)

	Página
III.3.1. Arreglos y dispositivos experimentales	36
III.3.2. Comprobación del método experimental de medición	38
III.3.3. Localización de estructuras en el sustrato de silicio	39
III.3.4. Mediciones de las estructuras fotónicas	40
III.4. Fabricación de estructuras fotónicas mediante el FIB	42
III.4.1. Haz enfocado de iones o FIB	43
III.4.2. Fabricación de dos estructuras fotónicas con periodicidad cuadrada	48
IV. ESTUDIO NUMÉRICO	52
IV.1. Método de Expansión de Ondas Planas	53
IV.1.1. Cálculo de estructura de bandas para un CF1D	53
IV.2. Método de la Ecuación Integral	56
IV.2.1. Ecuación de onda	57
IV.2.2. Función de Green para la ecuación de Helmholtz	59
IV.2.3. Representación integral de la ecuación de Helmholtz	60
IV.2.4. Discretización de las integrales	62
IV.2.5. Estructura de bandas en un CF2D infinito	68
IV.2.6. Distribución del campo electromagnético en un CF2D finito	72
V. RESULTADOS	81
V.1. Verificación del IEM para sistemas infinitos	82
V.2. Cálculo de la estructura de bandas	83
V.3. Verificación del IEM para sistemas finitos	87
V.3.1. Sistema de una interfaz entre dos medios dieléctricos	87
V.3.2. Sistema de dos interfaces entre dos medios dieléctricos	89
V.4. Respuesta óptica de un CF2D	90
V.4.1. Sistema con una inclusión cilíndrica circular entre dos interfaces de dos medios dieléctricos	90
V.4.2. Sistema con cuatro inclusiones cilíndricas circulares entre dos interfaces de dos medios dieléctricos	92
V.4.3. Sistema con setenta inclusiones cilíndricas circulares entre dos interfaces de dos medios dieléctricos	93
VI. CONCLUSIONES	95
REFERENCIAS	99

Lista de Figuras

Figura		Página
1	Ejemplo de cristales fotónicos a) unidimensional, b) bidimensional y c) tridimensional. Tomado de la Ref. Sukhoivanov and Guryev (2009). . .	2
2	Piedra de ópalo tallada para joyería. Tomado de la Ref. Padilla-Salas and Arzate-Plata (2014).	3
3	Estructura de bandas de un cristal fotónico en 2D con una red cuadrada e inclusiones cuadradas. El recuadro izquierdo muestra la celda unitaria en espacio real y el recuadro de la derecha muestra la primera zona de Brillouin en el espacio $\bar{\mathbf{k}}$. Tomado de la Ref. Mendoza-Suárez <i>et al.</i> (2006).	5
4	Condición de Bragg.	11
5	Diferentes topologías. (a) Tipo Cermet, los centros esparcidos están aislados y (b) Tipo Network, los centros esparcidos forman un medio continuo.	12
6	Ejemplos de tipos de redes de CF2D's. (a) CF2D con red cuadrada e inclusiones de forma circular, (b) CF2D con red hexagonal y elementos de forma redonda. Tomado de la Ref. Sukhoivanov and Guryev (2009).	14
7	Ejemplos de tipos de redes de CF3D's. (a) FCC, (b) woodpile, (c) red espiral o GLAD, (d) cuasi red de diamante. Tomado de la Ref. Sukhoivanov and Guryev (2009).	14
8	Polarización TE (transversal eléctrico) y polarización TM (transversal magnético).	18
9	Estructura de bandas fotónicas de un CF con red cuadrada de columnas dieléctricas con radio $0.2a$. Las bandas azules representan los modos TM mientras que las bandas rojas representan los modos TE. Tomado de la Ref. Joannopoulos <i>et al.</i> (2008).	18

Lista de Figuras (continuación)

Figura	Página	
10	<p>Litografía por haz de electrones. Este método consiste en (a) recubrir la superficie del material con una película fotosensible y (b) exponer un haz enfocado de electrones en un patrón previamente diseñado. El haz de electrones cambia la solubilidad de la capa protectora, lo que permite la (c) eliminación de las regiones expuestas de la película fotosensible por inmersión en un disolvente. Posteriormente se (d) añade una capa de algún otro material sobre la película tratada mediante algún método como el sputtering. Por último, se (e) remueve la resina fotosensible que protegió el sustrato con otra solución química llamada eliminador. Finalmente nos queda el (f) cristal fotónico con el patrón diseñado. . .</p>	22
11	<p>Dos ejemplos de redes fotónicas en 2D fabricadas con litografía de haz de electrones y grabadas en una guía de onda GaAs/AlGaAs utilizando RIE y máscaras dieléctricas. Tomado de la Ref. Krauss and Rue (1999).</p>	24
12	<p>Micrografía de un CF2D fabricado por grabado anódico (“silicio macroporoso”). La estructura describe una red hexagonal o “grafito”. Tomado de la Ref. Krauss and Rue (1999).</p>	24
13	<p>Esquema de sección transversal de una columna de óxido producida por el método de oxidación selectiva en la fabricación de CF’s. Tomado de la Ref. Krauss and Rue (1999).</p>	25
14	<p>Micrografía de un patrón periódico fabricado mediante FIB. El corte transversal muestra una profundidad de 600 nm de profundidad de los orificios. Tomado de la Ref. Cabrini <i>et al.</i> (2005).</p>	26
15	<p>(a) Micrografía SEM de un CF grabado mediante FIB. (b) Mediciones del diámetro de la inclusión: ~ 480 nm y constante de red: ~ 600 nm. (c) Micrografía SEM de las cavidades grabadas presentando algunos defectos incorporados dentro de una línea de defecto y (d) mediciones del diámetro de la inclusión: ~ 450 nm y diámetro del defecto: ~ 250 nm. Tomado de la Ref. Goyal <i>et al.</i> (2016).</p>	28
16	<p>Con un sistema ópticamente activo como un semiconductor (derecha) acoplado convenientemente a un CF se puede inhibir la emisión espontánea. Los electrones promocionados se relajan emitiendo fotones hasta el fondo de la banda de conducción, pero al encontrarse esa energía dentro de la banda fotónica prohibida, la emisión espontánea no ocurrirá, a menos que produzcamos un defecto en la estructura fotónica que abra estados dentro del gap, permitiendo la propagación a través de ellos. . .</p>	29

Lista de Figuras (continuación)

Figura		Página
17	Comportamiento temporal de la emisión de luz de los láseres utilizados en este trabajo.	32
18	a) Fotografías del equipo BeamMaster y el software utilizados. Distribución espacial de intensidades para los haces de luz b) láser de Helio – Neón (632 nm) y del láser de emisión de c) 785 y en d) 852 nm.	33
19	Fotografía del microscopio electrónico de barrido marca JEOL modelo JSM-7401F.	34
20	a) Micrografía de la estructura fotónica de 9 cavidades con red cuadrada. b) Micrografía de una de las cavidades embebidas en la red cuadrada. c) Micrografía de la estructura fotónica de control de red cuadrada. d) Micrografía aumentada de la muestra de control.	35
21	Fotografía del arreglo experimental utilizado para medir la reflectancia especular del haz de luz emitido por el láser de He-Ne.	36
22	Fotografía del telescopio conformado por un paquete colimador, un polarizador lineal y una lente convergente.	37
23	Fotografía del detector de fotodiodos montado en el arreglo experimental tipo elipsómetro.	37
24	Fotografía del arreglo experimental tipo elipsómetro utilizado en el presente trabajo de investigación.	38
25	Reflectancia especular como función del ángulo de incidencia sobre un sustrato de silicio con índice de refracción $n = 3.681$ y para una longitud de onda $\lambda = 632$ nm. Las líneas sólidas corresponden al caso analítico y las líneas punteadas al caso experimental para polarización TE (línea con cuadros) y TM (línea con círculos).	39
26	Fotografías tomadas de un microscopio óptico de la estructura fotónica delimitada por tiras de cinta adhesiva.	40
27	Reflectancia especular a 45° como función de la coordenada espacial de la muestra de control con red cuadrada.	41
28	La distribución angular de la luz depende de la forma que tiene la superficie, sin embargo, el rayo de luz que se refleja en un ángulo opuesto al incidente se llama reflectancia especular (specular reflectance).	42

Lista de Figuras (continuación)

Figura		Página
29	Reflectancia especular óptica de la muestra de control como función del ángulo de incidencia del haz de luz con diferentes longitudes de onda para el caso de la polarización (a) TE y (b) TM.	43
30	Reflectancia especular óptica de la muestra de red cuadrada con 9 microcavidades embebidas en la red como función del ángulo de incidencia del haz de luz con diferentes longitudes de onda para el caso de la polarización (a) TE y (b) TM.	44
31	FIB marca JEOL modelo JEM9320-FIB del Laboratorio Nacional de Nanotecnología del CIMAV.	45
32	Principales usos de un FIB. (a) Reparación de circuitos integrados, (b) fabricación de nano-estructuras, (c) reconstrucción 3D, (d) tomografía, (e) nano-maquinado y deposición y (f) preparación de muestras.	46
33	Esquema básico de un FIB.	47
34	(a) Fuente de iones de Galio y (b) cono de Taylor.	48
35	Micrografías de pruebas de maquinado de estructuras fotónicas en el equipo FIB.	49
36	Micrografía de la estructura cuadrada (10 x 6) con orificios cuadrados de $1 \mu\text{m} \times 1 \mu\text{m}$ y parámetro de red $a = 1.4 \mu\text{m}$, construida con el método del FIB. El espesor de placa es de $\sim 1 \text{ mm}$	50
37	Micrografía de la estructura cuadrada (10 x 7) con orificios circulares de $0.8 \mu\text{m}$ de diámetro y parámetro de red $a = 1 \mu\text{m}$. El espesor de placa es de $\sim 1 \text{ mm}$	51
38	(a) Cristal fotónico con periodicidad unidimensional; d corresponde al ancho de la celda unitaria. (b) Celda unitaria conformada por dos materiales de constantes dieléctricas ε_1 y ε_2	54
39	Celda unitaria de un CF2D con una celda cuadrada y una inclusión de forma cilíndrica de un material dieléctrico diferente.	57
40	Celda unitaria de un CF2D con una red cuadrada y una inclusión de forma cilíndrica con su vector normal $\hat{\mathbf{n}}$ perpendicular al contorno.	62

Lista de Figuras (continuación)

Figura		Página
41	Celda unitaria de un CF2D con una celda cuadrada y una inclusión de forma cilíndrica de un material dieléctrico diferente, los materiales están delimitados por los contornos Γ_a , Γ_b , Γ_c , Γ_d y Γ_e cuyos vectores normales están indicados en la figura.	68
42	Esquema de un CF2D finito. Los contornos de integración se indican en curvas discontinuas. R_0 y R_q representan las regiones que encierran los medios incidente y de transmisión, respectivamente. Tomado de la Ref. Mendoza-Suárez <i>et al.</i> (2007).	72
43	Campo incidente y esparcido en la región 1 (ψ^1) o en la región 2 (ψ^2). .	74
44	(a) Perfil de un CF2D con una celda unitaria cuadrada que contiene una inclusión cilíndrica circular y una fracción de llenado de $f = 0.189$. (b) Función determinante para $k = \Gamma$. Estructura de bandas de un CF2D con red cuadrada e inclusiones cilíndricas para polarización TE, $\varepsilon_1 = 1$, $\varepsilon_2 = 5$ y $f = 0.189$, (c) obtenida mediante el IEM y (d) tomado de la Ref. Plihal <i>et al.</i> (1991).	82
45	Estructuras de bandas de un CF2D con una celda unitaria con inclusiones circulares, formada por dos materiales dieléctricos con índices de refracción $n_1 = 3.681$ y $n_2 = 1$ para polarización TE y fracciones de llenado de (a) $f = 0.01$, (c) $f = 0.1$ y (e) $f = 0.6$, así como para polarización TM y fracciones de llenado de (b) $f = 0.01$, (d) $f = 0.1$ y (f) $f = 0.6$	84
46	Estructuras de bandas de un CF2D con una celda unitaria con inclusiones cuadradas, formada por dos materiales dieléctricos con índices de refracción $n_1 = 3.681$ y $n_2 = 1$ para polarización TE y fracciones de llenado de (a) $f = 0.1$, (c) $f = 0.3$ y (e) $f = 0.51$, así como para polarización TM y fracciones de llenado de (b) $f = 0.1$, (d) $f = 0.3$ y (f) $f = 0.51$	86
47	Interfaz simple entre dos medios materiales con constantes dieléctricas ε_1 y ε_2	87
48	(a) Perfil de una interfaz entre dos medios, (b) campo esparcido en reflexión, (c) campo esparcido en transmisión, (d) Reflectancia R y Transmitancia T para una interfaz entre aire y silicio $n_1 = 1$ y $n_2 = 3.681$ para polarización TE, mediante cálculo numérico (líneas punteadas) y analítico (líneas continuas).	88

Lista de Figuras (continuación)

Figura		Página
49	Sistema de dos interfaces entre tres medios materiales con constantes dieléctricas ε_1 , ε_2 y $\varepsilon_3 = \varepsilon_1$	89
50	Reflectancia R y transmitancia T para dos interfaces entre aire y silicio ($n_1 = 1$ y $n_2 = 3.681$) para la polarización (a) TE y (b) TM, mediante el cálculo numérico (líneas punteadas) y analítico (líneas continuas). . .	90
51	Sistema con una inclusión cilíndrica circular entre dos interfaces de dos medios materiales con constantes dieléctricas ε_1 y ε_2	91
52	Reflectancia y transmitancia de una película de silicio ($n_2 = 3.681$) de espesor $d = 7 \mu\text{m}$ y longitud $l = 14 \mu\text{m}$ variando el ángulo de incidencia para el caso analítico sin inclusiones (líneas continuas) y el numérico con una inclusión (líneas punteadas) para diferentes fracciones de llenado bajo polarización (a) TE y (b) TM.	92
53	Sistema con cuatro inclusiones cilíndricas circulares entre dos interfaces de dos medios materiales con constantes dieléctricas ε_1 y ε_2	92
54	Reflectancia y transmitancia de una película de silicio ($n_2 = 3.681$) de espesor $d = 7 \mu\text{m}$ y longitud $l = 14 \mu\text{m}$ variando el ángulo de incidencia para el caso analítico sin inclusiones (líneas continuas) y el numérico con cuatro inclusiones (líneas punteadas) para diferentes fracciones de llenado bajo polarización (a) TE y (b) TM.	93
55	Reflectancia y transmitancia de una película de silicio ($n_2 = 3.681$) de espesor $d = 7 \mu\text{m}$ y longitud $l = 14 \mu\text{m}$ variando el ángulo de incidencia para el caso analítico sin inclusiones (líneas continuas) y el numérico con 70 inclusiones (líneas punteadas) para diferentes fracciones de llenado bajo polarización (a) TE y (b) TM.	94

Capítulo I

INTRODUCCIÓN

I.1. Antecedentes

El estudio de los cristales fotónicos (CF's) se remonta a más de cien años atrás, desde 1887, cuando Lord Rayleigh explicó el fenómeno de reflexión de la luz en un sistema compuesto de capas dieléctricas alternadas con diferentes índices de refracción (Rayleigh, 1887). En el contexto de CF's, Rayleigh demostró que la luz con longitud de onda o frecuencia apropiada podría no propagarse en el cristal. A tal frecuencia se le llama frecuencia no permitida. En general, cuando una onda electromagnética incide sobre la superficie de un CF, se produce interferencia entre las ondas reflejadas en cada separación entre los medios de diferente índice de refracción. Cuando la interferencia es destructiva aparecen ciertos rangos de frecuencia que no pueden transmitirse en el cristal; es decir, luz con ciertas frecuencias que no se propaga en el cristal. En este caso se dice que existe una brecha fotónica o banda de frecuencias prohibidas (band-gap). Si además, el CF no permite la propagación de la luz en cualquier dirección y polarización, entonces se dice que el cristal tiene una banda fotónica completa.

Un CF es un material que presenta una modulación periódica del índice de refracción

inducido mediante la inclusión de defectos estructurales. El propósito de este tipo de materiales es controlar la reflexión y la transmisión de la luz a través de su estructura mediante el fenómeno de difracción.

Para fines de estudio, los CF's se dividen en tres categorías: unidimensionales (1D), bidimensionales (2D) y tridimensionales (3D) como se ilustra en la Fig. 1.

Figura 1. Ejemplo de cristales fotónicos a) unidimensional, b) bidimensional y c) tridimensional. Tomado de la Ref. Sukhoivanov and Guryev (2009).

La característica más sobresaliente de los CF's radica en la posibilidad de generar la existencia de bandas prohibidas, lo cual produce, sin lugar a dudas, efectos no reportados anteriormente en la óptica convencional (Sakoda, 2001; Joannopoulos *et al.*, 2008). Tales estructuras de tipo dieléctrico poseen una modulación periódica del índice de refracción, de ahí que, dicha disposición permite un comportamiento de los fotones cuya tendencia es análoga a la de los electrones en la estructura cristalina de un semiconductor (Korvink and Greiner, 2002; Kittel, 2004).

En la naturaleza existen algunos materiales cuyos índices de refracción varían periódicamente en el espacio, tal es el caso del ópalo que es una piedra preciosa utilizada en joyería (ver Fig. 2). El ópalo presenta el fenómeno llamado iridiscencia que se refiere a la capacidad de reflejar sólo algunas de las componentes de la luz de acuerdo al ángulo con que éste se observa. En este caso, el material no tiene una banda fotónica completa.

Figura 2. Piedra de ópalo tallada para joyería. Tomado de la Ref. Padilla-Salas and Arzate-Plata (2014).

El interés en los CF's puede atribuirse a las publicaciones de Yablonovitch (1987) y John (1987) en la década de los 80's, quienes buscaron demostrar experimentalmente la existencia de regiones prohibidas para la propagación de una onda electromagnética en un rango de frecuencias específicas (band-gap). Yablonovitch *et al*, propusieron fabricar una estructura de diamante perforando orificios cilíndricos en un material dieléctrico. La nueva estructura mostró un “band-gap” completo que concordó con los cálculos teóricos realizados. Estos hallazgos motivaron a un gran número de investigadores a estudiar este fenómeno con mayor profundidad en estructuras de una y dos dimensiones (Prather *et al.*, 2009).

Desde entonces, se han desarrollado diversos estudios en torno a materiales fotónicos ya que sus propiedades ópticas ofrecen soluciones alternativas a una gran variedad de desafíos tecnológicos actuales en la iluminación de estado sólido, en el área de celdas solares, en el campo de las telecomunicaciones, entre otros campos de estudio de interés (Carrillo-Vázquez, 2014).

Por otra parte, cabe destacar que, existen métodos numéricos aplicables al estudio de los CF's, con los cuales se pueden calcular la estructura de bandas, tales como el

método de Expansión de Ondas Planas (PWE¹) y el Método de la Ecuación Integral (IEM²) (Joannopoulos *et al.*, 2008; Archuleta-García *et al.*, 2007; Mendoza-Suárez *et al.*, 2006). Básicamente estos métodos calculan las frecuencias (modos normales) de los CF's para cada valor de la dirección de propagación dada por el vector de onda en el espacio recíproco. Aunque, en el caso del método PWE en ocasiones pudiera no ser del todo aplicable en situaciones reales con geometrías de interés muy particular. Sin embargo, en la actualidad ya existen a nuestro alcance diversos trabajos previos a cargo de investigadores que han abordado el tema. En este sentido, se hace necesaria la implementación del IEM, el cual ha demostrado ser una herramienta confiable en la producción de diversos resultados notables para un sistema periódico en 1D o en 2D, como se muestra en la Fig. 3 (Mendoza-Suárez and Méndez, 1997; Mendoza-Suárez *et al.*, 2006, 2007). El método integral también permite el análisis de la propagación de ondas electromagnéticas a través del sistema periódico truncado.

Además, desde el punto de vista experimental, existen diversos métodos de fabricación de CF's. Algunos de ellos son: la litografía por haz de electrones, el grabado con haz de iones asistido químicamente, el grabado anódico y crecimiento, la oxidación vertical selectiva y el haz enfocado de iones o FIB³, entre otros. En el siguiente capítulo se describirán estas técnicas de fabricación.

En este proyecto de tesis se toma como punto de partida diversos trabajos previos que han abordado el tema (Mendoza-Suárez and Méndez, 1997; Mendoza-Suárez *et al.*, 2006, 2007; Carrillo-Vázquez, 2014) con el propósito de darles continuidad y aportar resultados novedosos que permitan entender y mejorar las propiedades de los cristales fotónicos bidimensionales (CF2D's).

¹Por sus siglas en inglés, Plane Wave Expansion.

²Por sus siglas en inglés, Integral Equation Method.

³Por sus siglas en inglés, Focused Ion Beam.

Figura 3. Estructura de bandas de un cristal fotónico en 2D con una red cuadrada e inclusiones cuadradas. El recuadro izquierdo muestra la celda unitaria en espacio real y el recuadro de la derecha muestra la primera zona de Brillouin en el espacio \bar{k} . Tomado de la Ref. Mendoza-Suárez *et al.* (2006).

I.2. Objetivos

Los objetivos establecidos para este trabajo de tesis fueron:

- Caracterizar morfológicamente dos estructuras fotónicas bidimensionales con periodicidad cuadrada y medir la reflectancia especular de estas estructuras fotónicas, en función del ángulo de incidencia de un haz luminoso coherente.
- Fabricar dos estructuras fotónicas bidimensionales con periodicidad cuadrada, una con inclusiones circulares y otra con inclusiones cuadradas, mediante el uso de la técnica del haz enfocado de iones (FIB).
- Aplicar el método integral para calcular la estructura de bandas fotónicas de dos CF2D's infinitos con los mismos parámetros que los de las estructuras construidas.
- Calcular la respuesta óptica de las dos estructuras fotónicas bidimensionales finitas

fabricadas, mediante el uso del método integral.

I.3. Hipótesis

Una estructura fotónica bidimensional es capaz de modular la reflectancia de un haz de luz coherente como función de su frecuencia y de su ángulo de incidencia.

I.4. Justificación

Existe un área de oportunidad en el estudio de las propiedades ópticas de los CF's debido a que es una rama de investigación en crecimiento que puede aportar grandes avances tecnológicos en aplicaciones comerciales. De estas aplicaciones se pueden destacar dispositivos de gran utilidad en el área de las telecomunicaciones y la medicina; así como el desarrollo de materiales inteligentes utilizados en el control de transmisión y reflexión de la radiación solar, por mencionar sólo algunas.

I.5. 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 CF's. Se mencionan algunas características de estos materiales, algunas técnicas de fabricación, una breve reseña de lo que es una estructura de bandas y una banda fotónica prohibida y por último se mencionan algunas aplicaciones.

En el capítulo III se describe de forma general la metodología experimental realizada, tales como el uso de equipos, material y dispositivos ópticos, la caracterización de los láseres utilizados, la caracterización de las estructuras fotónicas, se describe la técnica

efectuada para el análisis de la reflectancia especular en función del ángulo de incidencia de un haz de luz para dos CF2D's; así como las correcciones y optimización de dicha técnica. Finalmente se describe de manera más detallada el método del haz enfocado de iones y los parámetros utilizados en el FIB para la fabricación de las estructuras.

En el capítulo IV se mencionan brevemente algunos métodos numéricos aplicables al estudio de los CF's y se da una descripción de la técnica numérica conocida como el Método de la Ecuación Integral (Mendoza-Suárez *et al.*, 2006), que se utiliza para obtener la estructuras de bandas de un CF infinito y también para obtener la respuesta óptica de un CF finito.

En el capítulo V se aplica el método integral descrito en el capítulo IV al problema de interés de esta tesis de investigación. En este capítulo se comprueba y valida el método integral comparando resultados obtenidos mediante este método con los resultados existentes en la literatura. Se presentan los resultados numéricos de las estructuras de bandas para las estructuras fotónicas fabricadas asumiendo sistemas infinitos y de la respuesta óptica en función del ángulo de incidencia de un haz de luz para los casos de los CF2D's finitos.

Finalmente, en el capítulo VI se dan las conclusiones principales de esta tesis de investigación.

Capítulo II

CRISTALES FOTÓNICOS

En este capítulo se hace una breve introducción a los CF's describiendo sus características principales; así como los métodos de modelado y fabricación, haciendo énfasis en los CF2D's que son de interés en esta tesis de investigación. Finalmente, se mencionan algunas de las aplicaciones más importantes que se están proponiendo o, en algunos casos, desarrollando.

II.1. Introducción a los cristales fotónicos

Desde que Yablonovitch (1987) y John (1987) introdujeran, independientemente y en diferente contexto, el concepto de CF hace casi treinta años, el número de trabajos que han ido apareciendo en la literatura ha estado creciendo a un ritmo vertiginoso. Este desarrollo ha sido de tal magnitud, que los CF's han dado lugar a un nuevo campo tanto en óptica como en ciencia de materiales.

La importancia de la manipulación de las propiedades ópticas de los materiales sin modificar sus propiedades electrónicas se ha convertido en una cuestión vital en fotónica. Si la invención del transistor, allá por los años 50, supuso el inicio de la revolución tecnológica cuyos frutos todos conocemos, un dispositivo de similares características para

los fotones y que además fuese integrable con los actuales circuitos electrónicos, supondría un avance aún mayor que el anterior. Las ventajas de usar al fotón como portador de información se manifiestan en mayor velocidad, mayor capacidad y más fiabilidad. El fotón interactúa mucho menos que los electrones (siempre que trabajemos en zona de transparencia) con lo que las restricciones por calentamiento serían mucho menores en estos sistemas. En esta dirección, los CF's son para los fotones, lo que los semiconductores son para los electrones, convirtiéndolos, por lo tanto, en piezas básicas para el desarrollo de la fotónica. Desarrollo que lejos de llegar a su fin, ha sido ya imaginado por Joannopoulos *et al.* (1997) en lo que fue portada de la revista Nature en 1997 (Joannopoulos *et al.*, 1997). ¿Pero qué es exactamente un CF? Un CF es un material que presenta una banda de frecuencias prohibidas para la propagación de fotones; es decir, para ciertas frecuencias del fotón no será posible su propagación (López *et al.*, 1999; Blanco-Montes, 2001). Este hecho abre fantásticas posibilidades tanto científicas como tecnológicas.

II.2. Cristales fotónicos y parámetros característicos

Un CF es un sistema en el que la constante dieléctrica varía de forma periódica. Esta variación periódica puede tener lugar en una, dos o las tres direcciones del espacio y provoca la apertura de bandas prohibidas (gaps) en los estados fotónicos de estos sistemas de forma similar a lo que ocurre con los electrones en los cristales ordinarios cuando lo que varía periódicamente es el potencial electrónico.

Dependiendo del rango en el que se considere la periodicidad, las propiedades fotónicas aparecerán en una u otra zona del espectro electromagnético. Es decir, si la variación

se produce en el rango de los milímetros las propiedades aparecerán en las microondas; si ocurre en el orden de las micras, sus efectos aparecerán en el visible-infrarrojo, etc. Esto es muy importante debido a que se trata de una teoría escalable: si tenemos un CF de periodo a con un gap a frecuencia ω y lo escalamos un factor λ (periodicidad λa) el gap aparecerá a ω/λ .

