



UNIVERSIDAD MICHOACANA DE SAN NICOLÁS DE HIDALGO

FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICO MATEMÁTICAS

“Mat. Luis Manuel Rivera Gutiérrez”

**ESTUDIO NUMÉRICO Y EXPERIMENTAL DE ESTRUCTURAS
FOTÓNICAS EN 1D Y 2D**

TESIS

Que para obtener el grado de

DOCTOR EN CIENCIAS EN INGENIERÍA FÍSICA

PRESENTA:

LUIS EDUARDO PUENTE DÍAZ

DIRECTORES DE TESIS:

Doctor en Ciencias en Óptica
HÉCTOR PÉREZ AGUILAR

Doctor en Ciencias (Física)
WOLF LUIS MOCHÁN BACKAL

EN COLABORACIÓN DE LA:
Doctora en Ciencias de Materiales
VIVECHANA AGARWAL

Morelia, Michoacán, Agosto de 2023

RESUMEN

Presentamos un estudio teórico-numérico-experimental de la propagación de ondas en sistemas, cuyas propiedades son moduladas a lo largo de una y dos dimensiones. Se desarrolló el *Método de la Matriz de Transferencia* convencional para obtener el espectro de reflectancia de estructuras dieléctricas multicapas de silicio poroso (SP), alternando películas de alta y baja porosidad relativa. Este método se vuelve inestable al considerar estructuras multicapas de SP grandes. Exploramos dos alternativas para superar el problema de inestabilidad: el uso de una *matriz total* y una expansión en los modos de Bloch de un sistema artificialmente repetido. Aplicamos ambos para calcular los espectros de reflectancia: el primero, permitió un análisis del campo dentro de las capas; el segundo resultó ser mucho más eficiente computacionalmente, permitiendo obtener cálculos rápidos, estables y precisos, proporcionando así, un método ideal para el diseño y optimización de grandes estructuras multicapas. De esta manera se diseñaron superredes que presentan una banda omnidireccional de alta reflectividad con un ancho de banda grande. Experimentalmente, se fabricaron y caracterizaron estos sistemas multicapas. La síntesis fue realizada, mediante grabado anódico de una oblea de Si cristalina. Con un espectrofotómetro UV/Visible, se midió la reflectancia para diferentes ángulos de incidencia, comparándose los resultados numéricos y experimentales obtenidos.

Asimismo, estudiamos la propagación de ondas en 2D a través de dos métodos numéricos: el *Método de la Ecuación Integral* (MEI) y un enfoque original, basado en la recursividad de Haydock. Con el primero, obtuvimos las estructuras de bandas de un cristal fotónico bidimensional (CF 2D) infinito y la reflectancia de un CF 2D finito. Respecto al segundo, obtuvimos la respuesta dieléctrica macroscópica de estos sistemas periódicos binarios, analizando los casos no retardado y con retardamiento. Al considerar retardamiento y al analizar los polos de la función de Green macroscópica, estudiamos las estructuras de bandas fotónicas.

Palabras clave: Modos de Bloch, Matriz de Transferencia, Recursividad de Haydock, Silicio Poroso, Espejos Omnidireccionales.

ABSTRACT

We present a theoretical-numerical-experimental study of wave propagation in systems whose properties are modulated along one and two dimensions. The standard *transfer matrix method* was developed to obtain the reflectance spectrum of porous silicon (PS) dielectric structures, alternating films of high and low relative porosity. This method becomes unstable when large PS multilayer structures are considered. We have explored two alternatives to overcome the instability problem: the use of a *total matrix* and an expansion in the Bloch modes of an artificially repeated system. We applied both methods to calculate the reflectance spectra: the first, allowed us to analyze the field within all the layers; the second one turned out to be computationally much more efficient, allowing to obtain fast, stable and precise calculations, thus providing an ideal method for the design and optimization of large multilayer structures. In this way, superstructures that present a highly reflective omni-directional reflection band with a large bandwidth were designed. Experimentally, these multilayer systems were fabricated and characterized. The synthesis was carried out by anodic etching of a crystalline Si wafer. We used a UV/Visible spectrophotometer to measure the wavelength and angle of incidence dependent reflectance and we compared the numerical and experimental results.

In addition, the numerical study of wave propagation in 2D was carried out through two numerical methods: the *Integral Equation Method* (IEM) and an original approach, which is based on Haydock recursion. With the first method, we obtained the band structures of an infinite two-dimensional photonic crystal (2D PC) and the reflectance of a finite 2D PC. Regarding the second method, we obtained the macroscopic dielectric response of these binary periodic systems, analyzing the non-retarded and retarded cases. By considering retardation in our systems and by analyzing the poles of the macroscopic Green's function, we study the photonic band structures.

Keywords: Bloch modes, Transfer matrix, Haydock recursion, Porous silicon, Omnidirectional mirrors.

Dedicatorias

Mi dedicación especial en el presente trabajo de tesis está dirigida a mis padres Ofelia Díaz Pérez y Alfredo Puente Medina, por haberme dado el regalo de la vida, por darme todo el amor, todo el cariño y toda su comprensión en todo momento de mi vida. Por todos los valores que han sembrado en mí, por sus enseñanzas que me han permitido ser la persona que soy y que me motivan a ser cada día, alguien mejor.

A mi compañera de vida, por estar a mi lado y darme su amor sincero. Por apoyarme y estar a mi lado en los momentos y circunstancias difíciles de mi vida. Por darme siempre una palabra de aliento para enfrentarlos y motivarme para dar lo mejor de mí.

A mis tíos: Alicia Díaz Pérez, José Díaz Pérez y M. Ernesto Soria Marín, los cuales han sido como unos segundos padres y a los cuales agradezco cada consejo, cada palabra de aliento, cada lección de vida dada y sobre todo agradezco enormemente todo el cariño brindado, el cual ha sido invaluable para mí. Gracias por apoyarme y motivarme a dar siempre lo mejor de mí.

Agradezco enormemente el cariño puro y sincero de mis primos, los cuales han sido una parte importante de mi vida, muy especialmente a José Carlos Díaz Cortés.

Afectuosamente:

Luis Eduardo Puente Díaz

Agradecimientos

El presente trabajo fue posible llevarlo a cabo gracias al arduo apoyo y la incansable paciencia de los Drs. Héctor Pérez Aguilar y Wolf Luis Mochán Backal, con cuyos conocimientos, experiencia, correcciones y aportaciones dedicadas a la realización de esta tesis, se llegó hasta la meta; es por ello que les doy mi más sincero agradecimiento.

Agradezco el apoyo otorgado por CONACyT, mediante una beca de estudios de doctorado, mediante el proyecto A-S1-30393 y el apoyo otorgado por DGAPA-UNAM mediante los proyectos IN111119 e IN109822.

Agradezco en forma especial la colaboración de la Dra. Vivechana Agarwal por brindarme su apoyo, enseñarme y permitirme trabajar en su laboratorio en el CIICAp (UAEM) en el cual, se me permitió usar sus equipos y sus materiales para llevar acabo la fabricación de las estructuras multicapas de SP que se presentan en este trabajo.

Agradezco a mi compañero de trabajo Victor Castillo por la colaboración brindada en los temas en común que trabajamos juntos, así como en las lecciones de vida que nos tocó compartir y de las cuales aprendí.

Agradezco a las instituciones de educación CIICAp (UAEM), ICF (UNAM) y FCFM (UMSNH) por brindarme un espacio de trabajo en sus instalaciones y permitirme usar sus equipos y sus materiales para desarrollar mi proyecto de investigación. Así como al personal de cada institución que facilitaron mi estancia en estas y a los compañeros de trabajo que enriquecieron académicamente mi estancia.

Agradezco la amabilidad y disposición de las personas que integran los equipos de trabajo de la Dra. Vivechana Agarwal y del Dr. Wolf Luis Mochán Backal ya que tuve el privilegio de conocer, convivir y aprender de ellos; muy especialmente agradezco al Dr. Guillermo Ortiz, que amablemente discutió en varias ocasiones parte del contenido

de este trabajo y el cual enriqueció con su conocimiento y experiencia.

Agradezco a mis amigos y compañeros de posgrado: José Eduardo Medina Magallón y Sergio Sánchez López por todos los momentos tanto personales como profesionales que hemos compartido a lo largo de este proceso y con los cuales desarrollé un vínculo invaluable como es la amistad sincera y de los cuales he aprendido valiosas lecciones de vida.

Agradezco a los integrantes de mi comité tutorial evaluador, quienes hicieron correcciones y observaciones a mi trabajo de tesis; me refiero a la Dra. MaryCarmen y Monserrat Peña Gomar y al Dr. Francisco Domínguez Mota, quienes cordialmente aceptaron colaborar para la revisión de dicho trabajo y llegar hasta su objetivo final.

Agradezco a todos y cada uno de los catedráticos en el transcurso del doctorado, quienes pusieron su mejor empeño para que un servidor tuviera los conocimientos necesarios de cada una de las materias que ellos impartían.

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

Sinceramente:

Luis Eduardo Puente Díaz

Contenido

	Página
Resumen	i
Abstract	ii
Dedicatoria	iii
Agradecimientos	iv
Contenido	vi
Lista de Figuras	viii
Índice de abreviaturas	xi
I. INTRODUCCIÓN	1
I.1. Estructura de la tesis	10
II. CONCEPTOS GENERALES	14
II.1. Cristales Fotónicos	14
II.2. Metamateriales con IRN	17
II.2.1. Construcción del primer LHM y verificación experimental de refracción negativa	20
II.3. CFs 1D formados de multicapas de SP	23
II.3.1. Proceso de fabricación del SP	27
II.3.2. Teoría de medio efectivo	30
III. Método de la Matriz de Transferencia	36
III.1. Método convencional	37
III.2. Uso de la matriz extendida o completa	39
III.3. Método alternativo: expansión en los modos de Bloch de un sistema artificialmente repetido	43
III.4. Resultados	49
III.4.1. Diseño de superredes mediante un perfil continuo	50
III.4.2. Diseño de superredes mediante el apilamiento de reflectores	58
IV. Método de la Ecuación Integral	64
IV.1. Descripción teórica	64
IV.2. CF 2D infinito	66
IV.3. CF 2D finito	82
IV.4. Resultados	90

Contenido (continuación)

	Página
IV.4.1. CF 2D infinito	90
IV.4.2. CF 2D finito	98
V. Respuesta macroscópica: esquema recursivo de Haydock	103
V.1. Caso no retardado	103
V.1.1. Método recursivo de Haydock	109
V.2. Caso con retardamiento	114
V.3. Resultados	126
V.3.1. Caso no retardado	127
V.3.2. Caso con retardamiento	132
VI. Conclusiones	145
VI.1. Trabajo futuro	151
REFERENCIAS	152

Lista de Figuras

Figura		Página
1	Estructuras cristalinas fotónicas en 1D (laminado), 2D (hexagonal) y 3D (bcc) con su correspondiente zona de Brillouin.	16
2	Refracción en la superficie de un medio ordinario y de un LHM.	18
3	Refracción negativa en un LHM 2D en forma de cuña.	22
4	Proceso de reacción para el ataque electroquímico de Si en soluciones de HF.	25
5	Densidad de corriente como función del tiempo de aplicación para la fabricación de estructuras multicapas de SP.	28
6	Proceso de fabricación del SP.	29
7	Diagrama para explicar el modelo de Bruggeman	31
8	Geometría de un sistema multicapas sobre un sustrato iluminado desde un ambiente.	37
9	Propagación de ondas en un medio multicapas y propagación de ondas de Bloch en un medio periódico truncado.	45
10	Elementos de la matriz y determinante de la matriz de transferencia $\mathbf{M}$ y la matriz de transferencia reconstruida $\tilde{\mathbf{M}}$ para un espejo de Bragg formado por dos capas alternas.	47
11	Espectros de reflectancia de una estructura de 101 pares de capas de SP vs. el ángulo de incidencia y longitud de onda utilizando varios métodos.	50
12	Magnitud al cuadrado del campo eléctrico para la polarización TE en función de la profundidad.	53
13	Magnitud al cuadrado del campo magnético en función de la profundidad para polarización TM.	54
14	Espectros de reflectancia en función de la longitud de onda y el ángulo de incidencia obtenidos para polarizaciones TE, TM y para luz no polarizada, utilizando la expansión de Bloch para una estructura adelgazada.	55
15	Espectros de reflectancia experimentales y teóricos a diversos ángulos y micrografía de la estructura fotónica correspondiente.	56