El mecanismo fundamental que determina las propiedades ópticas de un CF se puede ver como la interferencia entre las distintas ondas reflejadas en la interfaz entre medios de diferente índice de refracción, el cual se conoce como difracción de Bragg. Una familia de planos cristalinos paralelos actúa como un conjunto de esparcidores (Fig. 4) y da interferencia positiva si se satisface la condición de Bragg,

$$m\lambda = 2d \sin \theta, \quad (1)$$

donde d es la distancia interplanar y θ el ángulo interno de la propagación de la luz (Fig. 4). La existencia de estas reflexiones de Bragg para determinadas longitudes de onda concretas, da lugar a que ciertos rangos de frecuencias no puedan transmitirse a lo largo del cristal. Dicho de otro modo, para esas energías, no existen estados disponibles para los fotones en el cristal y son por lo tanto, bandas de energía prohibidas, de forma análoga a lo que ocurre en los semiconductores, donde existen bandas de energía prohibida para el transporte de electrones como previamente se mencionó. Debido a esto, los CF's presentan una apariencia iridiscente cambiando el color debido al ángulo de iluminación y no por la absorción. Contrariamente a lo que ocurre en otros materiales, donde su color viene determinado por la absorción de determinadas longitudes de onda.

Cuando la luz incidente interacciona con el CF, ésta se difracta y todos los frentes de onda difractados producen una interferencia constructiva y destructiva dentro del CF para las diferentes longitudes de onda. De esta forma, algunas longitudes de onda

Figura 4. Condición de Bragg.

pueden propagarse a través del CF en direcciones de propagación específicas debido a la interferencia constructiva, mientras que otras longitudes de onda no logran hacerlo debido a la interferencia destructiva producida por la difracción.

II.2.1. Parámetros que definen un cristal fotónico

Para describir un CF es necesario conocer una serie de parámetros que determinarán sus propiedades fotónicas como son: parámetro de red, estructura cristalina, topología, contraste de índice, factor de llenado y geometría de los centros esparcidos.

Parámetro de red. Como los procesos de difracción gobiernan su comportamiento óptico, el parámetro de red determinará el rango de frecuencias en el que aparecerán las propiedades fotónicas.

Estructura cristalina o red cristalina. Define la distribución de los materiales es decir, el modo en que modulamos el índice de refracción ya sea en una, dos o las tres dimensiones del espacio. Podemos tener, por ejemplo, estructuras con red triangular, cuadrada, etc. (en 2D) o con simetría FCC¹, BCC² o diamante (en 3D).

Topología. El campo queda concentrado en las zonas de mayor constante dieléctrica,

¹Por sus siglas en inglés, Face Centered Cubic.

²Por sus siglas en inglés, Body Centered Cubic.

por lo que es muy importante conocer la disposición de estos centros esparcidos³. Si estos se encuentran aislados entre sí e inmersos en un medio de menor constante dieléctrica, se dice que tienen una topología tipo Cermet. Por el contrario, si los centros esparcidos se encuentran interconectados se dice que adoptan una topología tipo Network. En la Fig. 5 se pueden ver ejemplos de estos dos tipos de topología para una misma simetría.

Figura 5. Diferentes topologías. (a) Tipo Cermet, los centros esparcidos están aislados y (b) Tipo Network, los centros esparcidos forman un medio continuo.

Contraste de índices. Es la razón entre el índice de refracción mayor y el menor. Cuanto mayor sea dicho contraste más marcadas serán las propiedades fotónicas.

Fracción de llenado. Se define como la relación del volumen (en 3D) o área (en 2D) ocupado por el material esparcido respecto al volumen (en 3D) o área (en 2D) total del sistema. Las propiedades fotónicas variarán con el factor de llenado para la misma estructura.

Geometría de los centros esparcidos. Los materiales esparcidos pueden adoptar diversas formas, tales como esferas, cubos, cilindros, etc. (en 3D) o círculos, cuadrados, hexágonos, etc. (en 2D).

Determinadas geometrías pueden poseer o no gap completo. Es decir, diferentes combinaciones de estos factores permiten múltiples estructuras con diferentes propiedades fotónicas. Esto da una idea de la potencialidad de estos materiales debido a su diver-

³Los centros esparcidos se refieren a las zonas de alto índice de refracción.

sidad en función de los parámetros que los definen.

II.2.2. Red cristalina fotónica

Los CF's poseen diferentes conformaciones geométricas. Estas conformaciones corresponden a tipos de red cristalina de cristales de estado sólido. Este hecho da la posibilidad de utilizar el término "red" para indicar la conformación geométrica del CF.

Los CF1D's tienen un número muy bajo de posibles variaciones periódicas de estructura porque están representadas por la estructura en capas; por lo que sólo se puede variar el índice de refracción, el espesor de la capa y el número de capas dentro del período. Así, comenzamos la consideración de los tipos de redes de CF's para el caso de 2D, que es el interés de nuestro trabajo. Es obvio asumir que la variación de la forma de los elementos y su colocación da diferentes tipos de red. Sin embargo, por razones tecnológicas, hay dos tipos comúnmente utilizados de la red en CF2D's, a saber, cuadrados y hexagonales. La celda unitaria del CF con red cuadrada tiene la forma de cuadrado. Los elementos o inclusiones del CF de este tipo deben ser similares entre sí; es decir, todos pueden tener forma circular, cuadrada, hexagonal o arbitraria. La celda unitaria de la red hexagonal tiene la forma de hexágono regular y las inclusiones, como para la red cuadrada, deben ser similares. Ejemplos de tales tipos de CF's se muestran en la Fig. 6.

La geometría de los CF3D's se puede variar en maneras muy diferentes para que puedan tener un gran número de tipos de red. Debido a que los CF3D's son los más similares a los cristales de estado sólido, muchos tipos de celdas de tales CF's tienen una conformación similar y nombres similares. Además, dependiendo del método de la producción de CF's, puede poseer una conformación que no pueda obtenerse en cristales de estado sólido. Algunos ejemplos de redes cristalinas de CF3D's se muestran en la

Figura 6. Ejemplos de tipos de redes de CF2D's. (a) CF2D con red cuadrada e inclusiones de forma circular, (b) CF2D con red hexagonal y elementos de forma redonda. Tomado de la Ref. Sukhoivanov and Guryev (2009).

Fig. 7. Entre ellas, la FCC y las redes de diamante tienen los análogos de estado sólido, mientras que las redes llamadas woodpile y de espiral (o GLAD⁴) son únicas y sólo se pueden obtener en CF's.

Por lo tanto, los CF's tienen una serie de posibles tipos de red que determinan un amplio rango de sus propiedades fundamentales tales como la estructura de bandas y el espectro de transmitancia y reflectancia (Kittel, 2004; McKelvey, 1993).

Figura 7. Ejemplos de tipos de redes de CF3D's. (a) FCC, (b) woodpile, (c) red espiral o GLAD, (d) cuasi red de diamante. Tomado de la Ref. Sukhoivanov and Guryev (2009).

⁴Por sus siglas en inglés, GLancing Angle Deposition.

II.3. Métodos numéricos aplicables a los CF's

Numerosos investigadores han dedicado sus esfuerzos a la disciplina de la simulación numérica en el campo de la fotónica (Yee, 1966; Mendoza-Suárez *et al.*, 2006; Archuleta-García *et al.*, 2007). La predicción de parámetros tan importantes como la estructura de bandas, la transmitancia y reflectancia en el campo de los elementos ópticos difractivos es un reto al mismo tiempo que simplifica y facilita la optimización en la etapa de diseño y fabricación. La simulación numérica contribuye con una considerable reducción de costos en el ámbito de la ingeniería y de la industria.

La base de la simulación numérica es lo que se denomina un programa de cálculo, el cual no deja de ser una excelente herramienta para resolver sistemas de ecuaciones y como tal, tiene potencial para abordar todo un amplio conjunto de problemas matemáticos. La era de la información, junto con el aumento de la capacidad computacional de los ordenadores modernos ha permitido resolver problemas de un gran número de incógnitas en tiempos cada vez más reducidos. En consecuencia, es necesario recurrir a modelos matemáticos que permitan reproducir el comportamiento físico de un dispositivo real.

Entre los métodos numéricos que permiten resolver las ecuaciones de Maxwell podemos mencionar los siguientes:

- Método de las Diferencias Finitas en el Dominio del Tiempo (FDTD⁵) (Yee, 1966).

El método FDTD se utiliza para resolver problemas electromagnéticos transitorios utilizando diferencias finitas. El método fue desarrollado por Yee (1966) para resolver las Ecuaciones de Maxwell. Estas ecuaciones en derivadas parciales se reemplazan por un sistema de ecuaciones en diferencias finitas. Eligiendo convenientemente los puntos

⁵Por sus siglas en inglés, Finite Difference Time Domain.

en que se evalúan las componentes de los campos en estas ecuaciones, la solución al sistema de ecuaciones satisface las condiciones a la frontera que involucran superficies conductoras ideales. Este método es un caso particular del método de Diferencias Finitas, que es un método estándar para la resolución de Ecuaciones en Derivadas Parciales (EDP).

- Método de Expansión de Ondas Planas (PWE) (Archuleta-García *et al.*, 2007).

El método PWE es una técnica computacional usada en CF's para resolver las Ecuaciones de Maxwell por medio de la formulación de un problema de valores propios. En este método se expanden en serie de Fourier las funciones periódicas que definen a la función dieléctrica y al campo electromagnético. Estas expansiones se introducen en la ecuación de onda para obtener una ecuación de valores propios. A partir de la solución de la ecuación de valores propios se pueden obtener las estructura de bandas.

- Método de la Ecuación Integral (IEM) (Mendoza-Suárez *et al.*, 2006).

Este método integral 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 de un sistema infinito resulta en una ecuación matricial homogénea cuya solución determina las funciones fuente, con las que se puede calcular las estructuras de bandas. Por otro lado para un sistema finito llegamos a una ecuación matricial inhomogénea, con la cual determinamos las funciones fuente con las que calculamos la respuesta óptica del sistema (Mendoza-Suárez *et al.*, 2006).

Este método de la Ecuación Integral tiene una gran ventaja en comparación de los demás 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, permitiendo una menor cantidad de recursos computacionales.

Los dos últimos métodos se abordaran de manera general en el capítulo IV.

II.4. Estructura de bandas

La estructura de bandas es una representación gráfica de las frecuencias de los modos permitidos como función del vector de onda de Bloch de un CF. A esta dependencia de la frecuencia con el vector de Bloch se le llama también relación de dispersión. En la estructura de bandas se encuentra la información para identificar si el cristal posee una banda fotónica; es decir el rango de frecuencias de los modos que no se pueden propagar en el cristal.

La polarización de la luz tiene una contribución importante en la presencia de bandas prohibidas fotónicas en el CF2D. Al considerar un haz de luz que se propaga en un medio que es periódico en dos dimensiones, éste observará contrastes en el índice de refracción de acuerdo a la polarización con la que se propague dentro del medio. Debido a este fenómeno, es conveniente separar la polarización en Transversal Eléctrica TE (las componentes del campo E_z , H_x y H_y son diferentes de cero) y Transversal Magnética TM (las componentes del campo H_z , E_x y E_y son diferentes de cero) para tener un mejor entendimiento del mecanismo de funcionamiento de los cristales fotónicos.

El modo transversal de un frente de onda electromagnética es el perfil del campo electromagnético en un plano perpendicular (transversal) a la dirección de propagación del haz. En la Fig. 8, se ilustra el modo transversal eléctrico y el modo transversal magnético.

La estructura de bandas para los modos TE y TM pueden ser completamente diferentes. Es posible que se encuentren bandas prohibidas para una polarización pero no

Figura 8. Polarización TE (transversal eléctrico) y polarización TM (transversal magnético).

para la otra polarización. Tomando esta consideración, se obtiene una estructura de bandas fotónicas con el método PWE para cada polarización como lo muestra la Fig. 9 (Ref. Joannopoulos *et al.* (2008)). En esta figura, las letras griegas $\Gamma - X - M - \Gamma$ representan los puntos de alta simetría que describen las direcciones de propagación en la red recíproca, delimitando la primera zona de Brillouin. La zona de Brillouin es definida por una celda primitiva de la red recíproca en el dominio de las frecuencias.

Figura 9. Estructura de bandas fotónicas de un CF con red cuadrada de columnas dieléctricas con radio $0.2a$. Las bandas azules representan los modos TM mientras que las bandas rojas representan los modos TE. Tomado de la Ref. Joannopoulos *et al.* (2008).

En este CF (Fig. 9), la luz se propaga en el plano $x-y$ de un arreglo cuadrado de columnas dieléctricas. El cristal está compuesto por barras de alúmina ($\varepsilon = 8.9$) en el aire, con un radio $r = 0.2a$, siendo "a" el parametro de red. Podemos ver que hay un gap TM formado después de la primera banda del modo TM. Así que en resumen, podemos concluir que si lanzamos una onda electromagnética en el cristal anterior con la frecuencia situada en la región del gap de la banda de TM, la propagación tendrá lugar sólo en el modo TE y no en el modo TM.

En la Fig. 9 podemos observar también, que la frecuencia está expresada en términos de la frecuencia reducida como $\omega_r = \omega a/2\pi c$. El eje horizontal muestra el valor del vector de onda reducido k_r en el espacio recíproco. A medida que nos movemos de izquierda a derecha, k_r se mueve a lo largo del borde de la zona irreducible de Brillouin, de Γ a X a M, como se muestra en la Fig. 9. Se pueden ver varias bandas de los modos TM y TE en la estructura de bandas. Esto nos permite analizar individualmente banda por banda para obtener los valores de las frecuencias para la propagación de ondas que dependen de la fracción de llenado de los diferentes materiales.

II.5. Métodos de fabricación de CF2D's

Debido a las numerosas complicaciones que implica la construcción de un cristal fotónico en 3D (CF3D), se ha vuelto a mirar hacia estructuras de 2D que puedan resolver algunos inconvenientes, como si fueran estructuras 3D. Dado que se construyen como dispositivos planares, entonces, tienen la capacidad de evitar la propagación de luz a través de ellos, en cualquier dirección, siempre que ésta esté contenida dentro de las dos dimensiones del cristal. Sin embargo, también pueden, en algunos casos, inhibir la propagación de luz que se diriga al material con un cierto ángulo de incidencia en la tercera dimensión, con lo cual se pueden lograr las tan deseadas bandas completas

sin recurrir a procesos sumamente complejos de fabricación. Además, las estructuras de un CF2D pueden incorporarse dentro de otros dispositivos básicos de forma mucho más efectiva que las estructuras en 3D.

En un principio, al pensar en construir un CF, se debe tener en cuenta las dimensiones involucradas en el proceso. Por ejemplo, el espaciamiento entre las celdas unitarias que definen la periodicidad de las características físicas del material. Esto define en que rango de frecuencias se encontrará la banda prohibida.

Como primera aproximación al problema se puede calcular la distancia entre las estructuras básicas como

$$d = \frac{\lambda}{\varepsilon}, \quad (2)$$

donde λ es la longitud de onda correspondiente a la banda prohibida deseada y ε es el coeficiente dieléctrico del material.

Es importante destacar que el cálculo anterior corresponde al caso en el que la periodicidad de la estructura se debe a la presencia de espaciamientos periódicos de aire a lo largo del material, con lo cual la distancia d representa la separación entre los espaciamientos de aire que deberán ser introducidos para lograr la banda de energía prohibida deseada.

Los cristales fotónicos que trabajan en las regiones de microondas e infrarrojo lejano son relativamente fáciles de fabricar. Aquellas que trabajan en la región visible, especialmente los 3D son difíciles de fabricar debido a sus constantes de red pequeñas (Sakoda, 2001).

Si quisiéramos ubicar la banda de energía prohibida en el espectro del infrarrojo, entonces, tomando como referencia un índice de refracción de 3.6, vemos que los espaciamientos deberían estar a una distancia máxima de aproximadamente $100 \mu\text{m}$, lo cual hace que la posibilidad de realizarlo de forma mecánica se vuelve imposible. En

el caso de que la banda prohibida se quiera situar cada vez más cerca de la luz visible (longitudes de onda menores), el proceso de fabricación del material deberá realizarse de forma química, colocando prácticamente átomo por átomo en la estructura.

Para longitudes de onda intermedias, por ejemplo, en el orden del infrarrojo cercano, la fabricación de los materiales puede realizarse utilizando métodos de microfabricación, como los utilizados en la fabricación de dispositivos semiconductores con los costos de producción e inversión correspondientes. Actualmente, esta es un área de investigación muy importante dentro del ámbito de los CF's, ya que el abaratamiento de los costos de producción es de vital importancia para el desarrollo futuro de dispositivos con una transmisión de información totalmente óptica.

La formación de bandas prohibidas fotónicas completas en CF's depende fundamentalmente de 3 factores:

- El grado de contraste entre los índices de refracción.
- El tipo de estructura de ordenamiento.
- El factor de llenado del sistema.

La inclusión de defectos en las estructuras de los CF's agregará características ópticas nuevas al cristal. Estos defectos pueden ser planos, líneas o puntos. Los defectos que se inducen en un CF para agregar una característica óptica específica pueden ser: cambio de material dieléctrico, cambio de forma del dieléctrico o tal vez la ausencia de material. Al perturbar el CF con defectos se pueden inducir modos de propagación dentro del gap fotónico del cristal dándole propiedades nuevas que pueden ser explotadas para la fabricación de dispositivos tecnológicos novedosos.

Los métodos de fabricación de CF's son diversos. A continuación se presenta una reseña de los métodos más comunes empleados en la fabricación de CF2D's.

II.5.1. Litografía

La litografía es una técnica que se ha tomado de la industria micro-electrónica; sin embargo, como en el caso de un CF las dimensiones de la red son muy pequeñas (periodicidad de 200-700 nm y con dimensiones del objeto que se repite periódicamente ~ 100 nm) no es posible utilizar la fotolitografía estándar. La alternativa es utilizar la litografía por haz de electrones o EBL⁶ (ver Fig. 10). Con este método se crean máscaras para fabricar los CF's mediante ataque químico (Wilder *et al.*, 1998).

Figura 10. Litografía por haz de electrones. Este método consiste en (a) recubrir la superficie del material con una película fotosensible y (b) exponer un haz enfocado de electrones en un patrón previamente diseñado. El haz de electrones cambia la solubilidad de la capa protectora, lo que permite la (c) eliminación de las regiones expuestas de la película fotosensible por inmersión en un disolvente. Posteriormente se (d) añade una capa de algún otro material sobre la película tratada mediante algún método como el sputtering. Por último, se (e) remueve la resina fotosensible que protegió el sustrato con otra solución química llamada eliminador. Finalmente nos queda el (f) cristal fotónico con el patrón diseñado.

⁶Por sus siglas en inglés, Electron Beam Lithography.

Utilización de máscaras

El enmascarado es sólo un elemento que contribuye a la fabricación de CF's; sin embargo, es un elemento importante que tiene impacto en la calidad del cristal que se fabrica así como en sus características geométricas. Por esta razón es necesario elegir correctamente el material que servirá como máscara. El material de la máscara deberá erosionarse a una razón considerablemente menor que el material donde se grabará la estructura periódica durante el proceso de “grabado seco” (Dry Etching).

Dry Etching

El grabado con haz de iones asistido químicamente o CAIBE (Chemically Assisted Ion Beam Electron) es una técnica de “dry etching” utilizada en la fabricación de CF's. En CAIBE, un haz de iones colimado de alta energía incide sobre la muestra durante un periodo de tiempo muy corto para efectuar un grabado por reacción de iones o RIE (Reactive Ion Etching). La química para el grabado estándar de los semiconductores GaAs/AlGaAs es a base de cloro, usando SiCl_4 o Cl_2 . Estos materiales asisten al haz de iones para acelerar el proceso de grabado. Este método requiere de una máscara para proteger diversas regiones en el material para obtener un patrón periódico en la muestra. Este define un CF en particular. La Fig. 11 muestra un par de ejemplos de CF's construidos mediante “dry etching” (Krauss and Rue, 1999).

II.5.2. Electroquímica

La electroquímica es un método también conocido como “grabado anódico y crecimiento”. Se han logrado relaciones de aspecto impresionantes con esta técnica en alúmina y en silicio. Con este método se han obtenido relaciones de aspecto mayores de 50:1 comparándose favorablemente con relaciones menores a 10:1 que son típicos de

Figura 11. Dos ejemplos de redes fotónicas en 2D fabricadas con litografía de haz de electrones y grabadas en una guía de onda GaAs/AlGaAs utilizando RIE y máscaras dieléctricas. Tomado de la Ref. Krauss and Rue (1999).

“dry etching”.

El alto grado de regularidad alcanzable con el proceso electroquímico sobrepasa las estructuras generadas por medios litográficos, como lo ilustra la Fig. 12. El único requerimiento para iniciar el proceso es algo de discontinuidad en la superficie. Una vez que el proceso da inicio, el tamaño del poro es determinado por la corriente electroquímica y no por el tamaño de la irregularidad en la superficie que inicia el proceso.

Figura 12. Micrografía de un CF2D fabricado por grabado anódico (“silicio macro-poroso”). La estructura describe una red hexagonal o “grafito”. Tomado de la Ref. Krauss and Rue (1999).

II.5.3. Oxidación vertical selectiva

Para fabricar un CF es necesario cambiar de forma periódica espacialmente las propiedades ópticas del material base, es por eso que se perfora un patrón de orificios mediante diversas técnicas. De esta forma, se crea un alto contraste de índice de refracción, tal como se ilustra en la Fig. 13. Sin embargo, la distribución de orificios presentes en la superficie de la muestra dificulta el depósito de espejos o contactos una vez grabada la estructura. La oxidación vertical selectiva mantiene la integridad física del material, produciendo una microestructura completamente sólida debido a que esta produce “columnas de óxido” que brindan un contraste de índice de refracción, evitando la necesidad de perforar el material. El problema de esta técnica es que las relaciones de aspecto que pueden alcanzarse son muy pequeños (1:1); además de tener muy altas probabilidades de generar micro-fracturas o problemas estructurales tales como delaminación.

Figura 13. Esquema de sección transversal de una columna de óxido producida por el método de oxidación selectiva en la fabricación de CF's. Tomado de la Ref. Krauss and Rue (1999).

II.5.4. Haz enfocado de iones (FIB)

La técnica del Haz Enfocado de Iones usa un haz de iones focalizados que incide sobre la muestra donde la interacción de iones a alta energía con la materia sólida causa la remoción de átomos de la superficie del material por lo que de esta forma se puede

maquinar un patrón de orificios en el material. Es un método muy útil para la fabricación de prototipos rápidos y modificación de CF's. Este equipo permite hacer un micro-maquinado sin la necesidad de utilizar máscaras o irregularidades en el material, como lo requieren algunos otros métodos. Para fabricar CF's mediante FIB, sólo es necesario indicar al equipo el patrón donde debe erosionar el material y establecer los parámetros de erosión. Con este equipo es posible hacer varias iteraciones en un mismo material de forma rápida. En la Fig. 14 se muestra un patrón periódico fabricado mediante FIB y su sección transversal (Cabrini *et al.*, 2005). El inconveniente principal en este método es la redeposición del material erosionado, que provoca que las paredes de los oricios no sean paralelas y tiendan a tener forma cónica.

Figura 14. Micrografía de un patrón periódico fabricado mediante FIB. El corte transversal muestra una profundidad de 600 nm de profundidad de los orificios. Tomado de la Ref. Cabrini *et al.* (2005).

Se ha estudiado con mayor énfasis la factibilidad de emplear el equipo de haz de iones enfocados para la fabricación de CF's. Debido a que éste ha mostrado ser un método prometedor al reducir el tiempo de grabación de las estructuras periódicas en el CF y es muy flexible para ajustar parámetros nuevos si es necesario (es decir, agregar defectos a alguna estructura) (Nellen *et al.*, 2007). Empleando esta metodología se obtiene alta calidad en el acabado del CF esculpido, lográndose igualar las dimensiones que

otras técnicas han alcanzado (diámetros de orificio de ~ 100 nm) y se obtiene una gran fidelidad en la fabricación del cristal respecto al diseño (Xu *et al.*, 2007).

Los autores que han utilizado el FIB para fabricación de CF's concuerdan en que es una herramienta versátil y se vislumbra un buen futuro en su uso. Principalmente en el mercado de las telecomunicaciones (Nellen *et al.*, 2007), debido a que los CF's que se han logrado fabricar presentan longitudes de onda de trabajo alrededor de los 1550 nm (IR cercano). Esta frecuencia es ampliamente utilizada en el campo tecnológico mencionado. Sin embargo, todos los autores convergen en los cuidados que deben tenerse al utilizar el FIB para este propósito, debido a que esta técnica tiene como inconveniente la redeposición del material erosionado sobre la estructura esculpida. Como solución a este problema, algunos de ellos sugieren el uso de flujo de gas para evitar esta redeposición (Nellen *et al.*, 2007). Inclusive existen reportes donde se comenta que esto ya ha sido implementado obteniéndose mejoras en la fabricación de estos cristales (Cabrini *et al.*, 2005).

Las micrografías que muestra la Fig. 15, son algunas estructuras fotónicas planas que se han fabricado empleando la técnica de micro-maquinado con FIB. En ellas podemos observar la dimensión de los orificios perforados que es del orden de 600 a 250 nm de diámetro.

En la parte de la metodología experimental se explicará más a detalle este método que fue utilizado para el maquinado de nuestras estructuras periódicas.

II.6. Aplicaciones

Así como el desarrollo de materiales semiconductores condujo a la actual revolución electrónica, los CF's pueden ser el puente que conduzca a los circuitos integrados fotónicos con gran escala de integración. Por ejemplo, tradicionalmente, para interconectar dos

Figura 15. (a) Micrografía SEM de un CF grabado mediante FIB. (b) Mediciones del diámetro de la inclusión: ~ 480 nm y constante de red: ~ 600 nm. (c) Micrografía SEM de las cavidades grabadas presentando algunos defectos incorporados dentro de una línea de defecto y (d) mediciones del diámetro de la inclusión: ~ 450 nm y diámetro del defecto: ~ 250 nm. Tomado de la Ref. Goyal *et al.* (2016).

dispositivos de óptica integrada se hacía uso de guías de onda dieléctricas tales como las fibras ópticas. Con el desarrollo de la tecnología fotónica ahora es posible fabricar guías de onda con CF's. De esta forma, las necesidades actuales de minimizar el tamaño de estos dispositivos y hacer interconexiones menos voluminosas han abierto un nuevo campo de aplicación para los CF's debido a su selectividad de frecuencias y capacidad de confinar la luz. Estas propiedades de los CF's han sido muy novedosas y han permitido diseñar microestructuras que funcionen no sólo como guías de onda sino también como cavidades resonantes, filtros de frecuencia, acopladores, etc.

Entre las aplicaciones más importantes de los CF's destaca la inhibición de la emisión espontánea, propuesta inicialmente por Purcell *et al.* (1946) para cavidades resonantes y aplicada por Yablonovitch (1987) a los CF's. Si la frecuencia en la que se produce la emisión espontánea cae dentro de la banda fotónica prohibida, el fotón no podrá decaer energéticamente debido a la ausencia de estados fotónicos accesibles con los cuales

pueda acoplarse. De este modo, el fotón ni siquiera se creará y la emisión espontánea será completamente inhibida. Una de las consecuencias inmediatas que esto conlleva es la posibilidad de fabricar láseres de alta eficiencia y bajo umbral debido a que las pérdidas ocasionadas por el término de emisión espontánea se reducen a cero. Para ello sería necesario construir un sistema que integrara un CF y un material luminiscente convenientemente acoplados, como se muestra esquematizado en la Fig. 16.

Figura 16. Con un sistema ópticamente activo como un semiconductor (derecha) acoplado convenientemente a un CF se puede inhibir la emisión espontánea. Los electrones promovidos se relajan emitiendo fotones hasta el fondo de la banda de conducción, pero al encontrarse esa energía dentro de la banda fotónica prohibida, la emisión espontánea no ocurrirá, a menos que produzcamos un defecto en la estructura fotónica que abra estados dentro del gap, permitiendo la propagación a través de ellos.

Otro gran reto, ha sido la utilización en el guiado de luz. Si se introduce un defecto lineal en un CF, la radiación electromagnética con energía contenida en el gap se propagará por el defecto a modo de guía. Ya que dicha propagación no tiene lugar por reflexión total interna, como ocurre en los sistemas de guías de onda convencionales, las pérdidas energéticas serán reducidas considerablemente (idealmente nulas) siendo posible la obtención de grandes cambios en la dirección del haz o esquinas pronunciadas. En este mismo principio, se basan las fibras fotónicas, que actualmente ya están comercializadas.

En cuanto a la ingeniería de circuitos optoelectrónicos, los CF's tienen todas las

cualidades requeridas para confeccionar chips completamente ópticos dada su capacidad para dirigir y moldear el flujo electromagnético. De este modo, además de guías de onda diseñadas a base de defectos, a modo de cables ópticos, la nueva fotónica requiere todos los dispositivos que hagan posible imitar a la microelectrónica actual. Así, han ido apareciendo diversas estructuras con propiedades análogas a éstas: guías, moduladores, multiplexores, divisores de haz y el novedoso efecto de superprisma. Este interesante efecto no necesita de un gap completo y se fundamenta en la propagación anómala de la luz en el interior de un cristal fotónico. La refracción de luz en estos sistemas es quinientas veces mayor que en los prismas convencionales y para diferencias en la longitud de onda incidente de tan solo un 1% se consiguen dispersiones de más de 50 grados. Con estas estructuras se pueden fabricar también superlentes y supercolimadores.

Entre todos estos dispositivos, por supuesto, falta el más importante para la computación óptica: el transistor. Un transistor óptico basado en CF's ha sido propuesto de forma teórica por John (1987). Su incorporación al abanico de dispositivos que ya se están diseñando basados en estos sistemas permitirá, sin duda, en un futuro una tecnología que abrirá las puertas a la era de la fotónica.

Capítulo III

METODOLOGÍA EXPERIMENTAL

A continuación se expondrán las técnicas experimentales utilizadas en la caracterización estructural y óptica de dos estructuras fotónicas de red cuadrada construidas sobre un sustrato de silicio. Así como la caracterización de la emisión de las fuentes de luz láser utilizadas en las mediciones de la reflectancia especular de los cristales fotónicos de red cuadrada. Finalmente se describe el método y parámetros de fabricación que se empleó en la construcción de un par de estructuras fotónicas indicando los materiales utilizados para su fabricación.

III.1. Caracterización del haz de luz de incidencia

Antes de realizar las mediciones para diferentes frecuencias, se realizó la caracterización de los haces de luz para llevar a cabo de forma óptima el experimento. A continuación se muestran las pruebas realizadas para dichos haces de luz.

III.1.1. Potencia emitida en los láseres

Se observó el comportamiento temporal de la emisión de luz de los láseres, midiendo cada 5 min la potencia de cada láser en operación durante un periodo de 3 horas. Además se verificó con una segunda medición la reproducibilidad de los datos para determinar las condiciones y el régimen de mayor estabilidad para minimizar los márgenes de error debido a las variaciones en la potencia de dichos láseres y así garantizar mediciones confiables y de buena calidad para la experimentación. Para este efecto, se utilizaron un Analizador de Espectro Advantest modelo Q8383 capaz de detectar señales ópticas desde 632 nm hasta $1.75 \mu\text{m}$, una fuente de poder con controlador LD&TEC marca QPhotonics, un módulo de instalación láser con adaptador Modelo QM14BTF y láseres de diodo marca QPhotonics de longitudes de onda de 632, 785, 852 y 1308 nm. El comportamiento de la emisión de las fuentes de luz láser se muestra en la Fig. 17.

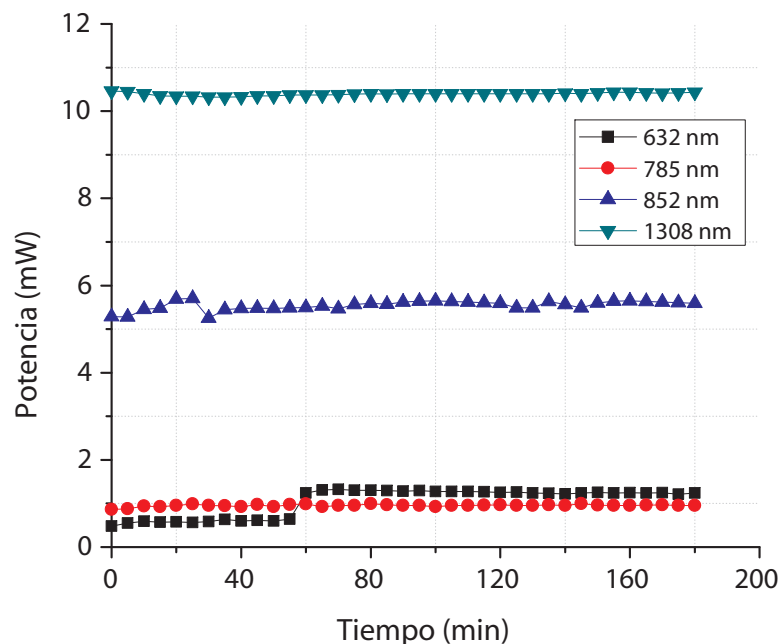


Figura 17. Comportamiento temporal de la emisión de luz de los láseres utilizados en este trabajo.

III.1.2. Distribución espacial de intensidades y diámetro del haz de luz

Se caracterizó el haz de luz del láser de He-Ne, el de emisión en 785 y el de 852 nm mediante un analizador de perfil de haces de luz láser marca COHERENT mediante el software BeamMaster PC para observar la distribución espacial de intensidades y el diámetro final del haz después del arreglo de componentes ópticos. Esto a efecto de asegurar la obtención de un diámetro menor a las dimensiones de las estructuras fotónicas, de forma que el “spot”, o cintura del haz de luz más pequeño quede inscrito dentro de dicha estructura. Es decir, se busca que el haz de luz no toque los bordes o alguna porción del sustrato de silicio para obtener así una medición de reflectancia especular precisa del CF.

Figura 18. a) Fotografías del equipo BeamMaster y el software utilizados. Distribución espacial de intensidades para los haces de luz b) láser de Helio – Neón (632 nm) y del láser de emisión de c) 785 y en d) 852 nm.

Como se puede observar en la Fig. 18, el diámetro obtenido para la longitud de onda de 632 nm fue de $\sim 12 \mu\text{m}$, para la longitud de onda de 785 nm de $\sim 3 \mu\text{m}$ y para

la longitud de onda de 852 nm de $\sim 15 \mu\text{m}$.

El perfil del haz de luz de 1308 nm de longitud de onda no pudo ser observado debido a que el equipo BeamMaster utilizado para ello, sólo puede detectar longitudes de onda menores a 1000 nm. Sin embargo, es muy factible que el diámetro efectivo correspondiente a esta longitud de onda es de menores dimensiones que el área del CF. Esto, basado en los resultados obtenidos al caracterizar los CF's bajo la incidencia de este haz con esta longitud de onda.

III.2. Caracterización morfológica de los CF's

Se caracterizaron las muestras de los dos CF2D con periodicidad cuadrada bajo estudio, utilizadas en las mediciones de reflectancia especular óptica haciendo uso de la técnica de microscopía electrónica de barrido de alta resolución (SEM¹). Para la técnica se utilizó un microscopio electrónico de barrido marca JEOL modelo JSM-7401F del Laboratorio Nacional de Nanotecnología en el CIMAV (ver Fig. 19).

Figura 19. Fotografía del microscopio electrónico de barrido marca JEOL modelo JSM-7401F.

Se observaron las dos estructuras fotónicas con el fin de conocer sus parámetros estructurales característicos como: el diámetro de las cavidades, el parámetro de red y el tamaño de la muestra, entre otros. Una de estas estructuras, la de control, está descrita

¹Por sus siglas en inglés, Scanning Electron Microscopy.

por una red cuadrada regular con constante de red $a = 1 \mu\text{m}$ y orificios circulares de $\sim 600 \text{ nm}$ de diámetro, cubriendo un área de $\sim 80 \times 80 \mu\text{m}^2$. Este CF no presenta micro-cavidades ópticas y funge como referencia en cuanto a propiedades ópticas respecto al otro CF.

La otra estructura, definida en un arreglo similar de orificios de aire, incluye esta vez un patrón de 9 micro-cavidades cuasi-circulares embebidas en la red cuadrada circular con orificios de aire. El diámetro de estas cavidades fue de un orden de magnitud mayor que el diámetro de los orificios de la estructura de control, es decir de $\sim 10 \mu\text{m}$, describiendo este arreglo a su vez otra red cuadrada (véase Fig. 20).

Figura 20. a) Micrografía de la estructura fotónica de 9 cavidades con red cuadrada. b) Micrografía de una de las cavidades embebidas en la red cuadrada. c) Micrografía de la estructura fotónica de control de red cuadrada. d) Micrografía aumentada de la muestra de control.

III.3. Caracterización óptica de los CF's

La caracterización óptica de las estructuras fotónicas fabricadas tuvo lugar en las instalaciones del laboratorio de propiedades ópticas del CIMAV. Para esto, se usaron cuatro

láseres, un láser de Helio-Neón marca Melles Griot con una longitud de onda de 632.8 nm y una potencia máxima de salida de 15 mW, un módulo láser multicanal marca Thorlabs modelo MCLS1 con longitudes de onda de 785 y 852 nm y un láser de diodo de 1308 nm marca QPhotonics modelo QDFBLD-1300-10. El haz de luz de cada uno de los láseres fue linealmente polarizado a 0° y 90° para hacerlo incidir sobre las muestras bajo estudio.

III.3.1. Arreglos y dispositivos experimentales

El arreglo para hacer incidir el haz de luz proveniente del láser de He-Ne en las muestras consistió de un filtro espacial (compuesto por un objetivo 20X y un pinhole de $25 \mu\text{m}$), una lente convergente biconvexa con distancia focal de 20 mm para luz visible, una lente divergente bicóncava con distancia focal de -6.0 mm para longitudes de onda de 650 – 1050 nm marca Thorlabs, una lente convergente biconvexa con distancia focal de 20 mm para luz infrarroja, un retardador de $\lambda/4$ para 632 nm marca Thorlabs, un polarizador lineal para luz visible y una lente convergente biconvexa con distancia focal de 20 mm para luz infrarroja, tal como se muestra en la Fig. 21.

Figura 21. Fotografía del arreglo experimental utilizado para medir la reflectancia especular del haz de luz emitido por el láser de He-Ne.

Para el caso del módulo láser multicanal se utilizó una fibra óptica monomodo con conexiones FC/UPC – FC/UPC marca Optronics para longitud de onda de 1310 nm

conectada en un extremo al módulo láser y el otro extremo a un paquete colimador marca Thorlabs modelo F240FC-C con distancia focal de 8.13 mm, para una longitud de onda de 1310 nm colocado en un soporte tipo telescopio (véase Fig. 22) donde se colocó un polarizador lineal para infrarrojo cercano y una lente convergente con distancia focal de 20 mm para luz infrarroja.

Para el láser de diodo se conectó al paquete colimador colocado en el telescopio con el polarizador y la lente convergente al igual que en el caso anterior.

Figura 22. Fotografía del telescopio conformado por un paquete colimador, un polarizador lineal y una lente convergente.

La detección de la señal reflejada por las estructuras fotónicas se realizó con un sensor de fotodiodos marca Newport modelo 918D-UV-OD3R con rango espectral de 200 a 1100 nm (véase Fig. 23).

Figura 23. Fotografía del detector de fotodiodos montado en el arreglo experimental tipo elipsómetro.

Las muestras se montaron en un arreglo experimental tipo elipsómetro compuesto por platinas giratorias y de desplazamiento con ajuste micrométrico, una montura rotatoria, un goniómetro y un elevador, todos ellos de marca Newport, con el fin de cubrir todos los grados de libertad de movimiento de la muestra (véase Fig. 24). Este dispositivo nos permitirá incidir el haz luminoso a ángulos entre 21 y 61° sobre las estructuras fotónicas.

Figura 24. Fotografía del arreglo experimental tipo elipsómetro utilizado en el presente trabajo de investigación.

III.3.2. Comprobación del método experimental de medición

En primer lugar se realizó la medición de la reflectancia especular en una muestra de silicio (Si) sin estructura cristalina y se comparó con las curvas teóricas de la reflectancia para este material con la finalidad de verificar que las mediciones fueran correctas. Como se puede observar en la Fig. 25, los datos de las mediciones experimentales se ajustan con los obtenidos analíticamente.

Las curvas teóricas para el Si se calcularon por medio de las ecuaciones de Fresnel para un índice de refracción $n = 3.681$ y representan un punto de referencia para

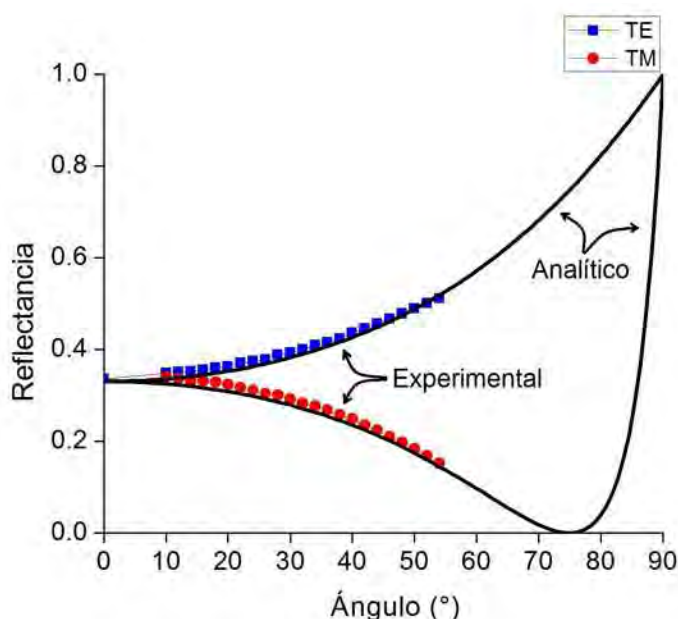


Figura 25. Reflectancia especular como función del ángulo de incidencia sobre un sustrato de silicio con índice de refracción $n = 3.681$ y para una longitud de onda $\lambda = 632$ nm. Las líneas sólidas corresponden al caso analítico y las líneas punteadas al caso experimental para polarización TE (línea con cuadros) y TM (línea con círculos).

cuantificar las variaciones de estos niveles en las mediciones experimentales en cada una de las estructuras fotónicas bajo estudio.

III.3.3. Localización de estructuras en el sustrato de silicio

Durante el desarrollo de las mediciones experimentales de las propiedades reflectivas de las estructuras fotónicas consideradas, se presentaron algunas dificultades para localizarlas físicamente con el haz de luz, debido a sus dimensiones microscópicas. Con la finalidad de resolver esta dificultad se colocó una tira de cinta adhesiva masking (como referencia) que ayudó a delimitar el área de localización de la muestra. Esto permitió también tener un contraste en las mediciones para facilitar la ubicación de los CF's con mayor precisión.

Posteriormente, se hicieron mediciones para garantizar que el punto de luz de prueba

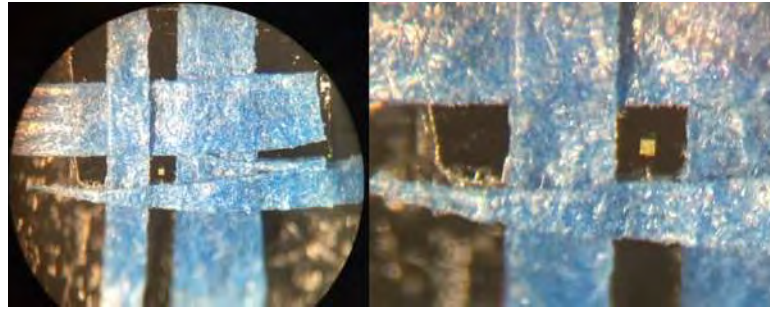


Figura 26. Fotografías tomadas de un microscopio óptico de la estructura fotónica delimitada por tiras de cinta adhesiva.

utilizado en estos experimentos cubriera en su totalidad el CF. Se efectuó un barrido espacial del haz de luz láser a lo largo de la coordenada espacial (eje x) de los CF's para identificar el cambio de reflectancia especular en las fronteras y dentro del área que define las estructuras fotónicas. La Fig. 27 muestra el resultado de la medición de la reflectancia especular como función de la coordenada espacial a lo largo de una dirección fija en el experimento realizado con la muestra de control de red cuadrada, utilizando haces de luz coherente con longitudes de onda de 785 nm y de 1308 nm, respectivamente.

III.3.4. Mediciones de las estructuras fotónicas

Es importante mencionar que las mediciones realizadas se hicieron de manera localmente; es decir, se colocó el detector en la posición del ángulo de reflexión correspondiente. Esto fue debido a que en el laboratorio del CIMAV no se contaba con una esfera integradora. Por esta razón, vamos a emplear el término de reflectancia especular (véase la Fig. 28), a pesar de que existe la posibilidad de que el haz sea reflejado en diferentes ángulos con diferente intensidad.

Una vez determinados los parámetros óptimos se realizó la caracterización óptica de las estructuras fotónicas. Para esto se realizaron mediciones para obtener las

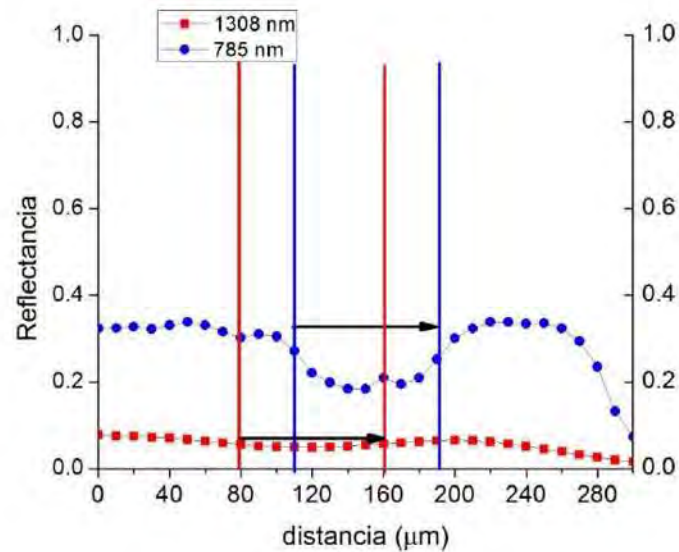


Figura 27. Reflectancia especular a 45° como función de la coordenada espacial de la muestra de control con red cuadrada.

propiedades reflectivas de los CF's en función del ángulo de incidencia para diferentes frecuencias. Para esto se utilizaron los láseres con longitudes de onda de 632, 785, 852 y 1308 nm. La medición se llevó a cabo para ambas polarizaciones TE (Fig. 29(a)) y TM (Fig. 29(b)), con la finalidad de poder determinar el efecto de cada polarización en cada una de las estructuras fotónicas con red cuadrada bajo estudio.

En las Fig. 29 se puede observar que la reflectancia especular cambia en relación al ángulo de incidencia, así como para diferentes longitudes de onda. En particular, para la longitud de onda de 852 nm presenta una mayor reflectancia en el intervalo de los ángulos de 20 a 60 grados para ambos modos de polarización.

Por otra parte, en la Fig. 30 se muestra las reflectancias especulares medidas en función del ángulo, para una estructura fotónica de red cuadrada con 9 micro-cavidades embebidas en la red para la polarización TE (Fig. 30(a)) y TM (Fig. 30(b)). Es importante mencionar que las estructuras fotónicas que se caracterizaron, ya habían sido creadas. Sin embargo, en la siguiente sección se describirá la técnica de fabricación que

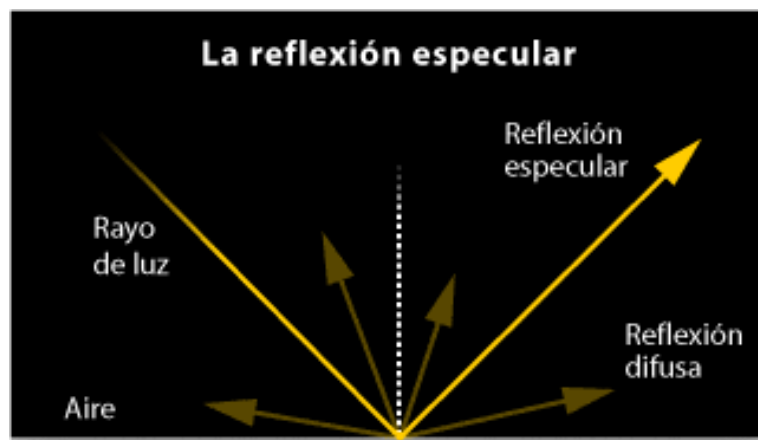


Figura 28. La distribución angular de la luz depende de la forma que tiene la superficie, sin embargo, el rayo de luz que se refleja en un ángulo opuesto al incidente se llama reflectancia especular (specular reflectance).

utilizamos para crear nuestras propias estructuras cristalinas en 2D. Por otro lado, los resultados experimentales de la respuesta óptica como función del ángulo de incidencia que se muestran, no se hizo una comparación con los resultados numéricos ya que para el modelado se planteó como un problema diferente. Es decir, la geometría de la estructura fotónica se modeló como un CF2D, porque hasta el momento solamente la técnica numérica IEM se puede plantear de forma escalar. Debido a esto, la iluminación sobre el CF2D se hizo de forma perpendicular a la dirección de las inclusiones creadas experimentalmente. En cambio, como ya se mencionó, experimentalmente se estudió el problema como un CF3D que fue iluminado en la misma dirección de las inclusiones creadas sobre el sustrato de silicio.

III.4. Fabricación de estructuras fotónicas mediante el FIB

En este trabajo de investigación también se fabricaron y caracterizaron morfológicamente dos CF's sobre sustratos de silicio empleando la técnica de erosión por haz

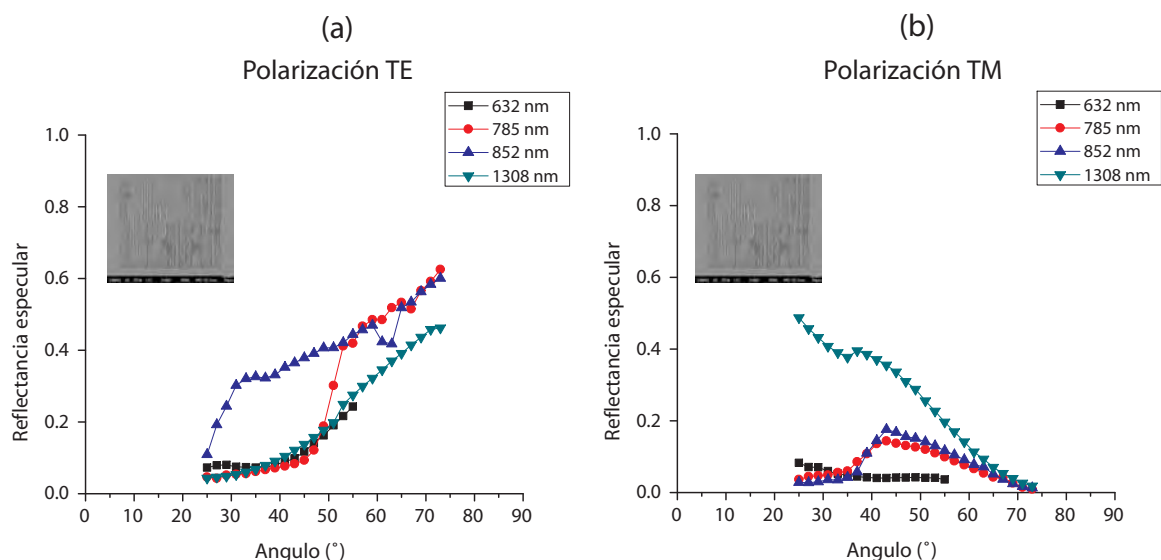


Figura 29. Reflectancia especular óptica de la muestra de control como función del ángulo de incidencia del haz de luz con diferentes longitudes de onda para el caso de la polarización (a) TE y (b) TM.

enfocado de iones, utilizando un equipo marca JEOL modelo JEM9320-FIB del Laboratorio Nacional de Nanotecnología en el CIMAV (Fig. 31). Antes de describir el procedimiento y parámetros de fabricación utilizados, se muestra una explicación de la técnica del FIB.

III.4.1. Haz enfocado de iones o FIB

Un sistema de haz enfocado de iones o FIB es un instrumento científico parecido a un Microscopio Electrónico de Barrido (SEM). Sin embargo, mientras que el SEM utiliza haces de electrones focalizados para obtener una imagen de la muestra, el sistema FIB usa un haz de iones focalizados. Las imágenes que se producen mediante FIB son “destructivas”.

Sus principales usos son (véase la Fig. 32):

- Edición, modificación y reparación de dispositivos o circuitos integrados.

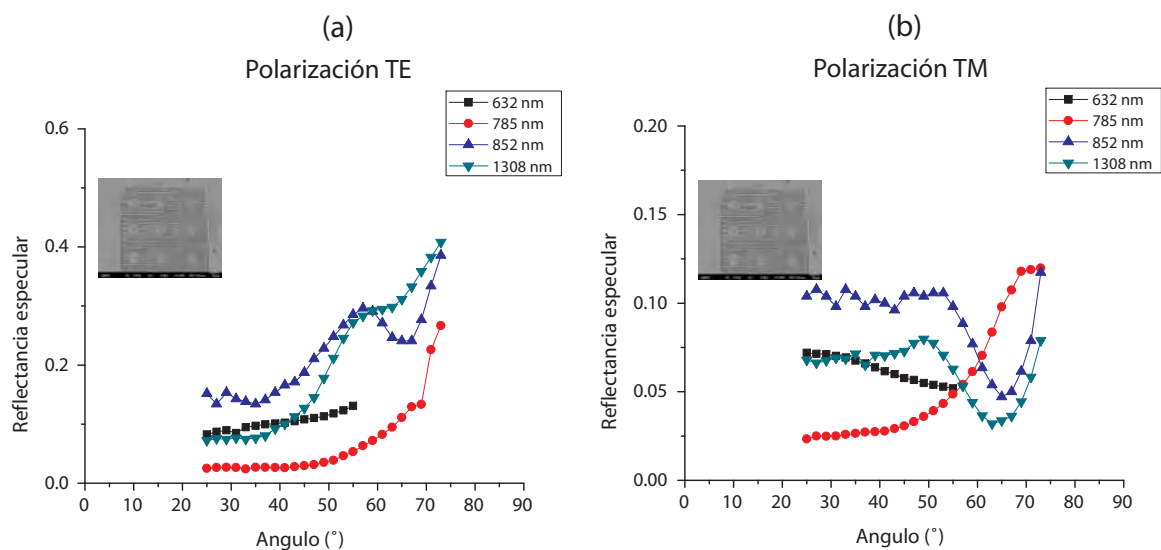


Figura 30. Reflectancia especular óptica de la muestra de red cuadrada con 9 micro-cavidades embebidas en la red como función del ángulo de incidencia del haz de luz con diferentes longitudes de onda para el caso de la polarización (a) TE y (b) TM.

- Deposición y fabricación de nano-estructuras.
- Reconstrucción 3D.
- Tomografía.
- Micro y nano maquinado.
- Micro y nano deposición.
- Preparación de muestras (SEM, TEM, SIMS, Auger, XPS, AFM. . .).
- Obtención de imágenes.
- Contraste por orientación cristalina o fase (channeling) usando electrones o iones.
- Análisis de tamaño de grano.