Lista de Figuras (continuación)

Figura		Página
16	Estructura formada por apilamiento de superredes entonadas a distintas longitudes de onda y reflectancias de cada reflector.	59
17	Espectros de reflectancia para estructuras con distintos números de pares de capas.	60
18	Espectros de reflectancia medidos y calculados para distintos ángulos de incidencia.	62
19	Celda unitaria del CF 2D y discretización de los contornos cerrados que limitan sus materiales.	66
20	Iluminación de un CF 2D truncado que contiene medios de LHM o dieléctrico y discretización de los contornos cerrados que limitan sus materiales.	83
21	Estructuras de bandas de CFs 2D de red cuadrada de cilindros paralelos infinitamente largos de dieléctrico o agujeros cilíndricos perforados en una matriz dieléctrica	92
22	Permitividad y permeabilidad de un LHM	93
23	Estructuras de bandas de CFs 2D de red cuadrada de cilindros paralelos infinitamente largos de LHM o agujeros cilíndricos perforados en una matriz de LHM bajo polarización TM	94
24	Estructuras de bandas de CFs 2D de red cuadrada de cilindros paralelos infinitamente largos de LHM obtenidas con diferentes realizaciones de un proceso aleatorio Gaussiano y Lorentziano	95
25	Estructuras de bandas de CFs 2D de red cuadrada de cilindros paralelos infinitamente largos de LHM bajo polarización TE	96
26	Estructuras de bandas de CFs 2D de red cuadrada de agujeros cilíndricos perforados en una matriz de LHM bajo polarización TE	97
27	Reflectancia y Transmitancia para una placa finita dieléctrica compuesta de inclusiones cilíndricas de aire de superficies lisas y rugosas con distintas fracciones de llenado.	100
28	Reflectancia y Transmitancia para una placa finita de LHM compuesta de inclusiones cilíndricas de aire de superficies lisas y rugosas con distintas fracciones de llenado.	101

Lista de Figuras (continuación)

Figura		Página
29	Celdas unitaria cuadrada con inclusiones cilíndricas lisas y rugosas . . .	127
30	Planos de incidencia para calcular la reflectancia del arreglo periódico de inclusiones cilíndricas de superficies lisa y rugosa para las polarizaciones TE y TM.	130
31	Reflectancia de redes cuadradas de inclusiones cilíndricas lisas y rugosas con $f = 0.12$	131
32	Reflectancia de redes cuadradas de inclusiones cilíndricas lisas y rugosas con $f = 0.12$	132
33	Plano de incidencia para la iluminación de un arreglo periódico de inclusiones cilíndricas, cuyas ondas se propagan con vector de onda $\mathbf{k}$ en el plano xy , normal al eje de los cilindros, bajo polarización TE y TM. . .	133
34	Estructuras de bandas de una red cuadrada de cilindros dieléctricos para polarización TE, $f = 0.12$	136
35	Estructuras de bandas de una red cuadrada de cilindros dieléctricos para polarización TM, $f = 0.12$	137
36	Red hexagonal de cilindros conductores.	139
37	Función dieléctrica de una una red hexagonal de cilindros conductores, sin y con retardamiento.	140
38	Funciones dieléctricas macroscópicas y función de Green TE de una red hexagonal de cilindros conductores para algunos vectores $\mathbf{k}$ fijos en la primera zona de Brillouin.	143
39	Estructura de bandas de un sistema 2D formado por una red hexagonal de cilindros conductores con parámetro de red $a = 1$, considerando $a/\lambda_p = 1$ y fracción de llenado de $f = 0.12$ bajo polarización TE. . . .	144

Índice de abreviaturas

Accesorio de Reflectancia Universal (URA: Universal Reflectance Accesory)

Administración Nacional de Aeronáutica y el Espacio (NASA: National Aeronautics and Space Administration)

Ácido Fluorhídrico (HF)

Arquitectura de Dispositivo Unificado por Computadora (CUDA: Computer Unified Device Architecture)

Centro de Investigación en Ingeniería y Ciencias Aplicadas (CIICAp)

Cristal Fotónico (CF)

Cristal Fotónico Bidimensional (CF 2D)

Diferencias Finitas en el Dominio del Tiempo (FDTD: Finite Differences in the Time Domain)

Espejo Omnidireccional (EO)

Lenguaje Práctico de Extracción e Informes (PERL: Practical Extraction and Report Language)

Facultad de Ciencias Físico Matemáticas (FCFM)

Grabado con Haz de Iones Asistido Químicamente (CAIBE: Chemically Assisted Ion Beam Etching)

Grabado Químico Asistido por Metal (MACE: Metal-Assisted Chemical Etching)

Herramienta para encontrar el valor mínimo de una función multiparámetro (MINUIT)

Índice de Refracción Negativo (IRN)

Infrarrojo Cercano (NIR: Near-Infrared)

Instituto de Ciencias Físicas (ICF)

Interfaz de Paso de Mensajes (MPI: Message Passing Interface)

Lenguaje de Datos de Perl (PDL: Perl Data Language)

Subprogramas de Comunicación para Álgebra Lineal Básica (BLACS: Basic Linear Algebra Communication Subprograms)

Litografía por Haz de Electrones (EBL: Electron-Beam Lithography)

Maestro en Ciencias (M.C.)

Maxwell Garnett (MG)

Metamaterial Izquierdo (LHM: Left Handed Metamaterial)

Método de la Ecuación Integral (MEI)

Método de Ondas Planas (PWM: Plane Wave Method)

Microscopía Electrónica de Barrido (SEM: Scanning Electron Microscopy)

Resonadores de Anillos Cortados (SRRs: Split-Ring Resonators)

Silicio Cristalino (c-Si: Crystalline silicon)

Silicio Poroso (SP)

Subprogramas Básicos de Álgebra Lineal (BLAS: Basic Linear Algebra Subprograms)

Subprogramas Paralelos Básicos de Álgebra Lineal (PBLAS: Parallel Basic Linear Algebra Subprograms)

Teoría de Medio Efectivo (TME)

Transversal Eléctrica (TE)

Transversal Magnética (TM)

Ultravioleta (UV)

Universidad Autónoma del Estado de Morelos (UAEM)

Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo (UMSNH)

Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM)

Visible (Vis)

Capítulo I

INTRODUCCIÓN

Muchos de los avances en tecnología han provenido del conocimiento profundo de las propiedades de los materiales. Más allá del aprovechamiento de las características con las que nos provee la naturaleza, la ingeniería ha alcanzado hoy en día un desarrollo que permite, partiendo de los materiales existentes, diseñar y producir materiales con novedosas propiedades que pueden ser controladas. La tecnología electrónica actual basada en materiales del estado sólido está llegando al límite físico, en el cual, ya no es viable aumentar significativamente la densidad de componentes presentes en los dispositivos electrónicos que den forma a nuestro estilo de vida; pero tampoco es posible incrementar la rapidez de los mismos sin reducir sus dimensiones (Cadien *et al.*, 2005). Es por esto que el desarrollo de la microelectrónica enfrenta un gran dilema y que se propicie un nuevo auge basado en la revolución optoelectrónica. Como resultado de lo anterior, en el campo de las telecomunicaciones, los conductores de cobre han sido substituidos por fibras ópticas para la transmisión de señales (Derickson, 1998). Por consiguiente, la comunidad científica ha incursionado en la tarea de desarrollar nuevas e

innovadoras tecnologías basadas en este enfoque particular, en un intento por consolidar con éxito una aplicación de desarrollo esencialmente fotónico (Knight *et al.*, 1996; Birks *et al.*, 1997; Knight *et al.*, 2000; Aristizabal *et al.*, 2006).

Los dispositivos fotónicos ofrecen ciertas ventajas frente a los electrónicos. Principalmente, mayor velocidad de operación, derivada de la naturaleza intrínseca de los portadores (fotones frente a los electrones) y de los procesos involucrados en su funcionamiento (respuesta óptica frente a la electrónica de los materiales), que conllevan a una menor disipación. Es por ello, que hay interés en desarrollar nuevos materiales que transmitan y que procesen información con luz en lugar de señales eléctricas. Dentro de este tipo de materiales, tenemos a los cristales fotónicos (CFs) (Joannopoulos *et al.*, 2008), los cuales son nanoestructuras artificiales que permiten la manipulación y el transporte de ondas luminosas.

La aplicación práctica de los CFs ha generado un gran interés científico en lo concerniente a la capacidad y la cantidad de la información que puede ser procesada en un determinado lapso de tiempo. En este tipo de materiales, el potencial periódico de los cristales semiconductores es análogo a una variación periódica de la constante dieléctrica. Si esta variación es lo suficientemente grande, y la absorción del material a la longitud de onda a la que pretendemos trabajar es lo suficientemente pequeña, entonces aparecen para la propagación de los fotones muchas de las mismas propiedades asociadas en cristales semiconductores a la propagación de los electrones.

De este modo, se pueden diseñar materiales con nuevas e inusuales propiedades ópticas mediante CFs, los cuales son materiales de constante dieléctrica variable, periódica y ordenada, con bajas pérdidas por absorción y que permiten introducir brechas (regiones de energía o frecuencia en la que la propagación de la luz está prohibida

dentro del CF) en determinadas zonas del espectro de frecuencias. Cuando la radiación electromagnética incide sobre la superficie del CF o es emitida desde su interior, la interferencia entre las distintas ondas reflejadas en cada interfaz da lugar a que ciertos rangos de frecuencias no puedan transmitirse en el cristal. Dicho de otro modo, para esas energías no hay estados disponibles en el interior del material y son, por lo tanto, prohibidas.

El valor de las constantes dieléctricas y el periodo espacial de su variación, determinan la frecuencia y anchura de las bandas prohibidas. Los CFs que constituyen arreglos periódicos de diferentes materiales en una, dos y tres dimensiones con celdas unitarias cuyos tamaños son del orden de la longitud de onda de la luz, han sido el objeto de investigación en los últimos años debido a su potencial para desarrollar circuitos integrados completamente ópticos (Teo *et al.*, 2006). Otras aplicaciones que han tenido auge en la investigación son el confinamiento de la luz (Megens *et al.*, 1999), las guías de ondas (Li *et al.*, 2006) y la conmutación de señales mediante la inclusión de defectos de materiales no lineales (Soljačić *et al.*, 2003).

Dentro de estos CFs, podemos mencionar las estructuras dieléctricas 1D multicapas, las cuales se han estudiado ampliamente en los rangos de frecuencia del visible (Vis) y del infrarrojo cercano (NIR¹), ya que en estos rangos, estas estructuras pueden tener dispersión y disipación pequeñas, por lo que pueden tener una alta reflectividad en comparación con la de los espejos metálicos (Fink *et al.*, 1998). Esta alta reflectividad puede lograrse en una amplia gama de frecuencias, ángulos de incidencia y para polarización tanto transversal eléctrica (TE) como transversal magnética (TM), dando lugar a estructuras que se conocen como *espejos omnidireccionales* (EOs) (Fink *et al.*,

¹Por sus siglas en inglés, Near-Infrared.

1998; Lekner, 2000). El EO más simple y común es una estructura formada a través de la repetición periódica de una celda unitaria formada por dos capas alternadas con índices de refracción altos y bajos (Fink *et al.*, 1998; Winn *et al.*, 1998). Hay muchos ejemplos de estos EOs diseñados para los rangos Vis (Lin *et al.*, 2005; Guan *et al.*, 2011; Ariza-Flores *et al.*, 2012; Jena *et al.*, 2016) y NIR (Fink *et al.*, 1998; Bruyant *et al.*, 2003; Park *et al.*, 2003; Valligatla *et al.*, 2012).

Un material común para la fabricación de EOs es el silicio poroso nanoestructurado (SP), obtenido a partir de obleas de Si mediante un grabado electroquímico, la cual es una técnica de síntesis simple que no requiere de equipos sofisticados (Escorcía and Agarwal, 2007; Ariza-Flores *et al.*, 2011a). Este proceso permite un control de los índices de refracción de las capas que componen la estructura a través de la densidad de corriente aplicada durante el proceso de anodizado. El espesor de las capas se controla a través del tiempo durante el cual se aplica esta corriente. Algunos trabajos han reportado EOs dieléctricos compuestos de estructuras de SP multicapas en las que el índice de refracción varía casi de forma continua, de acuerdo con una determinada dependencia funcional de la profundidad (Estevez *et al.*, 2008, 2009). Otros, han apilado dos o más estructuras periódicas, cada una compuesta por pares de capas con diferentes espesores (Xifré-Pérez *et al.*, 2005; Xifré-Pérez *et al.*, 2009) produciendo EOs en el NIR. También se han desarrollado para la región Vis, estructuras multicapas completamente oxidadas en las que el espesor de los sucesivos pares de capas aumenta gradualmente (Ariza-Flores *et al.*, 2012).