Entre los tipos de muestras que pueden ser procesadas con el FIB están los semi-conductores, metales, polímeros, cerámicos, compositos, biológicos, geológicos, farma-

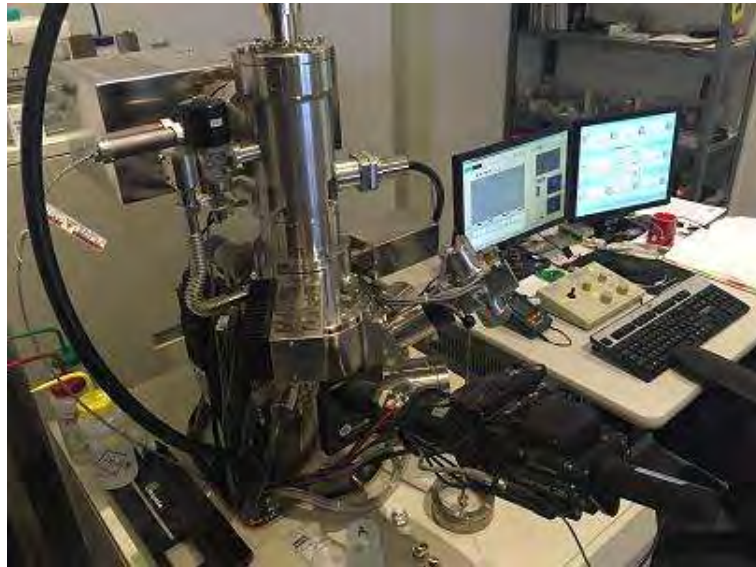


Figura 31. FIB marca JEOL modelo JEM9320-FIB del Laboratorio Nacional de Nanotecnología del CIMAV.

céuticos, monolíticos, fibras, polvos y acabados complicados.

Los componentes principales de un sistema FIB son (véase la Fig. 33):

- Fuente de iones.
- Columna.
- Detector.
- Sistema de vacío.
- Inyección de gas.
- Platina.
- Nanomanipuladores.
- Computadora de control.

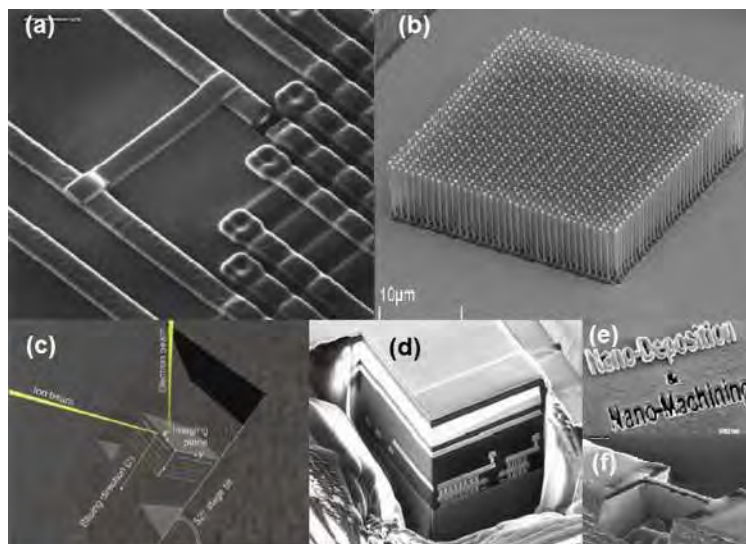


Figura 32. Principales usos de un FIB. (a) Reparación de circuitos integrados, (b) fabricación de nano-estructuras, (c) reconstrucción 3D, (d) tomografía, (e) nano-maquinado y deposición y (f) preparación de muestras.

Entre las fuentes de iones disponibles comercialmente están el galio, indio, galio mono-isotópico, indio mono-isotópico, oro, aleación oro/germanio, aleación oro/silicio, aleación oro/silicio/berilio, aleación oro/silicio/paladio/boro, aleación paladio/arsénico y algunas otras especies iónicas por demanda del cliente.

El galio (Ga^+) es la Fuente de Iones de Metal Líquido (LMIS) más popular en las aplicaciones FIB debido a que:

- Es un metal líquido en condiciones de temperatura ambiente.
- Tiempo de vida largo de la fuente (> 1500 hrs).
- Compatible al alto vacío.
- Iones pesados óptimos para erosión catódica (sputtering).
- Baja temperatura de fusión (28.9 °C) minimiza su interdifusión y su reactividad con la aguja de tungsteno.

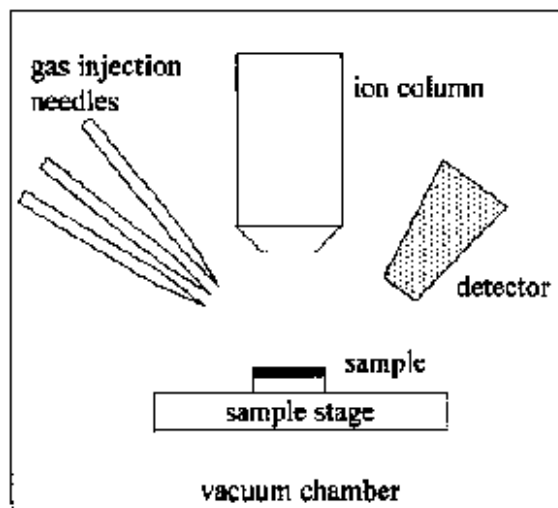


Figura 33. Esquema básico de un FIB.

- Baja volatilidad a temperatura de fusión permite la conservación del galio y su largo tiempo de vida como fuente de iones.
- Su baja energía libre superficial promueve un comportamiento viscoso y que “moje” la aguja de tungsteno.
- Baja presión de vapor que permite su uso en forma pura.
- Excelentes propiedades mecánicas, eléctricas y de vacío.
- Características de emisión que le permiten una alta intensidad angular y su propagación a baja energía.

En una fuente de iones de metal líquido de galio (véase la Fig. 34(a)), el metal galio calentado en el depósito se coloca en contacto con una aguja de tungsteno. El galio moja la aguja de tungsteno y fluye hacia la punta donde las fuerzas opuestas de la tensión superficial y el campo eléctrico forman al galio en una punta en forma de cono llamado cono de Taylor (véase la Fig. 34(b)). El radio de la punta de este cono es

extremadamente pequeño (~ 2 nm). El enorme campo eléctrico en esta pequeña punta causa ionización y emisión de campo de los átomos de galio. Los iones son acelerados generalmente, y se focalizan sobre la muestra por medio de unas lentes electrostáticas.

El haz de iones primarios de galio llega a la superficie de la muestra y remueve una pequeña cantidad de material, la cual deja la superficie, ya sea como iones secundarios o átomos neutros. El haz primario también produce electrones secundarios. Como el haz primario barre un patrón en la superficie de la muestra, la señal de los iones removidos o de los electrones secundarios se colecta para formar una imagen.

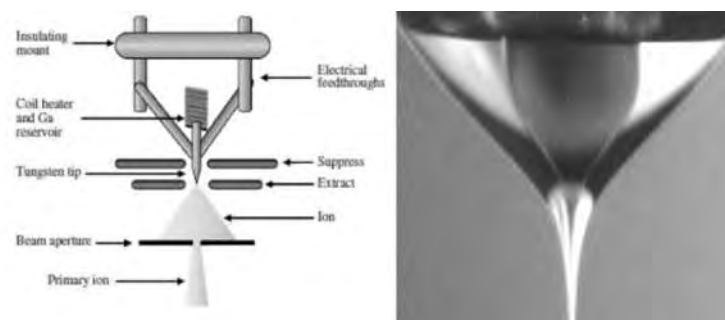


Figura 34. (a) Fuente de iones de Galio y (b) cono de Taylor.

III.4.2. Fabricación de dos estructuras fotónicas con periodicidad cuadrada

Con el propósito de aprender esta técnica de fabricación de cristales fotónicos se fabricaron dos estructuras fotónicas sobre sustratos de silicio con periodicidad cuadrada. Una de las estructuras se maquinó con orificios cuadrados de $1 \mu\text{m} \times 1 \mu\text{m}$ y una constante de red $a = 1.4 \mu\text{m}$. La segunda estructura maquinada fue un cristal fotónico con orificios circulares de $\sim 0.8 \mu\text{m}$ de diámetro y una constante de red $a = 1 \mu\text{m}$. Los parámetros de estas estructuras cristalinas se utilizaron para hacer un estudio numérico para calcular sus estructuras de bandas y su respuesta óptica. El método numérico

utilizado se describe en el capítulo IV y sus resultados correspondientes en el capítulo V.

Antes de fabricar las estructuras se caracterizó el equipo JEOL JEM-9320-FIB del Laboratorio Nacional de Nanotecnología del CIMAV. Esto, con el afán de garantizar muestras de buena calidad para la experimentación. La caracterización en el equipo FIB consistió en determinar sus capacidades de fabricación de estructuras pequeñas de orden nanométrico sobre sustratos de silicio. Es importante hacer notar que este equipo es capaz de maquinarse orificios en forma de “caja”, “líneas” y “spots” solamente. Dadas estas condiciones, fue necesario completar diversas pruebas de maquinado (ver Fig. 35) para determinar los parámetros óptimos para la fabricación de CF's en un sustrato de silicio monocristalino.

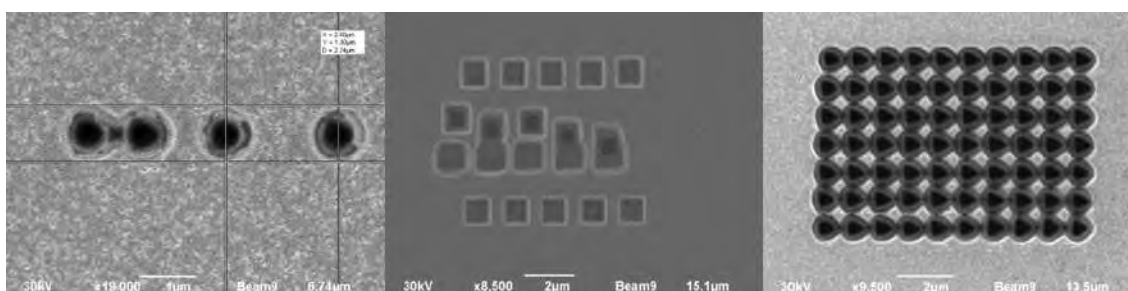


Figura 35. Micrografías de pruebas de maquinado de estructuras fotónicas en el equipo FIB.

Después de encontrar los parámetros óptimos de operación del equipo FIB, así como realizar el ajuste del eucéntrico (también conocido como ajuste z) y calibrar el haz de iones se dibujó el patrón a maquinarse y se ajustaron los parámetros para cada una de las muestras fabricadas.

Fabricación de un CF con orificios cuadrados

Se diseñó una estructura cuadrada en un sustrato de silicio como se muestra en la Fig. 36, donde se perforaron orificios cuadrados de $1 \mu\text{m} \times 1 \mu\text{m}$ con una constante de red

$a = 1.4 \mu\text{m}$ formando una red cuadrada que cubre un área aproximada de $13 \mu\text{m} \times 8 \mu\text{m}$. La profundidad de cada orificio fue de $1 \mu\text{m}$. Para lograrlo, el micro-maquinado se realizó con el haz “beam 6”. se aplicó una corriente de iones $I_p = 50 \text{ pA}$ durante ~ 50 segundos por cada orificio, una dosis de carga eléctrica por área de $2.5 \text{ nC}/\mu\text{m}^2$ y un voltaje de la columna de iones de 30 kV a una magnificación de 2000X.

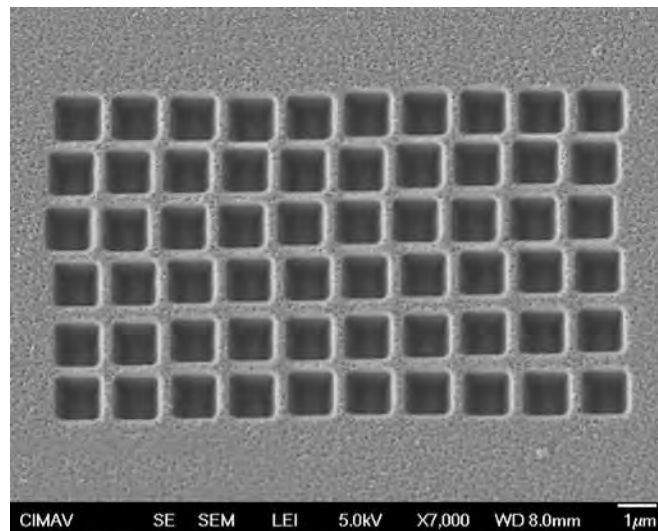


Figura 36. Micrografía de la estructura cuadrada (10×6) con orificios cuadrados de $1 \mu\text{m} \times 1 \mu\text{m}$ y parámetro de red $a = 1.4 \mu\text{m}$, construida con el método del FIB. El espesor de placa es de $\sim 1 \text{ mm}$.

El tiempo total de maquinado de este CF fue de ~ 50 min bajo las condiciones descritas anteriormente. Para reducir el tiempo de maquinado sería necesario incluir un gas de arrastre (Xu *et al.*, 2007; Cabrini *et al.*, 2005; Nellen *et al.*, 2007). Si sólo se empleara una corriente de iones mayor, ésta sólo incrementaría la redeposición de material en los orificios perforados.

Fabricación de un CF con orificios circulares

La segunda estructura maquinada fue un CF con orificios circulares de $\sim 1 \mu\text{m}$ de diámetro y una constante de red $a = 1 \mu\text{m}$. Para lograr esto fue necesario emplear el

haz “beam 4”, una corriente de iones de 1000 pA, una dosis de $200 \text{ nC}/\mu\text{m}^2$, 30 kV en la columna de iones, un tiempo de exposición del haz de 15 segundos por orificio y a una magnificación de 2000X. Esta estructura de 70 orificios circulares se fabricó aproximadamente en 18 min. Los resultados se pueden observar en las micrografías de la Fig. 37.

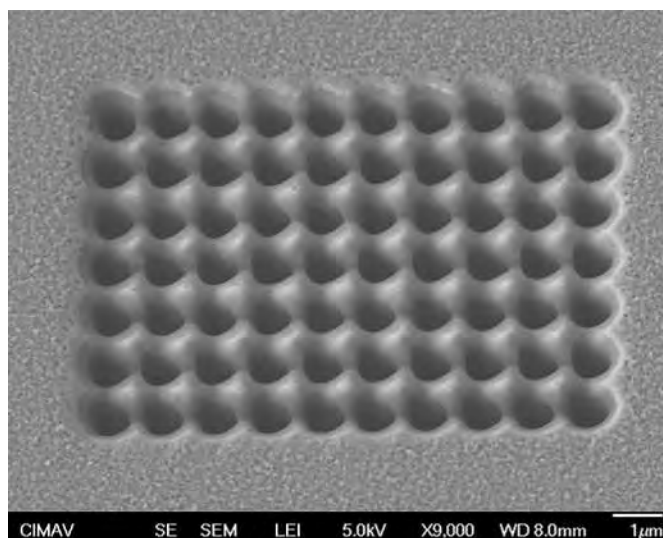


Figura 37. Micrografía de la estructura cuadrada (10×7) con orificios circulares de $0.8 \mu\text{m}$ de diámetro y parámetro de red $a = 1 \mu\text{m}$. El espesor de placa es de $\sim 1 \text{ mm}$.

Con esto se comprobó que es posible fabricar CF's en una primera aproximación a escala micrométrica con el equipo de haz enfocado de iones disponible en las instalaciones del Laboratorio Nacional de Nanotecnología en el CIMAV.

Capítulo IV

ESTUDIO NUMÉRICO

En este capítulo se presenta una breve introducción a dos métodos numéricos comúnmente utilizados para el estudio de los CF's, los cuales nos permiten realizar el cálculo de la estructura de bandas de un CF infinito y adicionalmente con el Método Integral calcular la respuesta óptica de un CF finito ya sea en 1D o en 2D.

En la actualidad, las computadoras y los métodos numéricos ofrecen una alternativa para los cálculos complicados. Al usar la potencia de la computadora se obtienen soluciones directamente, de esta manera se pueden aproximar los cálculos sin tener que recurrir a consideraciones de simplificación o a técnicas muy lentas. Aunque las soluciones analíticas aún son muy valiosas, tanto para resolver problemas como para brindar una mayor comprensión, los métodos numéricos representan opciones que aumentan, en forma considerable, la capacidad para enfrentar y resolver los problemas.

Vale la pena mencionar que la reciente evolución de computadoras personales de bajo costo ha permitido el acceso, de mucha gente, a las poderosas capacidades de cómputo. Los métodos numéricos son herramientas muy poderosas para la solución de problemas. Son capaces de manipular sistemas de ecuaciones grandes, manejar no linealidades y resolver geometrías complicadas, comunes en la práctica de la ingeniería

y, a menudo, imposibles de resolver en forma analítica (Chapra and Canale, 2007).

Debido al elevado tiempo de cómputo requerido para obtener los cálculos para el caso finito fue necesaria la utilización de la programación en paralelo bajo el protocolo CUDA, lo cual nos permitió realizar el cálculo casi 175 veces más rápido.

A continuación se presenta un breve desarrollo descriptivo de dos de los métodos numéricos más utilizados en el estudio de los CF's.

IV.1. Método de Expansión de Ondas Planas

En un principio, el desarrollo teórico orientado a la obtención de las estructuras de bandas de un cristal fotónico fue realizado por científicos especializados en el cálculo de las estructuras de bandas electrónicas, quienes se centraron en la utilización del método de ondas planas (Plihal *et al.*, 1991). Este método brevemente se describe a continuación.

IV.1.1. Cálculo de estructura de bandas para un CF1D

Comenzamos nuestro análisis planteando la ecuación de onda en 1D

$$\frac{\partial^2}{\partial z^2} E(z, \omega) + \varepsilon(z) \frac{\omega^2}{c^2} E(z, \omega) = 0. \quad (3)$$

Partiendo del supuesto de que la constante dieléctrica del material es periódica; es decir, que está formada por infinitas bases o celdas unitarias dentro de las cuales existen dos zonas claramente diferenciadas: una con constante dieléctrica ε_1 de ancho b y otra con constante dieléctrica ε_2 de ancho a . Para dicha base podemos representar entonces, sus características dieléctricas en función de la distancia sobre la coordenada z mediante una función (Archuleta-García *et al.*, 2007).

En la Fig. 38 se muestra la base o celda unitaria que esta conformada por los materiales ε_1 y ε_2 cuyos espesores son b y a , respectivamente. La longitud de la celda unitaria es $d = a + b$.

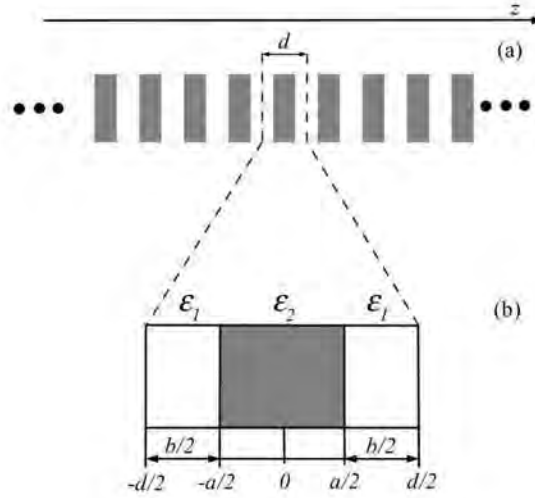


Figura 38. (a) Cristal fotónico con periodicidad unidimensional; d corresponde al ancho de la celda unitaria. (b) Celda unitaria conformada por dos materiales de constantes dieléctricas ε_1 y ε_2 .

La forma de la función dieléctrica puede expresarse matemáticamente en el intervalo $-d/2 \leq z \leq d/2$ como:

$$\varepsilon(z) = \varepsilon_1 + (\varepsilon_2 - \varepsilon_1) \Theta\left(\frac{a}{2} - |z|\right), \quad (4)$$

donde la función de Heaviside es

$$\Theta\left(\frac{a}{2} - |z|\right) = \begin{cases} 1 & |z| \leq \frac{a}{2} \\ 0 & |z| > \frac{a}{2} \end{cases} \quad (5)$$

Ya que toda función periódica puede expresarse en términos de una serie de Fourier, expresamos la función dieléctrica en la celda unitaria de la forma:

$$\varepsilon(z) = \sum_{G_z} \varepsilon(G_z) e^{iG_z z}, \quad (6)$$

donde G_z es un vector de la red recíproca y toma valores $G_z = n2\pi/d$. Para conocer los coeficientes de la serie de Fourier $\varepsilon(G_z)$, multiplicamos por $e^{-iG'_z z}$ e integramos ambos lados de la ecuación,

$$\int_{-\frac{d}{2}}^{+\frac{d}{2}} \varepsilon(z) e^{-iG'_z z} dz = \int_{-\frac{d}{2}}^{+\frac{d}{2}} \sum_{G_z} \varepsilon(G_z) e^{iG_z z} e^{-iG'_z z} dz, \quad (7)$$

cuyo resultado es

$$\varepsilon(G_z) = \frac{1}{d} \int_{-\frac{d}{2}}^{+\frac{d}{2}} \varepsilon(z) e^{-iG'_z z} dz. \quad (8)$$

Para calcular estos coeficientes primero planteamos el caso en que $G_z = 0$, sustituyendo la Ec. (4) en la Ec. (8) para obtener

$$\varepsilon(0) = \frac{1}{d} \int_{-\frac{d}{2}}^{+\frac{d}{2}} \left(\varepsilon_1 + (\varepsilon_2 - \varepsilon_1) \Theta\left(\frac{a}{2} - |z|\right) \right) dz. \quad (9)$$

Separamos los intervalos en donde la función dieléctrica permanece constante,

$$\varepsilon(0) = \frac{1}{d} \int_{-\frac{d}{2}}^{-\frac{a}{2}} \varepsilon_1 dz + \frac{1}{d} \int_{-\frac{a}{2}}^{+\frac{a}{2}} \varepsilon_2 dz + \frac{1}{d} \int_{+\frac{a}{2}}^{+\frac{d}{2}} \varepsilon_1 dz, \quad (10)$$

por lo que, el coeficiente de Fourier es

$$\varepsilon(0) = \varepsilon_1 + (\varepsilon_2 - \varepsilon_1) f, \quad (11)$$

donde la fracción de llenado se define como $f = a/d$.

Ahora consideraremos el caso cuando $G_z \neq 0$. Los coeficientes de Fourier se obtienen sustituyendo la Ec. (4) en la Ec. (8) para obtener

$$\varepsilon(G_z) = (\varepsilon_2 - \varepsilon_1) \frac{a}{d} \left(\frac{1}{\frac{G_z a}{2}} \right) \left(\frac{e^{+iG_z \frac{a}{2}} - e^{-iG_z \frac{a}{2}}}{2i} \right), \quad (12)$$

la cual se puede reducir a

$$\varepsilon(G_z) = (\varepsilon_2 - \varepsilon_1) f \operatorname{sinc} \left(\frac{G_z a}{2} \right). \quad (13)$$

Para resolver la ecuación de ondas en términos de la serie de Fourier es más conveniente expresar esta ecuación como

$$\frac{1}{\varepsilon(z)} \frac{\partial^2}{\partial z^2} E_y(z, \omega) + \frac{\omega^2}{c^2} E_y(z, \omega) = 0. \quad (14)$$

Sustituyendo las expresiones en serie de Fourier del inverso de la función dieléctrica y del campo eléctrico en la Ec. (14) y realizando las operaciones correspondientes llegamos a (Archuleta-García *et al.*, 2007)

$$\sum_{G'_z} f_{G-G'} (k_x + G')^2 E(G'_z) = \frac{\omega^2}{c^2} E(G_z). \quad (15)$$

La estrategia para resolver la ecuación de eigenvalores es plantear una ecuación matricial desarrollando el lado izquierdo de la Ec. (15). Para lograr un sistema cuadrado es necesario plantear esta ecuación para los valores entre $-N$ y N , incluyendo $N = 0$. Procediendo de esta forma obtenemos

$$\overleftrightarrow{A} \overrightarrow{X} = \lambda \overrightarrow{X}, \quad (16)$$

donde el autovalor del sistema está dado por el factor

$$\lambda = \frac{\omega^2}{c^2}. \quad (17)$$

El procedimiento para el caso de dos y tres dimensiones es análogo al caso de una dimensión.

IV.2. Método de la Ecuación Integral

El IEM que es implementado para determinar las estructuras de bandas de los CF's en 1D o en 2D se basa en la solución de la ecuación integral (Mendoza-Suárez *et al.*, 2006). Esta 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.

El método integral permite también estudiar la propagación de ondas electromagnéticas a través del sistema periódico finito, lo cual también se trata en el presente trabajo de investigación.

IV.2.1. Ecuación de onda

La descripción del siguiente método integral fue tomada de Mendoza-Suárez *et al.* (2006). Consideremos una celda unitaria cuadrada con una inclusión cilíndrica para el caso de un CF2D infinito como se muestra en la Fig. 39.

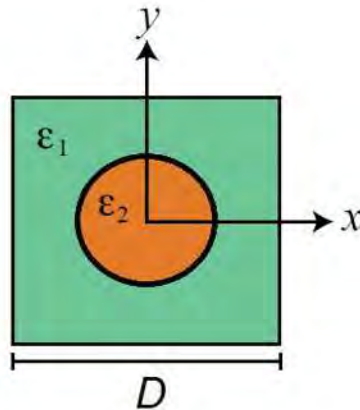


Figura 39. Celda unitaria de un CF2D con una celda cuadrada y una inclusión de forma cilíndrica de un material dieléctrico diferente.

Para iniciar con el método integral vamos a obtener la ecuación de onda para nuestros sistemas propuestos con medios sin fuentes donde $\rho = 0$ y $\mathbf{J} = 0$. Entonces las ecuaciones de Maxwell correspondientes son:

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0, \quad (18)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = 0, \quad (19)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\mu \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t}, \quad (20)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}, \quad (21)$$

y para los materiales lineales usaremos las ecuaciones constitutivas de los campos eléctrico y magnético como:

$$\mathbf{D} = \varepsilon \mathbf{E}, \quad (22)$$

$$\mathbf{B} = \mu \mathbf{H}, \quad (23)$$

donde ε es la constante dieléctrica y μ es la permeabilidad magnética, las cuales no dependen de la posición.

Aplicando el rotacional a la Ec. (20),

$$\nabla \times (\nabla \times \mathbf{E}) = \nabla \times \left(-\mu \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} \right), \quad (24)$$

$$\nabla(\nabla \cdot \mathbf{E}) - \nabla^2 \mathbf{E} = -\mu \frac{\partial}{\partial t} (\nabla \times \mathbf{H}), \quad (25)$$

que sustituyendo las Ecs. (19) y (21) en la Ec. (25), obtenemos la ecuación de onda del campo eléctrico,

$$\nabla^2 \mathbf{E} - \mu \varepsilon \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} = 0. \quad (26)$$

Similarmente para el campo magnético, obtenemos

$$\nabla^2 \mathbf{H} - \mu \varepsilon \frac{\partial^2 \mathbf{H}}{\partial t^2} = 0, \quad (27)$$

donde el producto $\mu \varepsilon = 1/v^2$ siendo v la velocidad de la onda en el medio.

Asumiendo que los campos electromagnéticos tienen una dependencia armónica del tiempo

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}(\mathbf{r}) e^{-i\omega t}, \quad (28)$$

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{H}(\mathbf{r}) e^{-i\omega t}, \quad (29)$$

la ecuación de onda se transforma como la ecuación de Helmholtz para el caso del campo eléctrico,

$$\nabla^2 \mathbf{E}(\mathbf{r}) + k^2 \mathbf{E}(\mathbf{r}) = 0, \quad (30)$$

siendo $k^2 = \mu\epsilon\omega^2$ la magnitud del vector de onda.

Dada la velocidad de la luz en el vacío $c = 1/\sqrt{\mu_0\epsilon_0}$ y el índice de refracción $n = \frac{c}{v} = \frac{\sqrt{\mu\epsilon}}{\sqrt{\mu_0\epsilon_0}}$, tenemos que la relación de dispersión es

$$k = \frac{\omega}{c}n, \quad (31)$$

para una frecuencia ω de la onda electromagnética, ϵ_0 es la constante dieléctrica y μ_0 es la permeabilidad magnética en el vacío, respectivamente. Así la ecuación de onda espacial para el campo eléctrico y magnético respectivamente será:

$$\nabla^2 \mathbf{E}(\mathbf{r}) + k^2 \mathbf{E}(\mathbf{r}) = 0 \quad (32)$$

y

$$\nabla^2 \mathbf{H}(\mathbf{r}) + k^2 \mathbf{H}(\mathbf{r}) = 0. \quad (33)$$

Las Ecs. (32) y (33) podemos expresarlas en términos de la función ψ que representa a cualquiera de los campos electromagnéticos como:

$$\nabla^2 \psi(\mathbf{r}) + k^2 \psi(\mathbf{r}) = 0. \quad (34)$$

IV.2.2. Función de Green para la ecuación de Helmholtz

Para estudiar nuestros sistemas propuestos, la ecuación de Helmholtz la podemos escribir como

$$\nabla^2 \psi^j(\mathbf{r}) + \epsilon_j \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \psi^j(\mathbf{r}) = 0, \quad (35)$$

donde $j = 1, 2, \dots$ indica el medio j -ésimo, c es la velocidad de la luz en el vacío, ϵ_j es la función dieléctrica y $\mathbf{r} = x\hat{i} + y\hat{j}$ es el vector de posición del punto de observación que

es independiente de z para el CF2D. Se ha adoptado la convención que $\psi^j(\mathbf{r})$ satisface las condiciones de frontera y de la periodicidad para cada polarización.

Para resolver la Ec. (35) consideramos una función de Green $G^j(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ para el j -ésimo medio,

$$\nabla^2 G^j(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + \varepsilon_j \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 G^j(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -4\pi\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (36)$$

donde $G^j(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ representa el propagador del campo debido a una fuente de luz puntual que emite a la frecuencia ω en la posición \mathbf{r} . La solución a la Ec. (36) está representada por la siguiente función de Green:

$$G^j(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = i\pi H_0^{(1)}\left(\sqrt{\varepsilon_j}\left(\frac{\omega}{c}\right)|\mathbf{r}, \mathbf{r}'|\right), \quad (37)$$

donde $H_0^{(1)}(\zeta)$ es la función de Hankel de primera clase y de orden cero.

IV.2.3. Representación integral de la ecuación de Helmholtz

Aplicaremos el teorema de Green a la ecuación de Helmholtz y para ello, multiplicaremos la Ec. (35) por $G^j(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ y la Ec. (36) por $-\psi^j(\mathbf{r})$ obteniendo

$$G^j(\mathbf{r}, \mathbf{r}') [\nabla^2 \psi^j(\mathbf{r}) + k_j^2 \psi^j(\mathbf{r}) = 0], \quad (38)$$

$$-\psi^j(\mathbf{r}) [\nabla^2 G^j(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + k_j^2 G^j(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -4\pi\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')], \quad (39)$$

donde $k_j = n_j \frac{\omega}{c} = \sqrt{\varepsilon_j} \left(\frac{\omega}{c}\right)$. Ahora, sumando ambas ecuaciones e integrando sobre una superficie cerrada S_j , tenemos

$$\oint_{S_j} [G^j(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \nabla^2 \psi^j(\mathbf{r}) - \psi^j(\mathbf{r}) \nabla^2 G^j(\mathbf{r}, \mathbf{r}')] da = 4\pi \oint_{S_j} \psi^j(\mathbf{r}) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') da. \quad (40)$$

Entonces, aplicando la segunda identidad de Green, la Ec. (40) se transforma en

$$\oint_{\Gamma_j} [G^j(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \nabla \psi^j(\mathbf{r}) - \psi^j(\mathbf{r}) \nabla G^j(\mathbf{r}, \mathbf{r}')] \cdot \hat{\mathbf{n}} ds = 4\pi \oint_{S_j} \psi^j(\mathbf{r}) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') da, \quad (41)$$

siendo Γ_j el contorno que limita la superficie cerrada. Como la derivada normal está definida como $\partial\psi^j/\partial n = \hat{\mathbf{n}} \cdot \nabla\psi^j(\mathbf{r})$, podemos reescribir la Ec. (41) de la forma

$$\oint_{\Gamma_j} \left[G^j(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \frac{\partial\psi^j(\mathbf{r})}{\partial n} - \psi^j(\mathbf{r}) \frac{\partial G^j(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{\partial n} \right] ds = 4\pi\psi^j(\mathbf{r}') \theta(\mathbf{r}'), \quad (42)$$

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

$$\theta(\mathbf{r}') = \begin{cases} 1 & \text{si } \mathbf{r}' \in S \\ 0 & \text{si } \mathbf{r}' \notin S \end{cases} \quad (43)$$

Usaremos la convención de que \mathbf{r} representa la posición del observador (donde se mide el campo), por lo que intercambiaremos las variables \mathbf{r} y \mathbf{r}' en la Ec. (42),

$$\oint_{\Gamma_j} \left[G^j(\mathbf{r}', \mathbf{r}) \frac{\partial\psi^j(\mathbf{r}')}{\partial n'} - \psi^j(\mathbf{r}') \frac{\partial G^j(\mathbf{r}', \mathbf{r})}{\partial n'} \right] ds' = 4\pi\psi^j(\mathbf{r}) \theta(\mathbf{r}), \quad (44)$$

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

$$\frac{\partial G^j(\mathbf{r}', \mathbf{r})}{\partial n'} = \hat{\mathbf{n}}' \cdot \nabla' G^j(\mathbf{r}', \mathbf{r}), \quad (45)$$

donde $\hat{\mathbf{n}}'$ es la normal a la superficie y \mathbf{r}' es el contorno Γ como se muestra en la Fig. 40. De forma similar para $\partial\psi^j/\partial n' = \hat{\mathbf{n}}' \cdot \nabla'\psi^j(\mathbf{r}')$.

Por lo tanto, la ecuación de Helmholtz para los campos en sistemas 1D y 2D en el punto \mathbf{r}' se puede representar mediante una ecuación integral rigurosa,

$$\frac{1}{4\pi} \oint_{\Gamma_j} \left[G^j(\mathbf{r}', \mathbf{r}) \frac{\partial\psi^j(\mathbf{r}')}{\partial n'} - \psi^j(\mathbf{r}') \frac{\partial G^j(\mathbf{r}', \mathbf{r})}{\partial n'} \right] ds' = \psi^j(\mathbf{r}) \theta(\mathbf{r}), \quad (46)$$

donde

$$G^j(\mathbf{r}', \mathbf{r}) = i\pi H_0^{(1)} \left(\sqrt{\varepsilon_j} \left(\frac{\omega}{c} \right) |\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \right), \quad (47)$$

es la función de Green en medios homogéneos. En la Ec. (46) la superficie S_j está limitada por el contorno cerrado Γ_j correspondiente y la derivada normal $\partial/\partial n'$ va hacia afuera del contorno Γ_j .

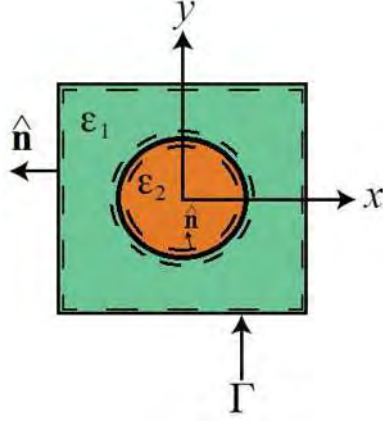


Figura 40. Celda unitaria de un CF2D con una red cuadrada y una inclusión de forma cilíndrica con su vector normal $\hat{\mathbf{n}}$ perpendicular al contorno.

IV.2.4. Discretización de las integrales

Las ecuaciones integrales que hemos obtenidos son integrales de línea cuya variable de integración es el parámetro de longitud de arco s . Debido a esto conviene representar los integrandos en términos de dicho parámetro y para hacerlo consideraremos una representación paramétrica de los puntos que forman el perfil Γ_j . Tomaremos las formas paramétricas de las coordenadas cartesianas de un punto arbitrario $(x(s), y(s))$ y de sus derivadas de primer $(x'(s), y'(s))$ y segundo $(x''(s), y''(s))$ orden, donde supondremos que todas estas funciones son continuas al menos por tramos.

En la Ec. (46) tenemos dos integrales de contorno que llamaremos

$$I_G(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi} \oint_{\Gamma} G^j(\mathbf{r}', \mathbf{r}) \frac{\partial \psi^j(\mathbf{r}')}{\partial n'} ds', \quad (48)$$

$$I_{\Psi}(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi} \oint_{\Gamma} \psi^j(\mathbf{r}') \frac{\partial G^j(\mathbf{r}', \mathbf{r})}{\partial n'} ds'. \quad (49)$$

Para resolver numéricamente las Ecs. (48) y (49) vamos a realizar una discretización, ya que en el formalismo general, las integrales no se pueden resolver de manera exacta.

Para esto dividimos el contorno Γ en n pequeños segmentos de longitud de arco Δs ,

por lo que

$$I_G(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi} \sum_n \int_{s_n - \Delta s/2}^{s_n + \Delta s/2} G^j(\mathbf{r}', \mathbf{r}) \frac{\partial \psi^j(\mathbf{r}')}{\partial n'} ds', \quad (50)$$

$$I_\Psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi} \sum_n \int_{s_n - \Delta s/2}^{s_n + \Delta s/2} \psi^j(\mathbf{r}') \frac{\partial G^j(\mathbf{r}', \mathbf{r})}{\partial n'} ds'. \quad (51)$$

Si Δs es suficientemente pequeño para un muestreo fino, entonces podemos considerar que el campo ψ^j y su derivada normal $\partial \psi^j(\mathbf{r}')/\partial n'$ son aproximadamente constantes.

Así, las funciones las podemos sacar de las integrales anteriores

$$I_G(\mathbf{r}) \approx \frac{1}{4\pi} \sum_n \phi_n^j \int_{s_n - \Delta s/2}^{s_n + \Delta s/2} G^j(\mathbf{r}', \mathbf{r}) ds', \quad (52)$$

$$I_\Psi(\mathbf{r}) \approx \frac{1}{4\pi} \sum_n \psi_n^j \int_{s_n - \Delta s/2}^{s_n + \Delta s/2} \frac{\partial G^j(\mathbf{r}', \mathbf{r})}{\partial n'} ds', \quad (53)$$

donde hemos llamado

$$\phi_n^j = \left. \frac{\partial \psi^j(\mathbf{r}')}{\partial n'} \right|_{\mathbf{r}'=\mathbf{r}'_n}, \quad (54)$$

$$\psi_n^j = \psi^j(\mathbf{r}') \Big|_{\mathbf{r}'=\mathbf{r}'_n}. \quad (55)$$

Evaluando las integrales de las Ecs. (52) y (53) en el punto de observación $\mathbf{r} = \mathbf{r}_m$, definiremos los elementos de matriz

$$L_{mn} = \frac{1}{4\pi} \int_{s_n - \Delta s/2}^{s_n + \Delta s/2} G^j(\mathbf{r}', \mathbf{r}) ds', \quad (56)$$

$$N_{mn} = \frac{1}{4\pi} \int_{s_n - \Delta s/2}^{s_n + \Delta s/2} \frac{\partial G^j(\mathbf{r}', \mathbf{r})}{\partial n'} ds', \quad (57)$$

donde el subíndice m indica el punto de observación y el subíndice n el punto de integración. Sustituyendo la Ec. (47) en las Ecs. (56) y (57) cuando Δs es muy pequeño, tenemos que

$$L_{mn} \approx \frac{i}{4} H_0^{(1)} \left(\sqrt{\varepsilon_j} \left(\frac{\omega}{c} \right) |\mathbf{r}_m - \mathbf{r}'_n| \right) \Delta s, \quad (58)$$

$$N_{mn} \approx \frac{i}{4} \hat{\mathbf{n}}_n \cdot \nabla' H_0^{(1)} \left(\sqrt{\varepsilon_j} \left(\frac{\omega}{c} \right) |\mathbf{r}_m - \mathbf{r}'_n| \right) \Delta s. \quad (59)$$

En esta última expresión, $\hat{\mathbf{n}}_n = n_x \hat{i} + n_y \hat{j}$ es la normal al contorno Γ_j en el punto de integración \mathbf{r}'_n .

Si llamamos $\mathbf{R}_{mn} = \mathbf{r}_m - \mathbf{r}'_n$ y $u_n = k_j R_{mn} = k_j \sqrt{(x_m - x'_n)^2 + (y_m - y'_n)^2}$ y expresando $\nabla' H_0^{(1)}(u)$ de la Ec. (59), tenemos que

$$\hat{\mathbf{n}}_n \cdot \nabla' H_0^{(1)}(u_n) = n_x \frac{\partial H_0^{(1)}(u_n)}{\partial x'_n} + n_y \frac{\partial H_0^{(1)}(u_n)}{\partial y'_n} \quad (60)$$

$$= \left[n_x \frac{\partial u_n}{\partial x'_n} + n_y \frac{\partial u_n}{\partial y'_n} \right] \frac{dH_0^{(1)}(u_n)}{du_n}. \quad (61)$$

Por otro lado, sabemos que

$$\frac{dH_0^{(1)}(u_n)}{du_n} = -H_1^{(1)}(u_n) \quad (62)$$

y

$$\frac{\partial u_n}{\partial x'_n} = -k_j \frac{x_m - x'_n}{R_{mn}}, \quad (63)$$

$$\frac{\partial u_n}{\partial y'_n} = -k_j \frac{y_m - y'_n}{R_{mn}}. \quad (64)$$

Entonces, sustituyendo el valor de u_n y las derivadas anteriores en la Ec. (60), obtenemos

$$\hat{\mathbf{n}}_n \cdot \nabla' H_0^{(1)}(k_j R_{mn}) = k_j \hat{\mathbf{n}}_n \cdot \frac{\mathbf{R}_{mn}}{R_{mn}} H_1^{(1)}(k_j R_{mn}). \quad (65)$$

Por lo tanto, las Ecs. (58) y (59) se pueden reescribir como

$$L_{mn} \approx \frac{i}{4} \Delta s H_0^{(1)}(k_j R_{mn}), \quad (66)$$

$$N_{mn} \approx \frac{i}{4} k_j \Delta s \hat{\mathbf{n}}_n \cdot \frac{\mathbf{R}_{mn}}{R_{mn}} H_1^{(1)}(k_j R_{mn}). \quad (67)$$

Como toda función de Green posee una singularidad en $\mathbf{r} = \mathbf{r}'$, tenemos que para nuestro caso de la función de Green en 2D, la singularidad es removible y las integrales dadas en las Ecs. (56) y (57) pueden ser calculadas si utilizamos un proceso de límite, de la siguiente manera:

$$L_{mn} = \frac{1}{4\pi} \int_{s_n - \Delta s/2}^{s_n + \Delta s/2} G^j(\mathbf{r}', \mathbf{r}) ds' = \frac{1}{4\pi} \lim_{\varsigma \rightarrow 0} \int_{s_n - \Delta s/2}^{s_n + \Delta s/2} G^j(\mathbf{r}_m + \varsigma \hat{\mathbf{n}}_m, \mathbf{r}') ds', \quad (68)$$

$$N_{mn} = \frac{1}{4\pi} \int_{s_n - \Delta s/2}^{s_n + \Delta s/2} \frac{\partial G^j(\mathbf{r}', \mathbf{r})}{\partial n'} ds' = \frac{1}{4\pi} \lim_{\varsigma \rightarrow 0} \int_{s_n - \Delta s/2}^{s_n + \Delta s/2} \frac{\partial G^j(\mathbf{r}_m + \varsigma \hat{\mathbf{n}}_m, \mathbf{r}')}{\partial n'} ds'. \quad (69)$$

Enseguida mostramos algunos detalles de cómo se procede para calcular estos elementos de matriz, L_{mn} y N_{mn} .

Elementos no diagonales

En el caso de los elementos L_{mn} y N_{mn} que están fuera de la diagonal ($m \neq n$) pueden intercambiar el orden entre el límite y la integral y aplicarse directamente el límite dentro de la integral. Además, tomando en cuenta que el intervalo de integración es suficientemente pequeño y representando la integral por una simple aproximación rectangular, obtenemos

$$L_{mn} = \frac{i\Delta s}{4} H_0^{(1)}(k_j R_{mn}), \quad (70)$$

$$N_{mn} = \frac{i\Delta s}{4} k_j \hat{\mathbf{n}}_n \cdot \frac{\mathbf{R}_{mn}}{R_{mn}} H_1^{(1)}(k_j R_{mn}). \quad (71)$$

Elementos diagonales

Para el caso de los elementos de la diagonal ($m = n$), el integrando tiene una singularidad en el punto medio del intervalo de integración, por lo que hay que integrar adecuadamente dicha singularidad. Afortunadamente, la singularidad es integrable como lo mostraremos enseguida.

En las Ecs. (68) y (69) vamos a realizar un cambio de variable, donde $s = s' - s_n$ y derivando $ds = ds'$, tenemos

$$L_{nn} = \frac{i}{4} \lim_{\varsigma \rightarrow 0} \int_{-\Delta s/2}^{\Delta s/2} H_0^{(1)}(k_j |\mathbf{r}_n + \varsigma \hat{\mathbf{n}}_n - \mathbf{r}'(s + s_n)|) ds, \quad (72)$$

$$N_{nn} = \frac{i}{4} \lim_{\varsigma \rightarrow 0} \int_{-\Delta s/2}^{\Delta s/2} \hat{\mathbf{n}}_n \cdot \nabla' H_0^{(1)}(k_j |\mathbf{r}_n + \varsigma \hat{\mathbf{n}}_n - \mathbf{r}'(s + s_n)|) ds. \quad (73)$$

La variable $\mathbf{r}'(s + s_n)$ varía alrededor del punto s_n dentro de la pequeña vecindad Δs , entonces podemos expandir este vector en serie de Taylor

$$\mathbf{r}'(s + s_n) = \mathbf{r}_n + \left. \frac{d\mathbf{r}'}{ds} \right|_{\mathbf{r}'=\mathbf{r}_n} s + \frac{1}{2} \left. \frac{d^2\mathbf{r}'}{ds^2} \right|_{\mathbf{r}'=\mathbf{r}_n} s^2 + \dots \quad (74)$$

Tenemos que el vector unitario tangente al contorno en el punto $\mathbf{r}' = \mathbf{r}_n$ está dado de la siguiente manera

$$\widehat{\mathbf{t}}_n = \left. \frac{d\mathbf{r}'}{ds} \right|_{\mathbf{r}'=\mathbf{r}_n}, \quad (75)$$

y la primera derivada del vector $\widehat{\mathbf{t}}_n$ como

$$\widehat{\mathbf{t}}_n' = \left. \frac{d^2\mathbf{r}'}{ds^2} \right|_{\mathbf{r}'=\mathbf{r}_n}. \quad (76)$$

Entonces el vector de integración \mathbf{r}' se puede reescribir en la forma

$$\mathbf{r}'(s + s_n) = \mathbf{r}_n + \widehat{\mathbf{t}}_n s + \frac{1}{2} \widehat{\mathbf{t}}_n' s^2 + \dots \quad (77)$$

Ahora considerando términos hasta primer orden de la Ec. (77) y sustituyendo en la Ec. (72), obtenemos

$$L_{nn} = \frac{i}{4} \lim_{\varsigma \rightarrow 0} \int_{-\Delta s/2}^{\Delta s/2} H_0^{(1)}(k_j |\varsigma \widehat{\mathbf{n}}_n - \widehat{\mathbf{t}}_n s|) ds. \quad (78)$$

Como

$$|\varsigma \widehat{\mathbf{n}}_n - \widehat{\mathbf{t}}_n s| = \sqrt{(\varsigma \widehat{\mathbf{n}}_n - \widehat{\mathbf{t}}_n s) \cdot (\varsigma \widehat{\mathbf{n}}_n - \widehat{\mathbf{t}}_n s)} = \sqrt{\varsigma^2 + s^2}, \quad (79)$$

y evaluando el límite de la Ec. (78), tenemos que

$$L_{nn} = \frac{i}{4} \int_{-\Delta s/2}^{\Delta s/2} H_0^{(1)}(k_j |s|) ds. \quad (80)$$

Para pequeños argumentos de la función de Hankel de primera clase y de orden cero (Arfken *et al.*, 2011),

$$H_0^{(1)}(x) \approx 1 - \frac{2}{i\pi} \ln(\gamma x), \quad (81)$$

siendo γ la constante de Euler. Sustituyendo en la Ec. (80),

$$L_{nn} = \frac{i}{4} \int_{-\Delta s/2}^{\Delta s/2} \left[1 - \frac{2}{i\pi} \ln(\gamma k_j |s|) \right] ds, \quad (82)$$

e integrando, obtenemos los elementos de matriz

$$L_{nn} = \frac{i\Delta s}{4} H_0^{(1)}\left(k_j \frac{\Delta s}{2e}\right). \quad (83)$$

Para calcular los elementos N_{nn} vamos a partir de la Ec. (65) considerando la Ec. (77) para los primeros términos,

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{n}}_n \cdot \nabla' H_0^{(1)}(k_j |\mathbf{r}_n + \varsigma \hat{\mathbf{n}}_n - \mathbf{r}'(s + s_n)|) &\cong k_j \hat{\mathbf{n}}_n \cdot \frac{\varsigma \hat{\mathbf{n}}_n - \hat{\mathbf{t}}_n s - \frac{1}{2} \hat{\mathbf{t}}_n' s^2}{|\varsigma \hat{\mathbf{n}}_n - \hat{\mathbf{t}}_n s|} \\ &\cdot H_1^{(1)}\left(k_j |\varsigma \hat{\mathbf{n}}_n - \hat{\mathbf{t}}_n s|\right) \\ &= k_j \frac{\varsigma - \frac{1}{2} \hat{\mathbf{n}}_n \cdot \hat{\mathbf{t}}_n' s^2}{|\varsigma^2 + s^2|} H_1^{(1)}(k_j |\varsigma^2 + s^2|). \end{aligned} \quad (84)$$

Ahora aplicando el resultado anterior en la Ec. (73),

$$N_{nn} = \frac{i}{4} k_j \lim_{\varsigma \rightarrow 0} \int_{-\Delta s/2}^{\Delta s/2} \frac{\varsigma - \frac{1}{2} \hat{\mathbf{n}}_n \cdot \hat{\mathbf{t}}_n' s^2}{|\varsigma^2 + s^2|} H_1^{(1)}(k_j |\varsigma^2 + s^2|) ds. \quad (86)$$

Llamando $p = \frac{1}{2} \hat{\mathbf{n}}_n \cdot \hat{\mathbf{t}}_n'$ y considerando que en el límite para pequeños argumentos, la función de Hankel de primera clase y de orden uno (Arfken *et al.*, 2011) se puede aproximar como

$$H_1^{(1)}(x) \cong \frac{2}{i\pi} \frac{1}{x}, \quad (87)$$

que sustituyendo en la Ec. (86), tenemos

$$N_{nn} = \frac{ik_j}{4} \lim_{\varsigma \rightarrow 0} \int_{-\Delta s/2}^{\Delta s/2} \frac{\varsigma - ps^2}{|\varsigma^2 + s^2|} \frac{2}{i\pi} \frac{1}{k_j |\varsigma^2 + s^2|} ds \quad (88)$$

$$= \frac{1}{2\pi} \lim_{\varsigma \rightarrow 0} \int_{-\Delta s/2}^{\Delta s/2} \frac{\varsigma - ps^2}{|\varsigma^2 + s^2|} ds = \frac{1}{2} + \frac{\Delta s}{4\pi} \hat{\mathbf{n}}_n \cdot \hat{\mathbf{t}}_n'. \quad (89)$$

Por lo tanto, las Ecs. (70), (71), (83) y (88) se pueden reescribir como

$$L_{mn}^{(j)} = \frac{i\Delta s}{4} H_0^{(1)}\left(\sqrt{\varepsilon_j} \frac{\omega}{c} R_{mn}\right) (1 - \delta_{mn}) + \left[\frac{i\Delta s}{4} H_0^{(1)}\left(\sqrt{\varepsilon_j} \frac{\omega}{c} \frac{\Delta s}{2e}\right) \right] \delta_{mn}, \quad (90)$$

$$N_{mn}^{(j)} = \frac{i\Delta s}{4} \sqrt{\varepsilon_j} \frac{\omega}{c} H_1^{(1)}(k_j R_{mn}) \hat{\mathbf{n}}_n \cdot \frac{\mathbf{R}_{mn}}{R_{mn}} (1 - \delta_{mn}) + \left[\frac{1}{2} + \frac{\Delta s}{4\pi} \hat{\mathbf{n}}_n \cdot \hat{\mathbf{t}}'_n \right] \delta_{mn}, \quad (91)$$

donde

$$\hat{\mathbf{n}}_n \cdot \mathbf{R}_{mn} = -y'(s)(x_m - x_n) + x'(s)(y_m - y_n), \quad (92)$$

$$\hat{\mathbf{n}}_n \cdot \hat{\mathbf{t}}'_n = x'(s)y''(s) - y'(s)x''(s), \quad (93)$$

$$R_{mn} = \sqrt{(x_m - x_n)^2 + (y_m - y_n)^2}. \quad (94)$$

IV.2.5. Estructura de bandas en un CF2D infinito

Ya que uno de los objetivos de esta tesis es calcular las estructuras de bandas para un CF2D, 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 cilíndrica como se muestra en la Fig. 41.

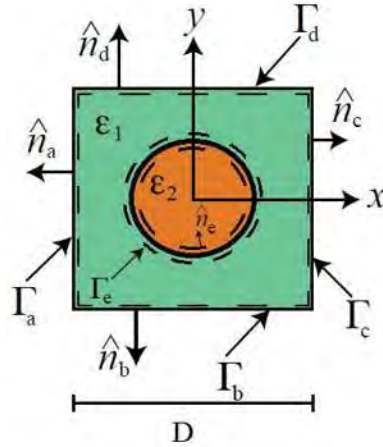


Figura 41. Celda unitaria de un CF2D con una celda cuadrada y una inclusión de forma cilíndrica de un material dieléctrico diferente, los materiales están delimitados por los contornos Γ_a , Γ_b , Γ_c , Γ_d y Γ_e cuyos vectores normales están indicados en la figura.

Aplicamos el segundo teorema integral de Green en 2D para las funciones $\psi^j(\mathbf{r}')$ y $G^j(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ para cada región correspondiente,

$$\frac{1}{4\pi} \oint_{\Gamma_j} \left[G^j(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \frac{\partial \psi^j(\mathbf{r}')}{\partial n'} - \psi^j(\mathbf{r}') \frac{\partial G^j(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{\partial n'} \right] ds' = \psi^j(\mathbf{r}) \theta(\mathbf{r}), \quad (95)$$

para 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 ψ^j y $\frac{\partial\psi^j}{\partial n}$ permitiendo que \mathbf{r} represente los vectores $\mathbf{R}_a + \varsigma\hat{\mathbf{n}}_a$, $\mathbf{R}_b + \varsigma\hat{\mathbf{n}}_b$, $\mathbf{R}_c + \varsigma\hat{\mathbf{n}}_c$, $\mathbf{R}_d + \varsigma\hat{\mathbf{n}}_d$ y $\mathbf{R}_e + \varsigma\hat{\mathbf{n}}_e$ 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 Γ_a , Γ_b , Γ_c , Γ_d y Γ_e respectivamente, ς 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 $\hat{\mathbf{n}}_e$.