El cálculo de las propiedades ópticas de estos sistemas se lleva a cabo habitualmente mediante matrices de transferencia (Yeh, 2005; Ariza-Flores *et al.*, 2011b). Cada capa, se caracteriza por una matriz de 2×2 que transfiere las componentes independientes

continuas del campo electromagnético de una interfaz a la siguiente. Multiplicando las matrices de todas las capas obtenemos una matriz de transferencia que relaciona los campos de la primera con los de la última interfaz, donde se aplican condiciones de contorno para obtener los coeficientes ópticos. Desafortunadamente, en presencia de disipación, el simple producto de las matrices de transferencia puede volverse inestable (Pérez-Alvarez and Garcia-Moliner, 2004) y las propiedades ópticas resultantes pueden ser poco fiables. Este sería el caso de los EOs de SP trinados (“*chirped*”) sintonizados en el rango ultravioleta (UV), en el que el Si muestra dispersión y una disipación no despreciable. Para atacar este y otros casos similares, en este trabajo de tesis, exploramos dos métodos alternativos para lograr estabilidad numérica, confiabilidad y eficiencia computacional.

Para abordar el estudio de la propagación de una onda electromagnética en CFs 2D, existen varias propuestas para estudiar la propagación de dicha onda, como por ejemplo, la técnica numérica de diferencias finitas en el dominio del tiempo (FDTD²) (Cao *et al.*, 2004) propuesta por Yee (Yee, 1966), cuya implementación tiene un alto costo computacional. El método de ondas planas (PWM³) (Archuleta-García *et al.*, 2007) permite calcular las estructuras de bandas fotónicas que implican materiales sin dispersión y absorción, pero presenta inestabilidad en sus soluciones en el caso de un alto contraste entre los materiales que constituyen los sistemas y al abordar sistemas cuyas inclusiones presenten bordes afilados. La expansión de la función dieléctrica en términos de una serie de Fourier truncada presenta problemas de convergencia, aumentando los requisitos de memoria. El Método de la Ecuación Integral (MEI), el cual está basado en la solución numérica de la ecuación de Helmholtz usando ecuaciones integrales, nos

²Por sus siglas en inglés, Finite Differences in the Time Domain.

³Por sus siglas en inglés, Plane Wave Method.

permite obtener las estructuras de bandas de un CF 2D infinito (Mendoza-Suárez *et al.*, 2006, 2007) que involucran geometrías complicadas como por ejemplo inclusiones con superficies rugosas (Castillo-Gallardo *et al.*, 2019c) y el cálculo de reflectancia para CFs 2D finitos truncados (Puente-Díaz *et al.*, 2019; Castillo-Gallardo *et al.*, 2019a,b). Aunque este último método es muy eficiente, existen problemas donde su ejecución requiere muchas horas de cálculo e incluso varios días, por lo cual se recurre a alternativas basadas en multiprocesamiento, como es la programación en paralelo bajo los protocolos MPI y CUDA (Pérez-Hernández, 2015; Puente-Díaz, 2015; Sánchez-López, 2016; Lozano-Trejo, 2017), que permiten analizar grandes volúmenes de datos en forma simultánea y ayudan a solucionar este problema.

El MEI fue desarrollado por un grupo de investigadores pertenecientes tanto a la FCFM-UMSNH como de otras instituciones, el cual, además de modelar CFs 2D también puede modelar CFs en 1D (Mendoza-Suárez *et al.*, 2006). Así como llevar a cabo alternativas de creación de CFs integrados en guías de ondas cuyas propiedades no sólo dependen de los materiales que los constituyen sino de la geometría que los forman (Mendoza-Suárez *et al.*, 2004; Mendoza-Suárez *et al.*, 2011; Mendoza-Suárez and Pérez-Aguilar, 2016; Medina-Magallón *et al.*, 2019; Alva-Medrano *et al.*, 2019). Aunque este método es muy eficiente, no es posible llevar a cabo el modelado para el caso de CFs en 3D dado que, a diferencia del caso 2D, estos sistemas requieren utilizar una teoría explícitamente vectorial. Sin embargo, existen técnicas numéricas que no tienen este problema y pueden abordar el modelado de CFs en 1D, 2D y 3D las cuales están basadas en las teorías de medio efectivo (TME) (Tao *et al.*, 1990; Bergman and Dunn, 1992; Datta *et al.*, 1993; Alexopoulos, 2010). Pero algunas de éstas sólo son válidas en ciertos casos límites, como por ejemplo, cuando la fracción de llenado de las inclusiones es pequeña o cuando la longitud de onda con la cual se trabaje sea mucho

mayor que el tamaño de la celda unitaria del sistema. El propósito de las TMEs es describir al medio compuesto como si fuera un material homogéneo que responde al campo electromagnético mediante una respuesta macroscópica efectiva, en la cual se incorporan los efectos relevantes del comportamiento microscópico de la estructura.

De esta manera, aunque se han propuesto numerosas técnicas numéricas basadas en el enfoque de medio efectivo, muchas son aproximaciones que van asociadas a severos límites de validez. Sin embargo, existen técnicas numéricas con este enfoque que no tienen estos problemas, como por ejemplo las desarrolladas por el Dr. Wolf Luis Mochán Backal (ICF-UNAM) y su grupo de colaboradores, cuya formulación está basada en las ecuaciones de Maxwell y que se pueden aplicar a estos arreglos periódicos binarios para cualquier pareja de materiales en dos y tres dimensiones. Estas técnicas numéricas utilizan el método recursivo de Haydock (Haydock *et al.*, 1972, 1975) para calcular una función dieléctrica macroscópica para los casos en que la longitud de onda de la onda electromagnética es más grande que la escala del sistema periódico (Mochán and Barrera, 1985; Mochán *et al.*, 2010; Cortés *et al.*, 2010; Mendoza and Mochán, 2016) y cuando ambas son comparables en órdenes de magnitud (Pérez-Huerta *et al.*, 2013; Juárez-Reyes and Mochán, 2018; Juárez-Reyes *et al.*, 2020), y cuyos cálculos son económicos en cuanto a recursos computacionales.