Por consiguiente, la ecuación integral para la región 1 es

$$\frac{1}{4\pi} \lim_{\varsigma \rightarrow 0} \left\{ \begin{array}{l} \int_{\Gamma_a} \left[G^{(1)}(\mathbf{R}_a + \varsigma\hat{\mathbf{n}}_a, \mathbf{r}') \frac{\partial\psi^a(\mathbf{r}')}{\partial n'_a} - \frac{\partial G^{(1)}(\mathbf{R}_a + \varsigma\hat{\mathbf{n}}_a, \mathbf{r}')}{\partial n'_a} \psi^a(\mathbf{r}') \right] ds' + \\ \int_{\Gamma_b} \left[G^{(1)}(\mathbf{R}_b + \varsigma\hat{\mathbf{n}}_b, \mathbf{r}') \frac{\partial\psi^b(\mathbf{r}')}{\partial n'_b} - \frac{\partial G^{(1)}(\mathbf{R}_b + \varsigma\hat{\mathbf{n}}_b, \mathbf{r}')}{\partial n'_b} \psi^b(\mathbf{r}') \right] ds' + \\ \int_{\Gamma_c} \left[G^{(1)}(\mathbf{R}_c + \varsigma\hat{\mathbf{n}}_c, \mathbf{r}') \frac{\partial\psi^c(\mathbf{r}')}{\partial n'_c} - \frac{\partial G^{(1)}(\mathbf{R}_c + \varsigma\hat{\mathbf{n}}_c, \mathbf{r}')}{\partial n'_c} \psi^c(\mathbf{r}') \right] ds' + \\ \int_{\Gamma_d} \left[G^{(1)}(\mathbf{R}_d + \varsigma\hat{\mathbf{n}}_d, \mathbf{r}') \frac{\partial\psi^d(\mathbf{r}')}{\partial n'_d} - \frac{\partial G^{(1)}(\mathbf{R}_d + \varsigma\hat{\mathbf{n}}_d, \mathbf{r}')}{\partial n'_d} \psi^d(\mathbf{r}') \right] ds' + \\ \int_{\Gamma_e} \left[G^{(1)}(\mathbf{R}_e + \varsigma\hat{\mathbf{n}}_e, \mathbf{r}') \frac{\partial\psi^e(\mathbf{r}')}{\partial n'_e} - \frac{\partial G^{(1)}(\mathbf{R}_e + \varsigma\hat{\mathbf{n}}_e, \mathbf{r}')}{\partial n'_e} \psi^e(\mathbf{r}') \right] ds' \end{array} \right\} = 0 \quad (96)$$

y para la región 2,

$$\frac{1}{4\pi} \lim_{\varsigma \rightarrow 0} \left\{ - \int_{\Gamma_e} \left[\begin{array}{l} G^{(2)}(\mathbf{R}_e + \varsigma\hat{\mathbf{n}}_e, \mathbf{r}') \frac{\partial\psi^e(\mathbf{r}')}{\partial n'_e} - \\ \frac{\partial G^{(2)}(\mathbf{R}_e + \varsigma\hat{\mathbf{n}}_e, \mathbf{r}')}{\partial n'_e} \psi^e(\mathbf{r}') \end{array} \right] ds' \right\} = \psi^e(\mathbf{r}'). \quad (97)$$

Es necesario el límite para evitar una singularidad en la función de Green cuando su argumento es cero.

Recordando las expresiones para definir los elementos de matriz cuando $\mathbf{r} = \mathbf{r}_m$

$$\frac{1}{4\pi} \sum_n \phi_n^j \int_{S_n - \Delta s/2}^{S_n + \Delta s/2} G^j(\mathbf{r}_m, \mathbf{r}') ds' \approx \sum_{n=-\infty}^{\infty} L_{mn}^j \phi_n^j, \quad (98)$$

$$\frac{1}{4\pi} \sum_n \psi_n^j \int_{S_n - \Delta s/2}^{S_n + \Delta s/2} \frac{\partial G^j(\mathbf{r}_m, \mathbf{r}')}{\partial n'} ds' \approx \sum_{n=-\infty}^{\infty} N_{mn}^j \psi_n^j, \quad (99)$$

que haciendo la sustitución en las Ecs. (96) y (97) 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 Γ_a y así sucesivamente; $N_{abcd} = N_a + N_b + N_c + N_d$ ($N_c = N_a$, $N_d = N_b$).

Reescribiendo las ecuaciones integrales para cada región con $m = 1 + 2, \dots, N_{abcd} + N_e$,

$$\left\{ \begin{array}{l} \left[\sum_{n=1}^{N_a} N_{mn}^{(1)} \psi_a^n - \sum_{n=1}^{N_a} L_{mn}^{(1)} \phi_a^n \right] + \\ \left[\sum_{n=N_a+1}^{N_a+N_b} N_{mn}^{(1)} \psi_b^n - \sum_{n=N_a+1}^{N_a+N_b} L_{mn}^{(1)} \phi_b^n \right] + \\ \left[\sum_{n=N_a+N_b+1}^{N_{abcd}-N_d} N_{mn}^{(1)} \psi_c^n - \sum_{n=N_a+N_b+1}^{N_{abcd}-N_d} L_{mn}^{(1)} \phi_c^n \right] + \\ \left[\sum_{n=N_{abcd}-N_d+1}^{N_{abcd}} N_{mn}^{(1)} \psi_d^n - \sum_{n=N_{abcd}-N_d+1}^{N_{abcd}} L_{mn}^{(1)} \phi_d^n \right] + \\ \left[\sum_{n=N_{abcd}+1}^{N_{abcd}+N_e} N_{mn}^{(1)} \psi_e^n - \sum_{n=N_{abcd}+1}^{N_{abcd}+N_e} L_{mn}^{(1)} \phi_e^n \right] \end{array} \right\} = 0, \quad (100)$$

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

$$\sum_{n=N_{abcd}+N_e+1}^{N_{abcd}+2N_e} N_{mn}^{(2)} \psi_e^n - \sum_{n=N_{abcd}+N_e+1}^{N_{abcd}+2N_e} L_{mn}^{(2)} \phi_e^n = \psi_e^n. \quad (101)$$

Dada la geometría dada del CF2D, se tiene que en este caso las condiciones de periodicidad son:

$$\psi_c = \psi_a e^{ik_x D}, \quad (102)$$

$$\phi_c = -\phi_a e^{ik_x D}, \quad (103)$$

$$\psi_d = \psi_b e^{ik_y D}, \quad (104)$$

$$\phi_d = -\phi_b e^{ik_y D}, \quad (105)$$

donde el signo menos está presente debido a que los vectores normales a los perfiles Γ_a y Γ_c , Γ_b y Γ_d son opuestos. Además, D es la longitud de cada lado de la celda cuadrada en la dirección x y y . Por otro lado tenemos que las condiciones de frontera son:

$$\tilde{\psi}_e = \psi_e, \quad (106)$$

$$\tilde{\phi}_e = f_i \phi_e, \quad (107)$$

siendo $f_i = 1$ para polarización TE y $f_i = \frac{f_2}{f_1}$ para polarización TM.

Aplicando las condiciones de frontera y de periodicidad en las Ecs. (100) y (101)

toman la siguiente forma

$$\left\{ \begin{array}{l} \left[\sum_{n=1}^{N_a} N_{mn}^{(1)} \psi_a^n - \sum_{n=1}^{N_a} L_{mn}^{(1)} \phi_a^n \right] + \\ \left[\sum_{n=N_a+1}^{N_a+N_b} N_{mn}^{(1)} \psi_b^n - \sum_{n=N_a+1}^{N_a+N_b} L_{mn}^{(1)} \phi_b^n \right] + \\ \left[e^{ik_x D} \sum_{n=N_a+N_b+1}^{N_{abcd}-N_d} N_{mn}^{(1)} \psi_a^n - e^{ik_x D} \sum_{n=N_a+N_b+1}^{N_{abcd}-N_d} L_{mn}^{(1)} \phi_a^n \right] + \\ \left[e^{iky D} \sum_{n=N_{abcd}-N_d+1}^{N_{abcd}} N_{mn}^{(1)} \psi_b^n - e^{iky D} \sum_{n=N_{abcd}-N_d+1}^{N_{abcd}} L_{mn}^{(1)} \phi_b^n \right] + \\ \left[\sum_{n=N_{abcd}+1}^{N_{abcd}+N_e} N_{mn}^{(1)} \psi_e^n - \sum_{n=N_{abcd}+1}^{N_{abcd}+N_e} L_{mn}^{(1)} \phi_e^n \right] \end{array} \right\} = 0 \quad (108)$$

y

$$\sum_{n=N_{abcd}+N_e+1}^{N_{abcd}+2N_e} (N_{mn}^{(2)} - \delta_{mn}) \psi_e^n - \frac{f_2}{f_1} \sum_{n=N_{abcd}+N_e+1}^{N_{abcd}+2N_e} L_{mn}^{(2)} \phi_e^n = 0. \quad (109)$$

Es necesario considerar que en las últimas ecuaciones $\psi_a^n = \psi_a^{n+N_a+N_b}$ y $\phi_a^n = \phi_a^{n+N_a+N_b}$, para $n = 1, 2, \dots, N_a$. En lugar de $\psi_a^{n+N_a} = \psi_a^{n+N_a+N_b+N_c}$ y $\phi_a^{n+N_a} = \phi_a^{n+N_a+N_b+N_c}$, para $n = 1, 2, \dots, N_b$.

Estas ecuaciones determinan una matriz cuadrada M de rango $N_{abcd} + 2N_e$. Para este caso, como el sistema es homogéneo, para obtener una solución no trivial su determinante debe ser cero, lo cual nos permite definir la función determinante real como

$$D_t(k, \omega) = \ln |\det(M)|, \quad (110)$$

donde los puntos mínimos de $D_t(k, \omega)$ nos dará la relación de dispersión $\omega = \omega(k)$, que representamos por medio de la estructura de bandas.

La obtención de la estructura de bandas esta asociada a un CF infinito, sin embargo, en la realidad, un CF tiene una longitud finita por lo que a continuación se aborda el caso para un CF2D finito.

IV.2.6. Distribución del campo electromagnético en un CF2D finito

El método integral también es adecuado para calcular la distribución del campo electromagnético en las regiones cercanas y lejanas del espacio para un CF finito truncado, tal como el que se muestra en la Fig. 42.

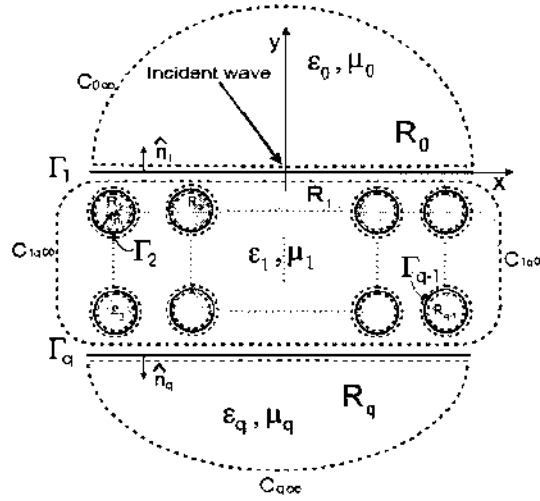


Figura 42. Esquema de un CF2D finito. Los contornos de integración se indican en curvas discontinuas. R_0 y R_q representan las regiones que encierran los medios incidente y de transmisión, respectivamente. Tomado de la Ref. Mendoza-Suárez *et al.* (2007).

Aplicando el teorema de Green a la región incidente con una onda incidente (Fig. 42), obtenemos el campo total,

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi_{inc}(\mathbf{r}) + \frac{1}{4\pi} \int_{\Gamma_1} \left[\psi_0(\mathbf{r}') \frac{\partial G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{\partial n'_1} - G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \frac{\partial \psi_0(\mathbf{r}')}{\partial n'_1} \right] ds', \quad (111)$$

donde $\psi_{inc}(\mathbf{r})$ representa el campo incidente y $G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ es la función de Green en la región R_0 .

Considerando las condiciones de contorno en el campo y su derivada normal a lo largo de los diferentes contornos Γ_p (Fig. 42), el sistema de ecuaciones para un CF2D

finito puede expresarse como:

$$\sum_{n=1}^{N_1} \left[\delta_{mn(1)} - N_{mn(1)}^{(0)} \right] \psi_{n(1)}^{(1)} + \frac{f_0}{f_1} \sum_{n=1}^{N_1} L_{mn(1)}^{(0)} \phi_{n(1)}^{(1)} = \psi_m^{inc}, \quad (112)$$

$$\left[\begin{array}{l} - \sum_{n=1}^{N_1} N_{mn(1)}^{(1)} \psi_{n(1)}^{(1)} + \sum_{n=1}^{N_1} L_{mn(1)}^{(1)} \phi_{n(1)}^{(1)} - \sum_{n=1}^{N_2} N_{mn(2)}^{(1)} \psi_{n(2)}^{(1)} + \\ \sum_{n=1}^{N_2} L_{mn(2)}^{(1)} \phi_{n(2)}^{(1)} + \dots - \sum_{n=1}^{N_q} N_{mn(q)}^{(1)} \psi_{n(q)}^{(1)} + \sum_{n=1}^{N_q} L_{mn(q)}^{(1)} \phi_{n(q)}^{(1)} \end{array} \right] = 0, \quad (113)$$

$$\sum_{n=1}^{N_2} \left[\delta_{mn(2)} - N_{mn(2)}^{(2)} \right] \psi_{n(2)}^{(1)} + \frac{f_2}{f_1} \sum_{n=1}^{N_2} L_{mn(2)}^{(2)} \phi_{n(2)}^{(1)} = 0, \quad (114)$$

$$\sum_{n=1}^{N_3} \left[\delta_{mn(3)} - N_{mn(3)}^{(2)} \right] \psi_{n(3)}^{(1)} + \frac{f_3}{f_1} \sum_{n=1}^{N_3} L_{mn(3)}^{(2)} \phi_{n(3)}^{(1)} = 0, \quad (115)$$

⋮

$$\sum_{n=1}^{N_{q-1}} \left[\delta_{mn(q-1)} - N_{mn(q-1)}^{(2)} \right] \psi_{n(q-1)}^{(1)} + \frac{f_{q-1}}{f_1} \sum_{n=1}^{N_{q-1}} L_{mn(q-1)}^{(2)} \phi_{n(q-1)}^{(1)} = 0, \quad (116)$$

$$\sum_{n=1}^{N_q} \left[\delta_{mn(q)} - N_{mn(q)}^{(3)} \right] \psi_{n(q)}^{(1)} + \frac{f_q}{f_1} \sum_{n=1}^{N_q} L_{mn(q)}^{(3)} \phi_{n(q)}^{(1)} = 0, \quad (117)$$

donde hemos aplicado las condiciones de frontera.

En este caso (véase la Fig. 42) se supone que el medio de incidencia tiene las propiedades ópticas dadas por la permeabilidad magnética μ_0 y permitividad eléctrica ε_0 , el medio que contiene las inclusiones tiene las propiedades dadas por μ_1, ε_1 , las inclusiones tienen las propiedades $\mu_2, \varepsilon_2, \mu_3, \varepsilon_3, \dots, \mu_{q-1}, \varepsilon_{q-1}$ y las propiedades del medio de transmisión están dadas por μ_q, ε_q .

Las Ecs. (112) - (117) constituyen un sistema no homogéneo de $2 \sum_{p=1}^q N_p$ ecuaciones lineales que pueden ser resueltas numéricamente para determinar los campos y su derivada normal a lo largo de todos los contornos. En consecuencia, el campo electromagnético en cualquier punto del espacio (dado por \mathbf{r}) se puede determinar con estos campos de contorno usando la Ec. (95) ó (111) en el caso de que el punto en cuestión resida dentro de la región incidente.

El campo y potencia incidente

Una vez que obtenemos las fuentes, $\psi_n^{(1)}$ y $\phi_n^{(1)}$, ahora podemos calcular el campo en cualquier punto dentro de las regiones que constituyen el sistema mediante las mismas ecuaciones integrales. Como ejemplo, mostraremos el caso de una interfaz que separa dos medios (ver Fig. 43).

Si $\mathbf{r}_m \in R_1$, con la ecuación

$$\sum_{n=1}^N L_{mn}^{(1)} \phi_n^{(1)} - \sum_{n=1}^N N_{mn}^{(1)} \psi_n^{(1)} - \psi_m^{inc(1)} = \psi_m^{(1)} \quad (118)$$

o si $\mathbf{r}_m \in R_2$, con

$$\sum_{n=1}^N L_{mn}^{(2)} \phi_n^{(2)} - \sum_{n=1}^N N_{mn}^{(2)} \psi_n^{(2)} = \psi_m^{(2)}, \quad (119)$$

podemos obtener el campo en ambas regiones.

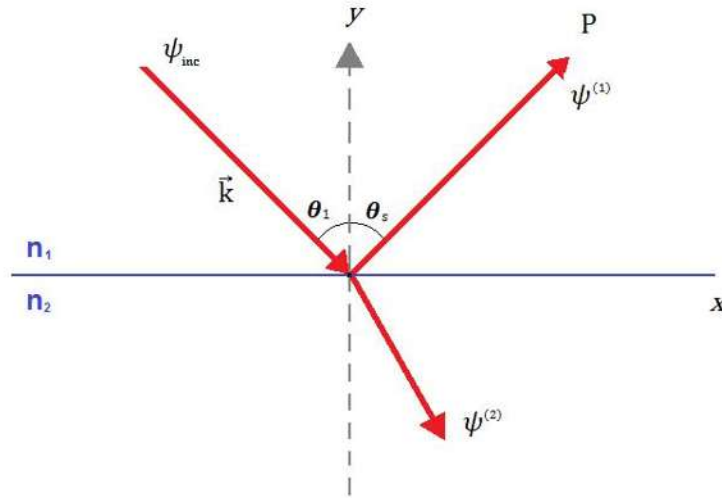


Figura 43. Campo incidente y esparcido en la región 1 (ψ^1) o en la región 2 (ψ^2).

De la Fig. 43, tenemos

$$k_{1x} = k_1 \sin \theta_1 = \frac{2\pi}{\lambda} \sin \theta_1, \quad (120)$$

$$k_{1y} = k_1 \cos \theta_1 = \frac{2\pi}{\lambda} \cos \theta_1, \quad (121)$$

entonces, el campo incidente es

$$\psi_{inc}(\mathbf{r}) = \psi_0 e^{i\frac{2\pi}{\lambda} n_1 [x \sin \theta_1 - y \cos \theta_1]} \quad (122)$$

o

$$\psi_{inc}(\mathbf{r}) = \psi_0 e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \quad (123)$$

donde ψ_0 es una constante con unidades adecuadas, \mathbf{k} es el vector de onda y \mathbf{r} la posición de cada punto sobre el cual la onda incide.

Para el campo lejano utilizaremos las expresiones

$$L_{mn} \simeq \frac{i\Delta s}{4} H_0^{(1)}(kR_{mn}) \quad (124)$$

y

$$N_{mn} \simeq \frac{ik\Delta s}{4} \hat{\mathbf{n}}_n \cdot \mathbf{R}_{mn} H_1^{(1)}(kR_{mn}), \quad (125)$$

que están definidas en las Ecs. (90) y (91), respectivamente. Aquí $\mathbf{R}_{mn} = \mathbf{r}_m - \mathbf{r}_n$ donde $\mathbf{r}_m = r_m \sin \theta_s \hat{\mathbf{i}} + r_m \cos \theta_s \hat{\mathbf{j}}$ y $\mathbf{r}_n = x_n \hat{\mathbf{i}} + y_n \hat{\mathbf{j}}$.

Tomando en cuenta que el observador \mathbf{r}_m se encuentra muy lejos del sistema, $\mathbf{r}_m \gg \mathbf{r}_n$ y $\mathbf{r}_m \gg \lambda$. Así, necesitamos una aproximación asintótica de la función de Hankel $H_0^{(1)}$ para argumentos grandes

$$H_0^{(1)}(x) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi x}} e^{-i\frac{\pi}{4}} e^{ix}, \quad (126)$$

donde $x = kR_{mn}$ y

$$\begin{aligned} R_{mn} &= \sqrt{(\mathbf{r}_m - \mathbf{r}_n) \cdot (\mathbf{r}_m - \mathbf{r}_n)} = \sqrt{\mathbf{r}_m^2 - 2\mathbf{r}_m \cdot \mathbf{r}_n + \mathbf{r}_n^2} \\ &= \mathbf{r}_m \sqrt{1 - \frac{2\mathbf{r}_m \cdot \mathbf{r}_n}{\mathbf{r}_m^2} + \frac{\mathbf{r}_n^2}{\mathbf{r}_m^2}} \approx \mathbf{r}_m \sqrt{1 - \frac{2\mathbf{r}_m \cdot \mathbf{r}_n}{\mathbf{r}_m^2}} \\ &\approx \mathbf{r}_m \left(1 - \frac{\mathbf{r}_m \cdot \mathbf{r}_n}{\mathbf{r}_m^2}\right) = \mathbf{r}_m - \frac{\mathbf{r}_m \cdot \mathbf{r}_n}{\mathbf{r}_m}. \end{aligned} \quad (127)$$

Por otro lado

$$\sqrt{R_{mn}} \approx \sqrt{\mathbf{r}_m \left(1 - \frac{\mathbf{r}_m \cdot \mathbf{r}_n}{\mathbf{r}_m^2}\right)} = \sqrt{\mathbf{r}_m} \sqrt{1 - \frac{\mathbf{r}_m \cdot \mathbf{r}_n}{\mathbf{r}_m^2}} \approx \sqrt{\mathbf{r}_m}.$$

Como $\mathbf{r}_m \cdot \mathbf{r}_n = r_m x_n \sin \theta_s + r_m y_n \cos \theta_s$ donde θ_s es el ángulo de esparcimiento de la luz. Así que, sustituyendo la Ec. (126) en la Ec. (124) tenemos

$$\begin{aligned} L_{mn} &\approx \left(\frac{i\Delta s}{4} \sqrt{\frac{2}{\pi k}} e^{-i\frac{\pi}{4}} \right) \frac{e^{ikr_m}}{\sqrt{r_m}} e^{-\frac{ik}{r_m}(r_m x_n \sin \theta_s + r_m y_n \cos \theta_s)} \\ &\approx \left(\frac{i\Delta s}{4} \sqrt{\frac{2}{\pi k}} e^{-i\frac{\pi}{4}} \right) \frac{e^{ikr_m}}{\sqrt{r_m}} e^{-ik(x_n \sin \theta_s + y_n \cos \theta_s)}. \end{aligned} \quad (128)$$

Si llamamos a

$$q = \frac{i\Delta s}{4} \sqrt{\frac{2}{\pi k}} e^{-i\frac{\pi}{4}}, \quad (129)$$

entonces,

$$L_{mn} \approx q \frac{e^{ikr_m}}{\sqrt{r_m}} e^{-ik(x_n \sin \theta_s + y_n \cos \theta_s)}. \quad (130)$$

Similarmente, para la función $H_1^{(1)}(x)$ para argumentos grandes,

$$H_1^{(1)}(x) \approx -i \sqrt{\frac{2}{\pi x}} e^{-i\frac{\pi}{4}} e^{ix} = -i H_0^{(1)}, \quad (131)$$

tenemos que

$$\hat{\mathbf{R}}_{mn} = \frac{\mathbf{R}_{mn}}{R_{mn}} \approx \frac{x_m}{r_m} \hat{i} + \frac{y_m}{r_m} \hat{j}, \quad (132)$$

donde $x_m = r_m \cos \theta_s$ y $y_m = r_m \sin \theta_s$, por lo que $\hat{\mathbf{R}}_{mn} \approx \cos \theta_s \hat{i} + \sin \theta_s \hat{j}$. Así, sustituyendo la Ec. (131) en la Ec. (125) tenemos

$$N_{mn} \approx q \frac{e^{ikr_m}}{\sqrt{r_m}} e^{-ik(x_n \sin \theta_s + y_n \cos \theta_s)} (-ik \hat{\mathbf{n}}_n \cdot \mathbf{R}_{mn}). \quad (133)$$

Por lo tanto, el campo reflejado es

$$\psi_m^{(1)} = \sum_{n=1}^N \mathcal{L}_{mn}^{(1)} \phi_n^{(1)} - \sum_{n=1}^N \mathcal{N}_{mn}^{(1)} \psi_n^{(1)}, \quad (134)$$

$$\psi_m^{(1)} = q \frac{e^{ik_1 r_m}}{\sqrt{r_m}} \sum_{n=1}^N \left[\phi_n^{(1)} + ik_1 (n_x \cos \theta_s + n_y \sin \theta_s) \psi_n^{(1)} \right] e^{-ik_1 (x_n \sin \theta_s + y_n \cos \theta_s)}, \quad (135)$$

que fue utilizando la Ec. (118). En esta expresión se omitió el término del campo incidente.

Similarmente para la región de transmisión donde $\mathbf{r}_m \in R_2$, tenemos

$$\psi_m^{(2)} = q \frac{e^{ik_2 r_m}}{\sqrt{r_m}} \sum_{n=1}^N \left[\phi_n^{(2)} + ik_2 (n_x \cos \theta_s + n_y \sin \theta_s) \psi_n^{(2)} \right] e^{-ik_2 (x_n \sin \theta_s + y_n \cos \theta_s)}. \quad (136)$$

Ahora vamos a calcular la potencia total incidente. Para ello, tenemos que la onda incidente que se propaga depende de la orientación del campo electromagnético. Primeramente consideraremos el caso de la polarización TE, cuyos campos eléctrico y magnético son

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \hat{\mathbf{k}} E_z(x, y) \quad (137)$$

y

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}) = \hat{i} H_x(x, y) + \hat{j} H_y(x, y). \quad (138)$$

Para calcular el coeficiente de reflexión diferencial, el cual representa la fracción de energía incidente sobre una superficie que es esparcida por unidad de ángulo, se necesita calcular el flujo incidente total y el flujo esparcido total. Para esto, se emplea el vector de Poynting, \mathbf{S} , que proporciona la dirección y magnitud del flujo de energía por unidad de tiempo. Empleando la notación compleja se tiene que

$$\mathbf{S} = \mathbf{E} \times \mathbf{H}^*. \quad (139)$$

El promedio temporal del vector de Poynting de una onda representa la potencia media que la onda transporta por unidad de área transversal a la propagación y se conoce como densidad de potencia o irradiancia,

$$\begin{aligned} P &= \frac{1}{2} \operatorname{Re}(\mathbf{E} \times \mathbf{H}^*) = \frac{1}{2} \operatorname{Re} \left[\hat{\mathbf{k}} E_z \times (\hat{i} H_x^* + \hat{j} H_y^*) \right] \\ &= \frac{1}{2} \operatorname{Re}(\hat{j} E_z H_x^* - \hat{i} E_z H_y^*). \end{aligned} \quad (140)$$

Como nada más nos interesa el flujo de energía a través de la interfaz, por lo que solamente contribuirá un sólo término

$$P = \frac{1}{2} \operatorname{Re}(E_z H_x^*). \quad (141)$$

Como $\frac{\partial E_z}{\partial y} = i\omega\mu H_x$, entonces

$$P = \frac{1}{2} \operatorname{Re} \left\{ E_z \left(\frac{1}{i\omega\mu_1} \frac{\partial E_z}{\partial y} \right)^* \right\}. \quad (142)$$

Si el campo incidente en la superficie es

$$E_z^{inc}(x, y) = e^{ik_1(x_n \sin \theta_1 + y_n \cos \theta_1)}, \quad (143)$$

entonces,

$$\frac{\partial E_z^{inc}}{\partial y} = -ik_1 \cos \theta_1 E_z^{inc}. \quad (144)$$

Así que

$$P^{inc} = \frac{1}{2} \operatorname{Re} \left\{ E_z^{inc} \left(\frac{-ik_1 \cos \theta_1}{i\omega\mu_1} E_z^{inc} \right)^* \right\} \quad (145)$$

$$= -\frac{k_1 \cos \theta_1}{2\omega\mu_1} |E_z^{inc}|^2. \quad (146)$$

Para obtener la potencia incidente es necesario integrar sobre un área. El haz está confinado a lo largo del plano x - y con límites de integración desde $-L/2$ hasta $L/2$. Entonces, la potencia total incidente en un área de $L_x L_z$ de la interfaz será

$$\begin{aligned} P_{total}^{inc} &= \int_{-\frac{L_x}{2}}^{\frac{L_x}{2}} \int_{-\frac{L_z}{2}}^{\frac{L_z}{2}} P^{inc} dx dz = -\frac{k_1 \cos \theta_1}{2\omega\mu_1} |E_z^{inc}|^2 L_x L_z \quad (147) \\ &= -\frac{n_1 \frac{\omega}{c} \cos \theta_1}{2\omega\mu_1} |E_z^{inc}|^2 L_x L_z \\ &= -\frac{1}{\mu_1 c} \frac{n_1}{2} \cos \theta_1 |E_z^{inc}|^2 L_x L_z. \end{aligned}$$

Si $|E_z^{inc}|^2 = 1$ entonces,

$$\begin{aligned} P_{total}^{inc} &= -\frac{1}{\mu_1 c} \frac{n_1}{2} \cos \theta_1 L_x L_z \\ &= -\eta \frac{n_1}{2} \cos \theta_1 L_x L_z, \quad (148) \end{aligned}$$

donde η es la admitancia óptica en el vacío $\eta = \sqrt{\varepsilon_0/\mu_0}$.