Desde el punto de vista experimental, existe una variedad de métodos de fabricación de CFs 2D, muchos de los cuales han sido tomados de la industria de la microelectrónica de silicio. Algunos de estos son la litografía por haz de electrones (EBL⁴), el grabado con haz de iones asistido químicamente (CAIBE⁵), el grabado anódico y crecimen-

⁴Por sus siglas en inglés, Electron-Beam Lithography.

⁵Por sus siglas en inglés, Chemically Assisted Ion Beam Etching.

to, el grabado químico asistido por metal (MACE⁶), entre otros (Krauss and De La Rue, 1999; Huang *et al.*, 2011). El alto grado de regularidad alcanzable en su crecimiento o en los procesos electroquímicos sobrepasa al de las estructuras generadas por medios litográficos. De los métodos mencionados anteriormente el MACE ha llamado la atención por ser un método simple y de bajo costo para la fabricación de diversas estructuras de Si, como por ejemplo la fabricación de micro o nano alambres de Si, ya que poseen propiedades estructurales, eléctricas, ópticas y termoeléctricas únicas (Peng *et al.*, 2013). La calidad de los micro o nano alambres fabricados por MACE a partir de Si generalmente es alta, obteniéndose alambres bien definidos y derechos (Huang *et al.*, 2011). En el método MACE un metal como Ag, Au, Pt o Au/Pd se deposita sobre el sustrato de Si antes del proceso de grabado. Cuando este sustrato de Si decorado con metal se sumerge en una solución compuesta de ácido fluorhídrico (HF) y un oxidante (típicamente H₂O₂), el metal cataliza la disolución de Si permitiendo la preparación de micro y nanoestructuras de Si elaboradas (Huang *et al.*, 2011). MACE es esencialmente un método de grabado que se basa en reacciones químicas, el cual es simple y de bajo costo para la fabricación de micro o nano estructuras que pueden ser no sólo de Si, sino también de SP (Li and Bohn, 2000; Asoh *et al.*, 2009; Chang *et al.*, 2009; Boarino *et al.*, 2011; Li, 2012; Balderas-Valadez *et al.*, 2018). Así, la fabricación de CFs es muy importante ya que da origen a líneas de investigación muy prometedoras para la manipulación de fotones en la industria de las telecomunicaciones.

Por otro lado, en los últimos años han llamado la atención sistemas artificiales compuestos de arreglos periódicos de microestructuras (típicamente se consideran unidades estructurales mucho más pequeñas que la longitud de onda) cuya configuración, geometría y composición determinan su respuesta óptica macroscópica. Este otro tipo de

⁶Por sus siglas en inglés, Metal-Assisted Chemical Etching.

estructuras se les conoce como metamateriales, que, a diferencia de los CFs que están basados en el fenómeno de difracción y cuya estructura cristalina debe tener una periodicidad comparable a la longitud de onda, pueden ser tratados como un medio efectivo que se puede describir como un material homogéneo no ordinario. Particularmente al controlar su microestructura es posible diseñar metamateriales con propiedades ópticas exóticas, que no se encuentran de forma natural en ningún material, como por ejemplo los llamados Metamateriales Izquierdos (LHMs⁷) (Smith *et al.*, 2000; Smith and Kroll, 2000; Shelby *et al.*, 2001b; Smith *et al.*, 2004). En estos existen rangos de frecuencia ω en los cuales tanto la permitividad eléctrica $\epsilon(\omega)$ como la permeabilidad magnética $\mu(\omega)$ son simultáneamente negativas (Veselago, 1968; Smith *et al.*, 2000), lo cual implica que al refractarse una onda en estos medios, esta obedece la ley de Snell pero con un Índice de Refracción Negativo (IRN) (Smith and Kroll, 2000; Shelby *et al.*, 2001b; Smith *et al.*, 2004). Los LHMs deben su nombre al hecho de que el campo eléctrico $\mathbf{E}$, el campo magnético $\mathbf{H}$ y el vector de onda $\mathbf{k}$ correspondientes a una onda plana que se propaga en estos medios forman una tríada izquierda de vectores ortogonales y el flujo de energía, descrito por el vector de Poynting $\mathbf{S}$ apunta en dirección opuesta a $\mathbf{k}$ (Veselago, 1968; Smith *et al.*, 2000; Smith and Kroll, 2000). Sus novedosas propiedades ópticas los hacen potencialmente útiles para nuevas aplicaciones tecnológicas (Veselago and Narimanov, 2006) como, por ejemplo, la fabricación de lentes capaces de formar imágenes que alcancen resoluciones por debajo del límite de difracción (Pendry, 2000; Lu and Liu, 2012) y la fabricación de guías de ondas ópticas (Caloz *et al.*, 2001; Wu *et al.*, 2003; Alu and Engheta, 2003, 2004).

A pesar de que esta nueva tecnología ha tenido un gran desarrollo, los LHMs siguen enfrentando muchos retos y probablemente pasen todavía muchos años, antes de que

⁷Por sus siglas en inglés, Left Handed Metamaterials.

podamos apreciar su verdadero impacto tecnológico. El interés en este trabajo al abordar los LHMs es hacer un estudio numérico de estos al combinarlos con los CFs con el objetivo de obtener nuevas estructuras con extraordinarias propiedades que puedan tener grandes aplicaciones en el campo de la optoelectrónica y la fotónica.

Ubicándonos dentro de este contexto, el presente trabajo se enfocó en la fabricación de CFs en 1D, así como el modelado realista de CFs en 1D y 2D incorporando la rugosidad de sus superficies, para poder estimar la viabilidad de las aplicaciones que pudieran tener para la transmisión de señales en microprocesadores y chips de computadoras ópticas, en un futuro no muy lejano. Es por ello, que se pretende implementar métodos numéricos avanzados que permitan estudiar la respuesta óptica de estos CFs incluyendo geometrías muy particulares que puedan conducir a sus características novedosas. Por tal motivo, el interés de este trabajo hace posible el desarrollo conjunto de nuevas alternativas en la fabricación de CFs en 1D y 2D que pueden tener grandes aplicaciones para la transmisión de información de señales, en sistemas que involucran geometrías complicadas y propiedades ópticas exóticas, como las correspondientes a los LHMs.

I.1. Estructura de la tesis

Este trabajo está estructurado de la siguiente manera:

En el capítulo II se desarrollan los conceptos generales tales como CFs y LHMs, enfocándose en las características de estos materiales artificiales. Se mencionan algunas características del SP y se da una breve descripción de la técnica electroquímica utilizada para llevar a cabo la síntesis de las capas porosas y de los diferentes sis-

temas multicapas 1D, cuyas propiedades ópticas son discutidas en este trabajo de tesis. Además, se presenta el desarrollo de la teoría de Bruggeman como una TME empleada para calcular la función dieléctrica de una mezcla de dos medios: aire y silicio, la cual permite modelar las propiedades macroscópicas de los sistemas multicapas.

En el capítulo III se describen las técnicas numéricas desarrolladas para estudiar las estructuras fotónicas multicapas unidimensionales de SP, ya sean formados de repeticiones periódicas de una celda unitaria compuesta por dos capas alternadas con índices de refracción n_1 y n_2 , o completamente aperiódicos, en los cuales el espesor de pares sucesivos de capas cambia gradualmente, desarrollando formalismos alternativos que permiten el cálculo de sus propiedades ópticas. En primer lugar, damos una descripción del *Método de la Matriz de Transferencia* convencional, para calcular la respuesta óptica de estas estructuras. Este método falla y se vuelve inestable en sistemas con un medio disipativo presente, como es el SP en la región del ultravioleta. Por ende, se aborda posteriormente el análisis del *Método de la Matriz Extendida* y la *Expansión de Ondas de Bloch*. El primero de estos métodos es un formalismo basado en una matriz extendida que permite calcular los campos en todas las interfaces. El segundo, constituye un desarrollo teórico sobre una expansión de modos tipo Bloch de una estructura artificial, repetida periódicamente. Primordialmente, se estudió la distribución de los periodos de un sistema particular, modulándose mediante una función de tipo creciente. La respuesta óptica de la estructura diseñada se optimizó numéricamente usando la extensión PDL del lenguaje de computación PERL y su interfaz al módulo de optimización MINUIT. Adicionalmente, fueron propuestas estructuras altamente reflejantes sobre una región extensa del espectro electromagnético, apilando espejos entonados a diferentes longitudes de onda. Finalmente, se comparan las respuestas ópticas obtenidas numérica y experimentalmente para distintas longitudes de onda y diferentes ángulos de inciden-

cia para sistemas diseñados y fabricados con ciertos criterios y se discuten los resultados obtenidos.

En el capítulo IV se describe y desarrolla el MEI (Mendoza-Suárez *et al.*, 2007) utilizado para obtener las estructuras de bandas de un CF 2D infinito y la respuesta electromagnética de un CF 2D finito con superficies lisas o rugosas que contienen medios de LHM y/o dieléctrico en una celda unitaria cuadrada. El MEI también es adecuado para el cálculo de la distribución del campo electromagnético en la región de campo lejano para un CF 2D finito truncado, por lo que este método permitió analizar la respuesta óptica de un CF 2D finito. Al final de este capítulo se muestran los resultados numéricos obtenidos.

En el capítulo V se desarrolla brevemente la teoría asociada al método recursivo de Haydock empleado para obtener la respuesta dieléctrica macroscópica de un sistema periódico binario, para los casos cuando la longitud de onda de la onda electromagnética es más grande que la escala del sistema periódico (caso no retardado) y para cuando ambas son comparables (caso con retardamiento). El método fue aplicado a dos tipos de sistemas periódicos con inclusiones cilíndricas: uno con una celda unitaria cuadrada y otro con una celda unitaria hexagonal. Con el primer sistema se obtuvieron las estructuras de bandas fotónicas del CF 2D infinito al considerar el caso con retardamiento y la respuesta electromagnética del sistema finito en el caso no retardado, considerando las inclusiones dieléctricas con superficies lisas o rugosas. Las estructuras de bandas resultantes fueron comparadas con las obtenidas con el MEI, obteniéndose una buena concordancia. Con el segundo sistema se obtuvieron las estructuras de bandas del CF 2D infinito con retardamiento y la respuesta electromagnética del sistema finito sin retardamiento, considerando inclusiones metálicas con superficies lisas.

Se dedica el capítulo VI a las conclusiones del trabajo con el que se culmina este proyecto doctoral y se discuten propuestas de trabajo futuro para continuar con la presente investigación.

Capítulo II

CONCEPTOS GENERALES

En este capítulo se presenta una breve historia de los cristales fotónicos (CFs) y de los metamateriales izquierdos (LHMs), así como las propiedades que los caracterizan. Se mencionan algunas características del silicio poroso (SP) y se da una breve descripción de la técnica electroquímica utilizada para llevar a cabo la síntesis de los diferentes sistemas multicapas 1D, tratados en este trabajo. Además, se presenta el desarrollo de la teoría de Bruggeman como una teoría de medio efectivo, empleada para calcular la función dieléctrica de una mezcla de dos medios: aire y silicio.

II.1. Cristales Fotónicos

A pesar de que los CFs han atraído mucha atención durante las últimas décadas, las primeras hipótesis de la posibilidad de controlar la propagación de la luz utilizando las estructuras periódicas, se inician con Rayleigh (1887). Esas fueron las investigaciones de estructuras periódicas en 1D (Rayleigh, 1887, 1888).

Casi después de 100 años, en 1972, un científico de la Unión Soviética, V.P. Bykov publicó un artículo en el que describió la posibilidad de utilizar estructuras periódicas para el control de la emisión espontánea de la luz (Bykov, 1972). Sin embargo, los trabajos que detonaron el progreso intenso de los CFs son las obras de E. Yablonovitch y S. John que fueron publicadas en 1987 (Yablonovitch, 1987; John, 1987). Estos trabajos se enfocaron en la posibilidad del control de la emisión espontánea y a la posibilidad del control de la propagación de la luz mediante estructuras periódicas. Después de la publicación de dichos artículos, el número de artículos dedicados a la física y la tecnología de CFs se duplicó cada año.