Para el caso de polarización TM se obtiene la misma expresión.

El campo y potencia esparcida

Si el campo esparcido tiene la forma

$$\psi_j(\mathbf{r}) = \int_{\Gamma_j} \left[L_{mn}^{(j)} \phi_n^{(j)} - N_{mn}^{(j)} \psi_n^{(j)} \right] ds', \quad (149)$$

y empleando las funciones de Hankel en el límite asintótico bajo la suposición de que $|\mathbf{r}| \gg |\mathbf{R}|$, entonces la Ec. (135) se puede reescribir como:

$$\begin{aligned} \psi_m^{(1)}(\mathbf{r}) &= \left[\frac{i}{4} \sqrt{\frac{2}{\pi k_1}} e^{-i\frac{\pi}{4}} \frac{e^{ik_1 r_m}}{\sqrt{r_m}} \right] \Delta s \cdot \\ &\sum_{n=1}^N \left[ik_1 (y'_n \sin \theta_s - x'_n \cos \theta_s) \psi_n^{(1)} - \phi_n^{(1)} \right] e^{-ik_1(x_n \sin \theta_1 + y_n \cos \theta_1)}, \end{aligned} \quad (150)$$

por lo tanto,

$$\begin{aligned} \left| \psi_m^{(1)}(\mathbf{r}) \right|^2 &= \frac{1}{8\pi k_1 r_m} \cdot \\ &\left| \Delta s \sum_{n=1}^N \left[ik_1 (y'_n \sin \theta_s - x'_n \cos \theta_s) \psi_n^{(1)} - \phi_n^{(1)} \right] e^{-ik_1(x_n \sin \theta_1 + y_n \cos \theta_1)} \right|^2. \end{aligned} \quad (151)$$

Definiendo la sección eficaz de esparcimiento de un material como

$$\sigma_R(\theta_s) = \Delta s \sum_{n=1}^N \left[ik_1 (y'_n \sin \theta_s - x'_n \cos \theta_s) \psi_n^{(1)} - \phi_n^{(1)} \right] e^{-ik_1(x_n \sin \theta_1 + y_n \cos \theta_1)}, \quad (152)$$

se puede observar que la Ec. (150) es función de dos variables independientes, \mathbf{r} y θ_s , por lo que podemos decir que

$$\mathbf{E}_s(\mathbf{r}, \theta_s) = I_s(\mathbf{r}) \sigma_s(\theta_s), \quad (153)$$

Utilizando un procedimiento similar al caso de la potencia incidente, tenemos que la potencia esparcida en reflexión está dada por

$$P_R = \int (\mathbf{E}_s \times \mathbf{H}_s) \cdot \hat{\mathbf{n}}_2 da, \quad (154)$$

donde, es posible escribir

$$\mathbf{E}_s \times \mathbf{H}_s = \frac{1}{\mu_0 c} |\mathbf{E}_s|^2 \quad (155)$$

$$= \frac{1}{\mu_0 c} |I_s|^2 |\sigma_s|^2. \quad (156)$$

Así, la potencia esparcida en reflexión se puede expresar como

$$\begin{aligned} P_R &= \frac{\eta n_1}{2} \int_s |\psi_m^{(1)}|^2 da = \frac{\eta n_1}{2} \frac{1}{8\pi k_1} \int_0^{L_z} \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \frac{1}{r_m} |\sigma_R(\theta_s)|^2 dz r_m d\theta_s \quad (157) \\ &\approx \frac{\eta n_1}{2} \frac{L_z}{8\pi k_1} \sum_{i=1}^{N_{\theta_s}} |\sigma_R(\theta_s)|^2 \Delta\theta_s. \end{aligned}$$

Dividiendo la Ec. (157) entre la Ec. (148) obtenemos la reflectancia diferencial

$$dR(\theta_s) \equiv \frac{P_R}{P^{inc}} = \frac{\frac{\eta n_1}{2} \frac{L_z}{8\pi k_1} |\sigma_R(\theta_s)|^2 d\theta_s}{\frac{\eta n_1}{2} L_x L_z \cos \theta_1} = \frac{1}{8\pi k_1 L_x \cos \theta_1} |\sigma_R(\theta_s)|^2 d\theta_s, \quad (158)$$

que integrando en el intervalo de $[-\pi/2, \pi/2]$ obtenemos la reflectancia,

$$R(\theta_s) = \int_{-\pi/2}^{\pi/2} dR(\theta_s) = \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \frac{|\sigma_R(\theta_s)|^2}{8\pi k_1 L_x \cos \theta_1} d\theta_s, \quad (159)$$

Por otro lado, la potencia esparcida en transmisión está dada por

$$P_T = \frac{\eta n_2}{2} \frac{L_z}{8\pi k_2} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} |\sigma_T(\theta_s)|^2 d\theta_s, \quad (160)$$

que análogamente nos lleva a la transmitancia diferencial $dT(\theta_s)$,

$$dT(\theta_s) \equiv \frac{P_T}{P^{inc}} = \frac{\frac{\eta n_2}{2} \frac{L_z}{8\pi k_2} |\sigma_T(\theta_s)|^2 d\theta_s}{\frac{\eta n_1}{2} L_x L_z \cos \theta_1} = \frac{n_2}{8\pi k_2 n_1 L_x \cos \theta_1} |\sigma_T(\theta_s)|^2 d\theta_s, \quad (161)$$

y que ahora integrando sobre el intervalo de $[\pi/2, -\pi/2]$, obtenemos la transmitancia como

$$T(\theta_s) = \int_{-\pi/2}^{\pi/2} dT(\theta_s) = \frac{n_2}{8\pi k_2 n_1 L_x \cos \theta_s} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} |\sigma_T(\theta_s)|^2 d\theta_s. \quad (162)$$

La conservación de la energía está dada por $R + T = 1$.

En el siguiente capítulo aplicaremos el IEM a un CF2D infinito para calcular sus estructuras de bandas fotónicas y para el caso finito la respuesta óptica como función del ángulo de incidencia.

Capítulo V

RESULTADOS

En este capítulo se muestran los resultados numéricos de las estructuras de bandas y la respuesta óptica de las estructuras fotónicas fabricadas en el CIMAV. Los cálculos se realizaron mediante la aplicación del Método de la Ecuación Integral (IEM) variando las fracciones de llenado y la geometría de la inclusión. Primeramente se muestra la estructura de bandas obtenida con el IEM para reproducir los resultados obtenidos mediante el método PWE con el objetivo de verificar el método integral. En seguida se muestran varias estructuras de bandas variando la fracción de llenado con inclusiones circulares y cuadradas para polarizaciones TE y TM. Para el caso de un CF2D truncado, se analiza primero la respuesta óptica para sistemas de una y dos interfaces, comparando el resultado numérico con el analítico. Posteriormente se muestra el cálculo numérico para sistemas con inclusiones en un medio entre dos interfaces y finalmente para un CF2D truncado con los parámetros de las muestras construidas en el CIMAV. Es importante señalar que las mediciones experimentales no se compararán con los cálculos numéricos, ya que la misma estructura cristalina se estudio de manera diferente. Es decir, en la parte experimental se realizaron mediciones considerando el sistema en tres dimensiones; mientras que para la parte numérica se realizaron los cálculos para

un sistema 2D debido a la limitante del IEM.

V.1. Verificación del IEM para sistemas infinitos

La verificación del IEM se llevó a cabo mediante el cálculo de la estructura de bandas de un sistema previamente analizado por Plihal *et al.* (1991), mediante el método PWE

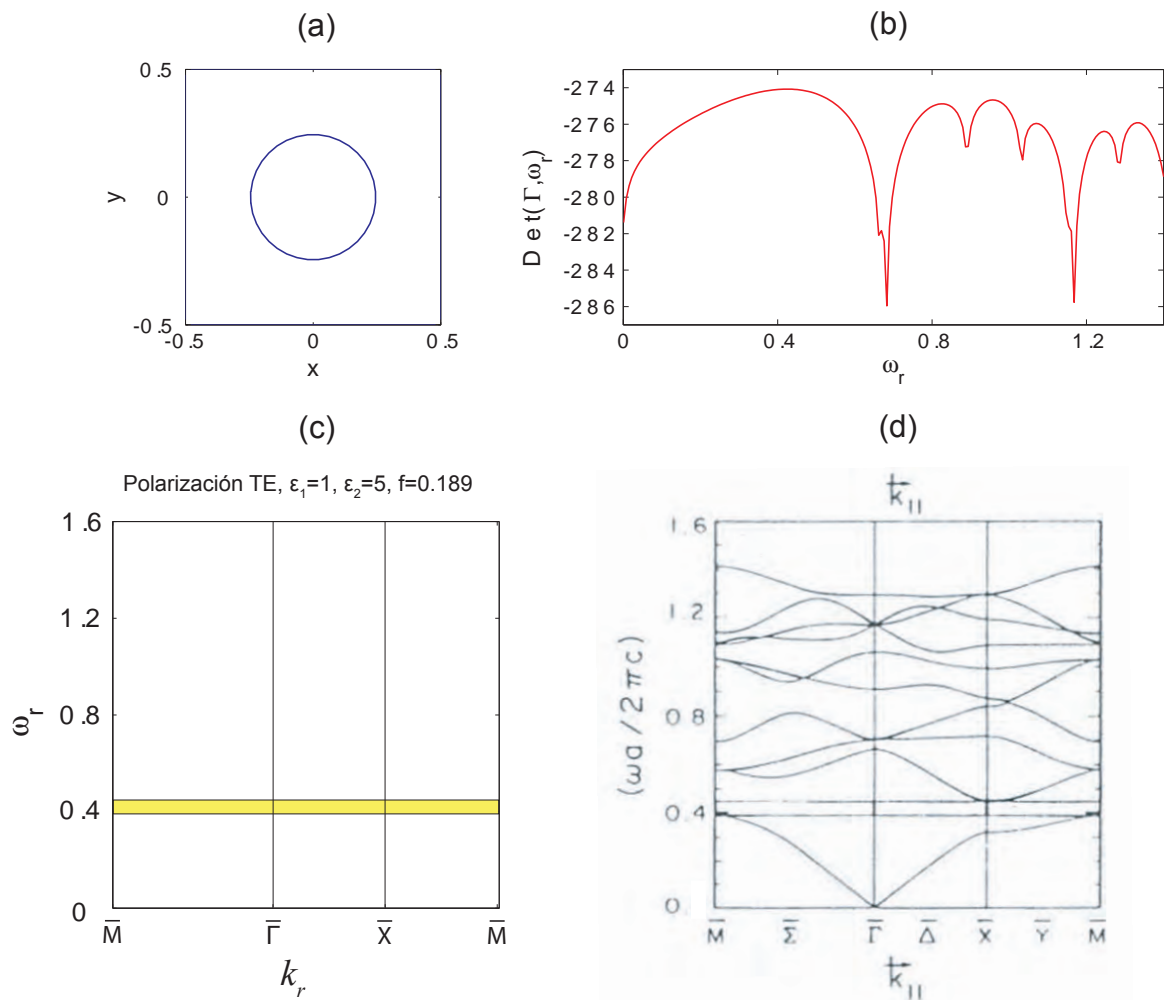


Figura 44. (a) Perfil de un CF2D con una celda unitaria cuadrada que contiene una inclusión cilíndrica circular y una fracción de llenado de $f = 0.189$. (b) Función determinante para $k = \Gamma$. Estructura de bandas de un CF2D con red cuadrada e inclusiones cilíndricas para polarización TE, $\epsilon_1 = 1$, $\epsilon_2 = 5$ y $f = 0.189$, (c) obtenida mediante el IEM y (d) tomado de la Ref. Plihal *et al.* (1991).

para un CF2D ideal (infinito) con red cuadrada e inclusiones circulares para polarización

TE, con constantes dieléctricas $\varepsilon_1 = 1$ y $\varepsilon_2 = 5$ y una fracción de llenado $f = 0.189$ (Fig. 44).

En el Cap. IV se mencionó que el IEM nos permite definir una función determinante real como $D_t(k, \omega) = \ln |\det(M)|$, donde los puntos mínimos de $D_t(k, \omega)$ nos dará la relación de dispersión $\omega = \omega(k)$, que representamos por medio de la estructura de bandas. Esto se puede observar de manera gráfica como se muestra en la Fig. 44(b). Se puede observar que los puntos mínimos de la función determinante mostrada en la Fig. 44(b), coincide con cada una de las frecuencias reducidas que aparecen para $k = \Gamma$ en la estructura de bandas correspondiente al perfil de la celda unitaria mostrada en la Fig. 44(a).

El cálculo de las estructuras de bandas (ver Fig. 44(c)) están en términos de la frecuencia reducida $\omega_r = \omega D/2\pi c$ y el vector de onda de Bloch reducido $k_r = kD/2\pi$ en la primera zona de Brillouin en el espacio recíproco. La fracción de llenado f depende del radio de la inclusión circular como $f = \pi r^2/D^2$, donde el parámetro de red fue tomado como $D = 1$.

Realizando la comparación entre los resultados de Plihal *et al.* (1991) y los obtenidos mediante el IEM se encontró un buen acuerdo como se puede observar en la Fig. 44(c) y (d). Con esto, podemos tener la certeza de que el Método de la Ecuación Integral es una herramienta numérica confiable para obtener la estructura de bandas de un CF2D.

V.2. Cálculo de la estructura de bandas

Como parte de la aplicación del IEM, presentamos las estructuras de bandas tomando en cuenta las propiedades de las estructuras fabricadas sobre sustratos de silicio con inclusiones circulares y cuadradas de aire en el CIMAV, cuyas constantes dieléctricas son $\varepsilon_1 = 13.55$ y $\varepsilon_2 = 1$ o índices de refracción $n_1 = 3.681$ y $n_2 = 1$, respectivamente.

Estos parámetros fueron utilizados para obtener estructuras de bandas para diferentes fracciones de llenado considerando ambas polarizaciones, con el fin de hacer una comparación entre estos sistemas. En la Fig. 45 se muestran las mencionadas estructuras de bandas obtenidas mediante el uso del IEM para CF2D's con inclusiones circulares, considerando ambas polarizaciones y para fracciones de llenado de $f = 0.01$, $f = 0.1$ y $f = 0.6$. Los perfiles de la celda unitaria para cada fracción de llenado están repre-

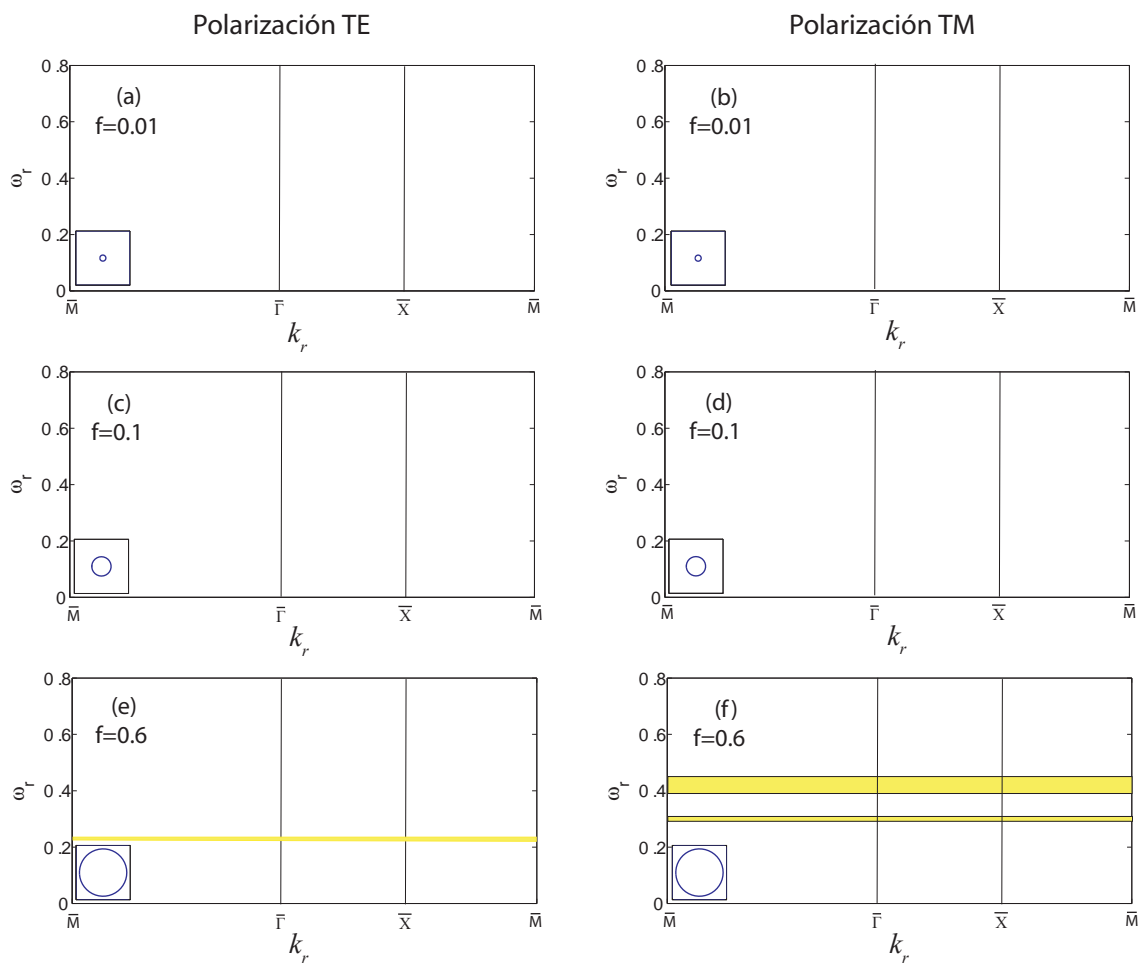


Figura 45. Estructuras de bandas de un CF2D con una celda unitaria con inclusiones circulares, formada por dos materiales dieléctricos con índices de refracción $n_1 = 3.681$ y $n_2 = 1$ para polarización TE y fracciones de llenado de (a) $f = 0.01$, (c) $f = 0.1$ y (e) $f = 0.6$, así como para polarización TM y fracciones de llenado de (b) $f = 0.01$, (d) $f = 0.1$ y (f) $f = 0.6$.

sentados en la esquina inferior izquierda de cada gráfica. La fracción de llenado de 0.6

corresponde a una de las estructuras fotónicas fabricadas en el CIMAV.

Podemos observar que en las Figs. 45(a), (b), (c), y (d) no se obtuvo ninguna banda prohibida para ambas polarizaciones. Esto quiere decir que la luz se transmitirá a través del cristal fotónico truncado para todo el intervalo de frecuencias reducidas analizado de 0 a 0.8. Por otro lado, en la Fig. 45(e) podemos observar la aparición de una banda prohibida angosta alrededor de la frecuencia reducida $\omega_r = 0.23$ para $f = 0.6$ y polarización TE. En cambio para la misma fracción de llenado y polarización TM, observamos en la Fig. 45(f) la aparición de dos bandas prohibidas, una alrededor de la frecuencia reducida $\omega_r = 0.3$ y otra en un rango más amplio de frecuencias reducidas de 0.39 a 0.45. Esto nos indica que a estas frecuencias será reflejada completamente la luz. Estos resultados nos muestran que a fracciones de llenado mayores aparecen bandas fotónicas prohibidas.

Por otro lado, también se hicieron los cálculos para el caso de inclusiones cuadradas con las mismas constantes dieléctricas o índices de refracción y fracciones de llenado de $f = 0.1$, $f = 0.3$ y $f = 0.51$. Esta última corresponde a una de las estructuras fotónicas fabricadas en el CIMAV. En este caso la fracción de llenado está dada por $f = a^2/D^2$, donde a es la longitud del cuadrado y $D = 1.4$ el parámetro de red. En la Fig. 46 se muestran los resultados para este caso.

En la Fig. 46 se puede observar que aparecen bandas fotónicas prohibidas para las fracciones de llenado de $f = 0.3$ y $f = 0.51$ para la polarización TM, siendo notorio que se incrementa el ancho de la banda fotónica prohibida al incrementar la fracción de llenado de 0.3 a 0.51. Para la polarización TM y fracción de llenado de $f = 0.3$ aparece una banda fotónica prohibida alrededor de la frecuencia reducida $\omega_r = 0.22$; mientras que para la fracción de llenado de $f = 0.51$ aparece para los intervalos de frecuencias reducidas $\omega_r \in [0.25 - 0.26]$ y $\omega_r \in [0.28 - 0.32]$.

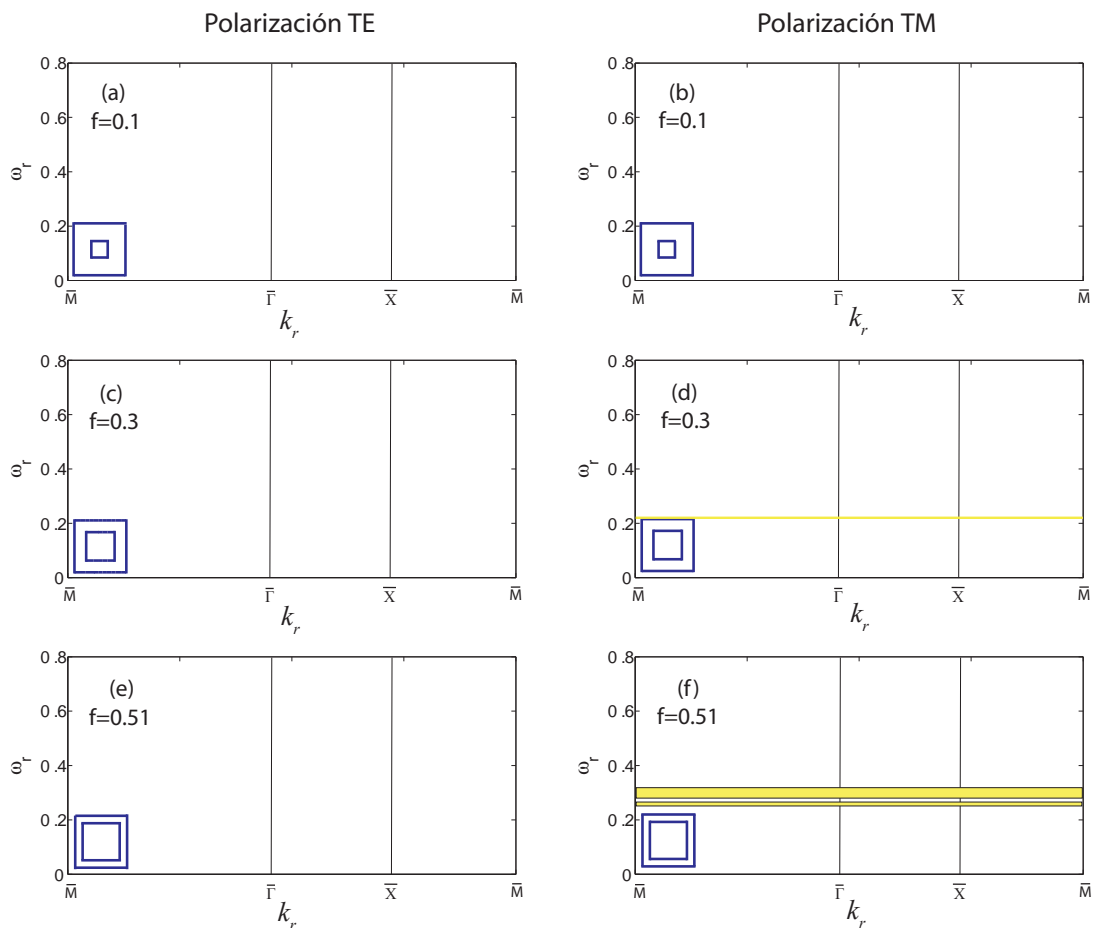


Figura 46. Estructuras de bandas de un CF2D con una celda unitaria con inclusiones cuadradas, formada por dos materiales dieléctricos con índices de refracción $n_1 = 3.681$ y $n_2 = 1$ para polarización TE y fracciones de llenado de (a) $f = 0.1$, (c) $f = 0.3$ y (e) $f = 0.51$, así como para polarización TM y fracciones de llenado de (b) $f = 0.1$, (d) $f = 0.3$ y (f) $f = 0.51$.

Los resultados mostrados anteriormente de la estructura de bandas están asociados a un CF infinito. Sin embargo, en la realidad, un CF tiene una longitud finita, por lo que vamos a calcular su respuesta óptica mediante el cálculo de la reflectancia como función del ángulo de incidencia con el IEM para el mismo sistema truncado.

V.3. Verificación del IEM para sistemas finitos

Para verificar el método integral en sistemas finitos se consideraron dos casos: el sistema de una interfaz simple entre dos medios dieléctricos y un sistema de dos interfaces entre dos medios dieléctricos.

V.3.1. Sistema de una interfaz entre dos medios dieléctricos

Tomamos como primer problema un sistema constituido por una interfaz entre dos medios dieléctricos como se muestra en la Fig. 47. Esto con el fin de comparar los resultados numéricos con resultados obtenidos analíticamente mediante las ecuaciones de Fresnel. Los resultados obtenidos para un haz de luz incidente con longitud de onda de $1 \mu\text{m}$, valores de las constantes dieléctricas $\epsilon_1 = 1$ y $\epsilon_2 = 13.55$ (correspondientes al aire y silicio respectivamente) e interfaz de longitud $l = 50 \mu\text{m}$ para una polarización TE se muestran en la Fig. 48.

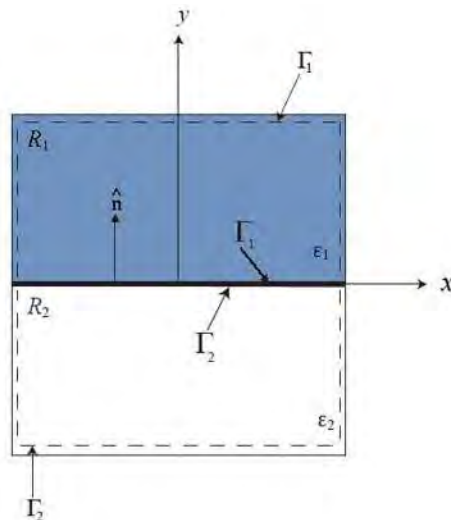


Figura 47. Interfaz simple entre dos medios materiales con constantes dieléctricas ϵ_1 y ϵ_2 .

Una vez resuelto el sistema de ecuaciones (como parte del IEM descrito en el Cap. IV), obtenemos el campo esparcido reflejado y el transmitido. Esto nos permite verificar

el método porque identificamos que se cumple la ley de reflexión y de refracción (ley de Snell). Para esto se calculan las integrales de los patrones de difracción reflejado (Fig. 48(b)) y transmitido (Fig. 48(c)) sobre un intervalo angular definido que permiten obtener la reflectancia R y transmitancia T como función del ángulo de incidencia. En la Fig. 48(d) se muestra la reflectancia R y transmitancia T para el caso analítico (líneas continuas) y numérico (líneas punteadas) respectivamente.

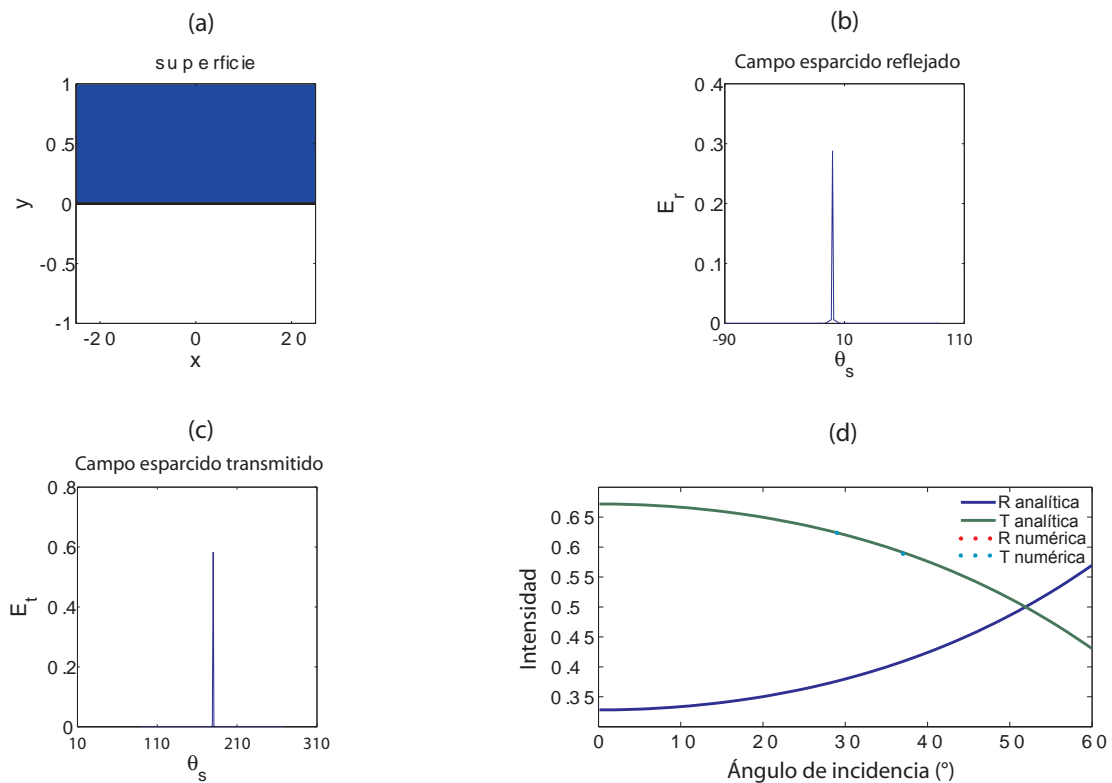


Figura 48. (a) Perfil de una interfaz entre dos medios, (b) campo esparcido en reflexión, (c) campo esparcido en transmisión, (d) Reflectancia R y Transmitancia T para una interfaz entre aire y silicio $n_1 = 1$ y $n_2 = 3.681$ para polarización TE, mediante cálculo numérico (líneas punteadas) y analítico (líneas continuas).

Claramente se puede observar que el resultado numérico se ajusta bien al caso analítico, por lo que podemos decir que el IEM también funciona para sistemas finitos. Esto nos permite estudiar sistemas más complejos, que es el objetivo de este trabajo de investigación.

V.3.2. Sistema de dos interfaces entre dos medios dieléctricos

Ahora vamos a analizar un sistema un poco más complejo para compararlo con el cálculo analítico. El sistema está mostrado en la Fig. 49 y está formado por dos interfaces entre tres medios dieléctricos con constantes dieléctricas ε_1 , ε_2 y $\varepsilon_3 = \varepsilon_1$; es decir, el tercer medio lo vamos a considerar como el primer medio. De esta manera, vamos a llamar el sistema con solamente dos medios (formado por una placa o película dieléctrica y el medio que lo rodea). Para este sistema se consideró una película con un ancho de $d = 5 \mu\text{m}$, longitud $l = 50 \mu\text{m}$ y una longitud de onda del haz incidente de $1 \mu\text{m}$. En la Fig. 50 se muestran la reflectancia y transmitancia variando el ángulo de incidencia para el caso analítico (líneas continuas) y numérico (líneas punteadas) bajo polarización TE (Fig. 50(a)) y TM (Fig. 50(b)).

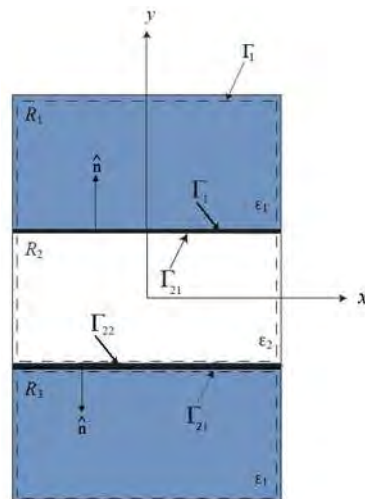


Figura 49. Sistema de dos interfaces entre tres medios materiales con constantes dieléctricas ε_1 , ε_2 y $\varepsilon_3 = \varepsilon_1$.

Como se puede observar en la Fig. 50, nuevamente el cálculo numérico mediante el método integral se ajusta a los resultados del cálculo analítico tanto para la polarización TE como la TM, por lo que nos damos cuenta que el método integral también funciona para este sistema.

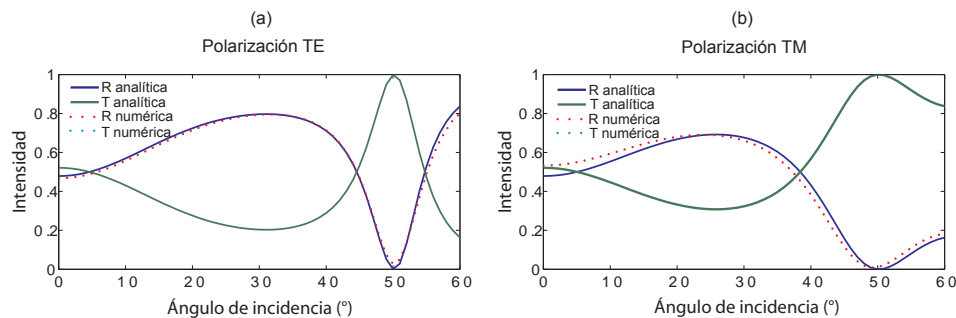


Figura 50. Reflectancia R y transmitancia T para dos interfaces entre aire y silicio ($n_1 = 1$ y $n_2 = 3.681$) para la polarización (a) TE y (b) TM, mediante el cálculo numérico (líneas punteadas) y analítico (líneas continuas).

V.4. Respuesta óptica de un CF2D

Como primera aproximación calcularemos la reflectancia y la transmitancia de un sistema similar al de dos interfaces, pero esta vez con una inclusión cilíndrica circular y cuadrada en el medio que se encuentra entre las dos interfaces. Posteriormente realizaremos el mismo cálculo con 4 inclusiones y finalmente consideraremos el caso de 70 inclusiones cilíndricas circulares como la estructura que se fabricó en el CIMAV. Para estos casos consideramos una longitud de onda del haz incidente de 632 nm.

V.4.1. Sistema con una inclusión cilíndrica circular entre dos interfaces de dos medios dieléctricos

Mediante el IEM se analizó el siguiente sistema constituido por dos interfaces con una inclusión cilíndrica entre ellas, como se muestra en la Fig. 51. Este sistema es complejo analizarlo de manera analítica, por lo que no se podrá corroborar el resultado; sin embargo, dados los resultados anteriores confiamos en la veracidad del método integral. A continuación se muestran los resultados obtenidos de la respuesta óptica para una película de silicio con un espesor $d = 7 \mu\text{m}$ y longitud $l = 14 \mu\text{m}$ con una inclusión cilíndrica circular en el centro de la película, lo cual se puede representar como un

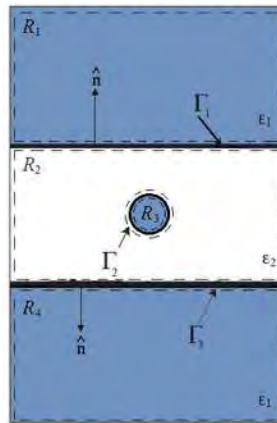


Figura 51. Sistema con una inclusión cilíndrica circular entre dos interfaces de dos medios materiales con constantes dieléctricas ε_1 y ε_2 .

sistema con dos interfaces entre aire ($\varepsilon_1 = 1$) y silicio ($\varepsilon_2 = 13.55$) con una inclusión cilíndrica circular en la región interna como se muestra en la Fig. 51. Es importante mencionar, que hemos elegido la longitud ($l = 14 \mu\text{m}$) y espesor ($d = 7 \mu\text{m}$) de la película con las cuales fue creada la estructura fotónica con 70 inclusiones; además por la limitante del recurso computacional que se requerirá para varias inclusiones. Por esta razón, no se cumple la conservación de la energía ya que se requiere una longitud de al menos de 50 micras como se mostró en la Fig. 50. En la Fig. 52 se ilustra la reflectancia y transmitancia variando el ángulo de incidencia para el caso analítico (líneas continuas) y numérico (líneas punteadas) para diferentes fracciones de llenado bajo polarización TE (Fig. 52(a)) y TM (Fig. 52(b)).

Podemos observar en la Fig. 52 que las curvas numéricas van cambiando su comportamiento en relación con el caso analítico para dos interfaces. Esto es debido a que la inclusión es dominante como se muestra para una fracción de llenado de 0.6 y polarización TE, donde se tiene que a 25 grados para el caso analítico (sin inclusión) prácticamente se refleja todo; en cambio al momento de ponerle una inclusión ya tenemos una reflectancia de alrededor del 68%.

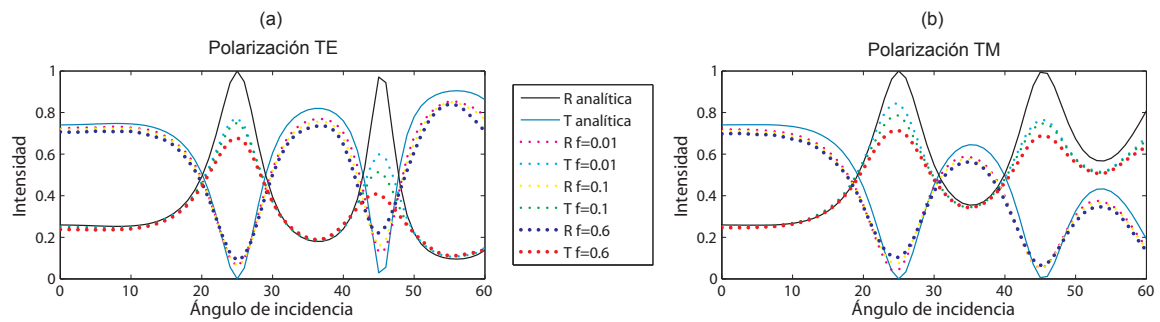


Figura 52. Reflectancia y transmitancia de una película de silicio ($n_2 = 3.681$) de espesor $d = 7 \mu\text{m}$ y longitud $l = 14 \mu\text{m}$ variando el ángulo de incidencia para el caso analítico sin inclusiones (líneas continuas) y el numérico con una inclusión (líneas punteadas) para diferentes fracciones de llenado bajo polarización (a) TE y (b) TM.

V.4.2. Sistema con cuatro inclusiones cilíndricas circulares entre dos interfaces de dos medios dieléctricos

Otro sistema analizado con las mismas características que el caso anterior es el que se muestra en la Fig. 53, en el cual ahora se incluyen 4 inclusiones cilíndricas circulares en el medio que se encuentra entre las dos interfaces.

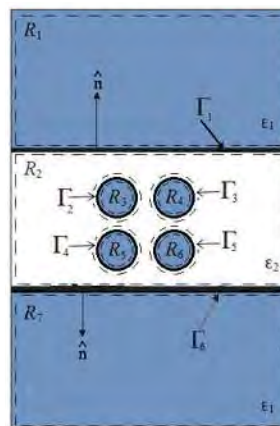


Figura 53. Sistema con cuatro inclusiones cilíndricas circulares entre dos interfaces de dos medios materiales con constantes dieléctricas ϵ_1 y ϵ_2 .

En la Fig. 54 se muestran los efectos que tienen cuatro inclusiones cilíndricas, para fracciones de llenado de $f = 0.01, 0.1$ y 0.6 en una película de silicio con índice de refracción de 3.681 , una longitud de las interfaces de $14 \mu\text{m}$ y una distancia entre las

interfaces de $7 \mu\text{m}$ para los modos TE y TM. Como se observa en la Fig. 54, también se tiene que las curvas numéricas van cambiando su comportamiento en relación con el caso analítico de dos interfaces (sin inclusiones). Esto es más claro, ya que las 4 inclusiones son dominantes como en el caso anterior.

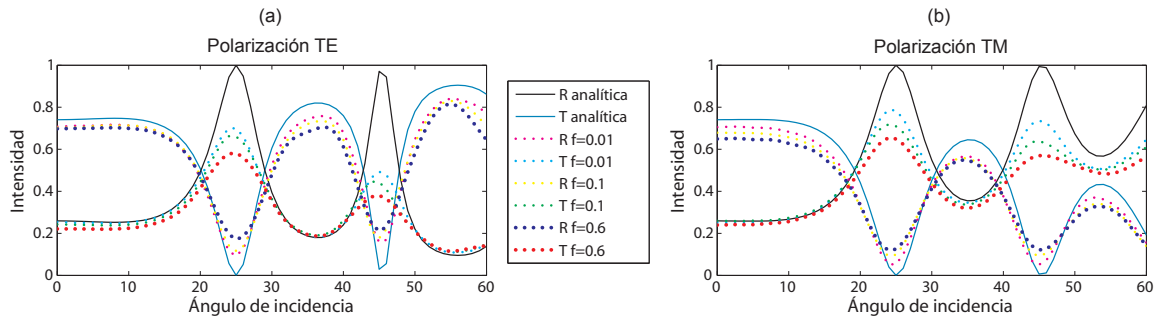


Figura 54. Reflectancia y transmitancia de una película de silicio ($n_2 = 3.681$) de espesor $d = 7 \mu\text{m}$ y longitud $l = 14 \mu\text{m}$ variando el ángulo de incidencia para el caso analítico sin inclusiones (líneas continuas) y el numérico con cuatro inclusiones (líneas punteadas) para diferentes fracciones de llenado bajo polarización (a) TE y (b) TM.

V.4.3. Sistema con setenta inclusiones cilíndricas circulares entre dos interfaces de dos medios dieléctricos

Finalmente se analizó el sistema de setenta inclusiones cilíndricas circulares entre dos interfaces, tal como una de las muestras fabricadas en el CIMAV. Los resultados numéricos de una película de silicio con espesor de $d = 7 \mu\text{m}$ y longitud $l = 14 \mu\text{m}$ se muestran en la Fig. 55.

En estos resultados podemos observar que para ambas polarizaciones obtenemos una mayor reflectancia cuanto mayor sea la fracción de llenado, como es el caso para la fracción de llenado de 0.6. Caso contrario en la transmitancia que disminuye para todas las fracciones de llenado analizadas. Podemos decir entonces que este sistema que representa un CF2D de 70 cilindros con base circular de aire con una fracción de llenado de 0.6 es un buen material reflectante.

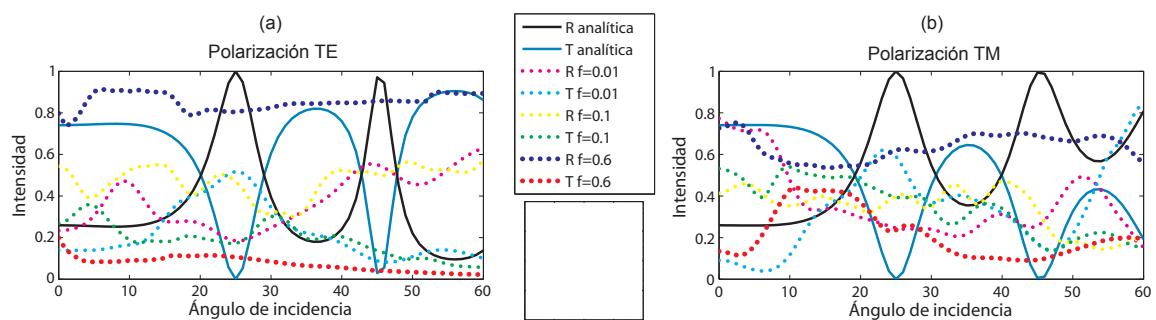


Figura 55. Reflectancia y transmitancia de una película de silicio ($n_2 = 3.681$) de espesor $d = 7 \mu\text{m}$ y longitud $l = 14 \mu\text{m}$ variando el ángulo de incidencia para el caso analítico sin inclusiones (líneas continuas) y el numérico con 70 inclusiones (líneas punteadas) para diferentes fracciones de llenado bajo polarización (a) TE y (b) TM.

Capítulo VI

CONCLUSIONES

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

En el presente trabajo mostramos la técnica del haz enfocado de iones (FIB) para la fabricación de un CF2D, con el cual se fabricaron dos estructuras fotónicas con periodicidad cuadrada sobre un sustrato de silicio. Además se realizó un estudio experimental y numérico de las propiedades reflectivas de las estructuras cristalinas con periodicidad cuadrada.

Por tanto, las conclusiones más importantes de este trabajo son las siguientes.

Basándose en los resultados obtenidos, podemos concluir que es posible fabricar CF2D's con dimensiones cercanas a las nanométricas empleando el equipo JEOL JEM9320-FIB del CIMAV. Las estructuras fotónicas que pueden obtenerse con la metodología de fabricación es bastante buena y competitiva con los cristales fotónicos reportados en la literatura reciente. Sin embargo, es importante destacar que para maquinarse orificios circulares fue necesario utilizar la modalidad de maquinado con geometría de "spot" en el FIB. Así como controlar la corriente de iones de acuerdo a la consistencia mecánica del sustrato de silicio para que el orificio resultante fuera un círculo.

Por otra parte, se realizaron mediciones de la reflectancia especular en función del ángulo de incidencia, haciendo incidir un haz de luz de forma perpendicular al plano de las inclusiones circulares y cuadradas, utilizando cuatro diferentes longitudes de onda. Fue factible llevar a cabo estas mediciones de manera que los resultados fueron reproducibles. Es importante mencionar que esta parte experimental no se puede comparar con los resultados obtenidos en el análisis numérico debido a que son sistemas diferentes. Para la parte experimental se hizo un análisis de una estructura cristalina periódica en 2D, pero debido al espesor pequeño fue tratado como un CF3D. En cambio para la parte numérica fue considerado el cristal en 2D para poder emplear el método integral desarrollado bajo una teoría escalar. Por esta razón, el CF2D fue estudiado de manera diferente al caso experimental ya que la iluminación fue en la dirección de un plano paralelo a la periodicidad del sistema.

Para la parte numérica, aplicamos un método numérico conocido como el Método de la Ecuación Integral para calcular primeramente la estructura de bandas de un CF2D formado por una celda unitaria cuadrada con inclusiones cilíndricas circulares o cuadradas, donde consideramos dos materiales dieléctricos diferentes (aire y silicio). Estas estructuras fueron analizadas para los casos de la polarización transversal eléctrico (TE) y transversal magnético (TM).

El cálculo de las estructuras de bandas para un CF2D con una celda unitaria cuadrada y con inclusiones cilíndricas circulares o cuadradas nos permite concluir, que al variar la fracción de llenado las estructuras presentan bandas prohibidas para fracciones mayores en ambas polarizaciones, pero más anchas para la polarización TM cuando se tienen inclusiones circulares. Para el caso de inclusiones cuadradas se tiene también la aparición de bandas prohibidas para la polarización TM a fracciones mayores, aunque no se obtuvieron para la polarización TE.

El método numérico también se aplicó para estudiar la respuesta óptica variando el ángulo de incidencia de un sistema de una interfaz simple entre dos medios dieléctricos diferentes, mostrando resultados equivalentes a los analíticos. Posteriormente se aplicó el método para un sistema de dos interfaces llegando a los mismos resultados que el caso analítico. Partiendo de estos resultados confiables, se aplicó el mismo método para analizar el caso finito de un CF2D.

Los resultados obtenidos para un CF2D finito muestran que para fracciones de llenado mayores se obtiene una reflectancia mayor como fue para el caso de una fracción de llenado de 0.6 para ambas polarizaciones. También se tiene que para la fracción de llenado de 0.6 ya no obtenemos reflectancias bajas para ningún ángulo de incidencia como se tuvo en el caso de una película simple de silicio. Es notable que todas las estructuras fotónicas construidas y estudiadas en este trabajo de investigación mostraron una sensibilidad significativa a la polarización de la luz incidente.

Concluimos que el Método Integral es una muy buena herramienta numérica para el estudio y análisis de las propiedades ópticas de estas estructuras fotónicas consideradas, tanto para el caso finito como para el infinito. Además de que una de las grandes ventajas que tiene el método integral en comparación con otros métodos, es que sólo toma en cuenta un número finito de puntos de muestreo a lo largo de los contornos de la celda unitaria o interfaces y de sus inclusiones, lo cual nos reduce la cantidad de recursos computacionales necesarios para el cálculo. Como trabajo futuro, se pretende generalizar el método integral para poder estudiar sistemas periódicos en 3D.

Finalmente, también es relevante mencionar que con este trabajo de investigación se obtuvieron los siguientes productos:

- Estancia de investigación en el Centro de Investigación en Materiales Avanzados (CIMA), campus Chihuahua.

- Presentación del trabajo en un congreso internacional, uno nacional y uno estatal.
- Elaboración de un artículo en extenso referente al trabajo presentado en el Congreso Estatal de Ciencia, Tecnología e Innovación. En proceso también está el artículo en extenso del congreso internacional de NANOTECH.

Referencias

- Archuleta-García, R., Manzanares-Martínez, M. B., and Manzanares-Martínez, J. (2007). Una descripción del método de ondas planas para el cálculo de bandas fotónicas. *Revista Boliviana de Física*, **13**: 79–85.
- Arfken, G. B., Weber, H. J., and Harris, F. E. (2011). *Mathematical Methods for Physicists*. Elsevier Science, seventh edition. 1220 pp.
- Blanco-Montes, A. (2001). *Cristales fotónicos ópalo-semiconductor*. Facultad de Ciencias Universidad Autónoma de Madrid. Tesis de Doctorado.
- Cabrini, S., Carpentiero, A., Kumar, R., Businaro, L., Candeloro, P., Prasciolu, M., Gosparini, A., Andreani, C., Vittorio, M. D., Stomeo, T., and Fabrizio, E. D. (2005). Focused ion beam lithography for two dimensional array structures for photonic applications. *Microelectron Eng.*, **78**: 11–15.
- Carrillo-Vázquez, V. M. (2014). *Diseño y caracterización óptica de un material fotónico fabricado mediante haz enfocado de iones*. Centro de Investigación en Materiales Avanzados. Tesis de Doctorado.
- Chapra, S. C. and Canale, R. P. (2007). *Métodos numéricos para ingenieros*. McGraw-Hill, México, quinta edition. 977 pp.
- Goyal, A. K., Dutta, H. S., Singh, S., Kaur, M., Husale, S., and Pal, S. (2016). Realization of large-scale photonic crystal cavity-based devices. *J. Micro/Nanolith*, **15**(3).
- Joannopoulos, J. D., Pierre R., V., and Shanhui, F. (1997). Photonic crystals: putting a new twist on light. *Nature*, **386**: 143–149.
- Joannopoulos, J. D., S. G. Johnson, R. D., and Meade, J. N. W. (2008). *Photonic Crystals: Molding the Flow of Light*. Princeton University Press, second edition.
- John, S. (1987). Strong localization of photons in certain disordered dielectric superlattices. *Phys. Rev. Lett.*, **58**: 2486–2489.
- Kittel, C. (2004). *Introduction to Solid State Physics*. Wiley, eighth edition. 680 pp.
- Korvink, J. G. and Greiner, A. (2002). *Semiconductors for Micro and Nanotechnology – An Introduction for Engineers*. Wiley-VCH, Germany. chapter 2 : The Crystal Lattice System.
- Krauss, T. F. and Rue, R. M. D. L. (1999). Photonic crystals in the optical regime - past, present and future. *Progress in Quantum Electronics*, **23**: 51–96.
- López, C., Blanco, A., Miguez, H., and Meseguer, F. (1999). Photonic crystals for laser action. *Optical Materials*, **13**: 187–192.

- McKelvey, J. P. (1993). *Física del estado sólido y de semiconductores*. Limusa, México, octava edition.
- Mendoza-Suárez, A. and Méndez, E. R. (1997). Light scattering by a reentrant fractal surface. *Appl. Opt.*, **36**: 3521–3531.
- Mendoza-Suárez, A., Villa-Villa, F., and 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., and 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.
- Nellen, P. M., Strasser, P., Callegari, V., Wuest, R., Erni, D., and Robin, F. (2007). Focused ion beam modifications of indium phosphide photonic crystals. *Microelectron. Eng.*, **84**: 1244–1247.
- Padilla-Salas, L. A. and Arzate-Plata, N. (2014). Cristales fotónicos. *Artículos de divulgación, Academia Mexicana de Óptica, A. C.*
- Plihal, M., Shamrock, A., Maradudin, A., and Sheng, P. (1991). Two-dimensional photonic band structures. *Opt. Commun*, **80**: 199–204.
- Prather, D. W., Shi, S., Sharkawy, A., Murakowski, J., and Schneider, G. J. (2009). *Photonic Crystals: Theory, Applications, and Fabrication*. John Wiley and Sons, Inc.
- Purcell, E. M., Torrey, H. C., , and Pound, R. V. (1946). Resonance absorption by nuclear magnetic moments in a solid. *Phys. Rev.*, **69**(37): 37–38.
- Rayleigh, J. W. S. (1887). On the maintenance of vibrations by forces of double frequency, and on the propagation of waves through a medium endowed with periodic structure. *Philosophical Magazine and Journal of Science*, pp 24, 147, 145–159.
- Sakoda, K. (2001). *Optical Properties of Photonic Crystals*. Springer-Verlag, Berlin Heidelberg.
- Sukhoivanov, I. A. and Guryev, I. V. (2009). *Photonic Crystals: Physics and Practical Modeling*. Springer. 242 pp.
- Wilder, K., Quate, C. F., Singh, B., and Kyser, D. F. (1998). Electron beam and scanning probe lithography: A comparison. *Journal of Vacuum Science and Technology B*, **16**: 3864.
- Xu, X., Chen, H., Xiong, Z., and Zhang, D. (2007). Fabrication of photonic crystals on several kinds of semiconductor materials by using focused-ion beam method. *Thin Solid Films*, **515**: 8297–8300.

- Yablonovitch, E. (1987). Inhibited spontaneous emission in solid-state physics and electronics. *Phys. Rev. Lett.*, **58**: 2059–2062.
- Yee, K. (1966). Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell's equations in isotropic media. *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, **14**(3): 302–307.