Actualmente la investigación en CFs ha llegado a un punto tal, que ya se tienen nuevas tecnologías de nano-fabricación consiguiendo las primeras aplicaciones prácticas de elevado impacto tecnológico. En los últimos años se han conseguido aplicaciones prácticas como son los láseres de CFs y guías de onda nanoestructuradas con bandas prohibidas (Staude *et al.*, 2012; Yu *et al.*, 2014; Halir *et al.*, 2015; Lehmann and Spatschek, 2016). Estas estructuras dieléctricas poseen una modulación periódica del índice de refracción, siendo su periodo del orden de la longitud de onda del campo electromagnético en el rango óptico. Esta disposición periódica provoca un comportamiento de los fotones en su interior similar al de los electrones en la estructura cristalina de un semiconductor (Korvink and Greiner, 2002).

La propiedad más relevante de los CFs es que presentan brechas fotónicas, zonas prohibidas en el espectro fotónico en las que no se pueden propagar fotones produciendo efectos no observados en la óptica tradicional (Yablonovitch, 1987; Joannopoulos *et al.*, 2008; Sakoda, 2005). En estas brechas la luz no puede entrar en el cristal y los electrones no pueden emitir fotones dentro del cristal. Esta propiedad permite un buen control

de la propagación de la luz.

En la fig. 1 se muestran CFs semiconductores en una, dos y tres dimensiones con periodos de orden nanométricos y las correspondientes zonas de Brillouin (celdas unitarias en el espacio recíproco, que representan los posibles vectores de Bloch de una onda fotónica).

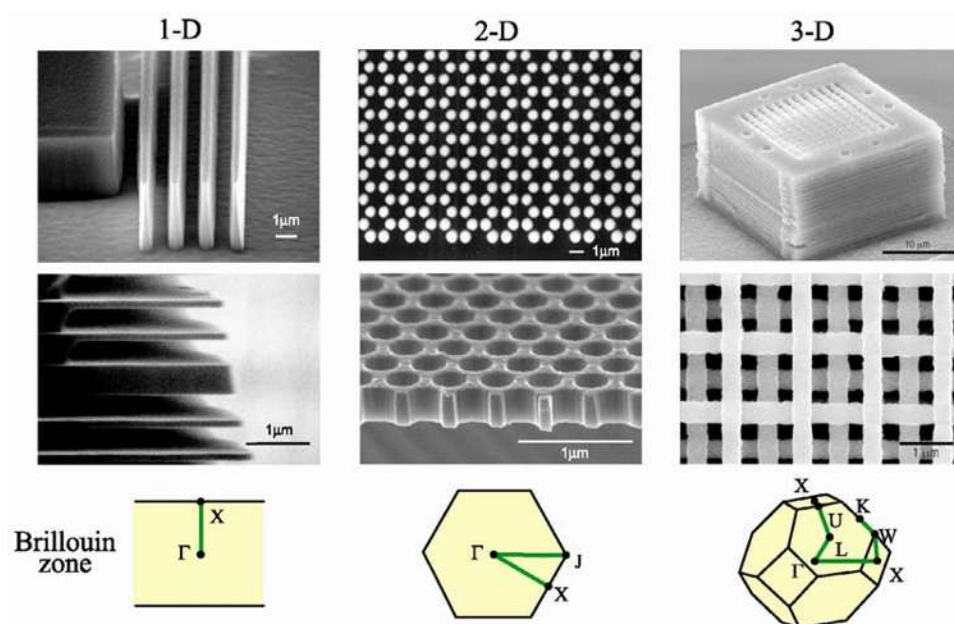


Figura 1. Estructuras cristalinas fotónicas en 1D (laminado), 2D (hexagonal) y 3D (bcc) con su correspondiente zona de Brillouin. Imagen tomada de la referencia (Baba, s.f.).

Un interés en la investigación de los CFs es buscar el control totalmente óptico de la información en un circuito, con la idea de desarrollar novedosas aplicaciones tecnológicas, que tendrían grandes ventajas sobre los dispositivos electrónicos convencionales en la miniaturización de circuitos a través de comportamientos peculiares tales como la posibilidad de tener permeabilidad y permitividad negativa, y la consecuente dispersión extraordinaria de la velocidad de grupo que permita manipular pulsos ópticos, entre otras. Estos dispositivos podrían ser la piedra angular de nuevas computadoras ópticas que superarán las limitaciones impuestas por la progresiva miniaturización

de los actuales procesadores de silicio. Asimismo, se tendrá una gama de aplicaciones en espectroscopía, metrología, biomedicina, imágenes y telecomunicaciones, entre otras (Kiyotoshi, 2006).

Otro tipo de materiales que han llamado la atención, ya que pueden tener grandes aplicaciones en el campo de la fotónica, son los metamateriales, los cuales son materiales artificiales compuestos de arreglos periódicos de microestructuras cuya configuración, geometría y composición determinan su respuesta óptica macroscópica. Al controlar su microestructura es posible diseñar metamateriales con propiedades ópticas exóticas, que no se encuentran de forma natural en ningún material, como por ejemplo los LHMs, los cuales presentan un índice de refracción negativo (IRN) y cuyas propiedades se mencionan en la siguiente subsección.

II.2. Metamateriales con IRN

La existencia de materiales con IRN fue teóricamente explorada por primera vez en 1968, por el físico ruso Víctor Veselago (Veselago, 1968). En su trabajo pionero señaló la existencia de materiales que podrían tener permitividad y permeabilidad simultáneamente negativas para algunas frecuencias, a los cuales nombró LHMs. Esto debido a que el vector de onda $\mathbf{k}$, el vector de campo eléctrico $\mathbf{E}$ y el vector de campo magnético $\mathbf{H}$ forman una tríada de vectores ortogonales con una orientación Izquierda a diferencia de los dieléctricos convencionales que siguen una orientación de la mano derecha. Como consecuencia, en los LHMs el flujo de energía, descrito por el vector de Poynting $\mathbf{S}$ apunta en dirección opuesta a $\mathbf{k}$ como se muestra en la fig. 2(b), al contrario de los medios ordinarios, donde el vector de Poynting apunta en la misma dirección a $\mathbf{k}$ (ver

fig. 2(a)). Esto se puede verificar fácilmente al considerar las ecuaciones de Maxwell

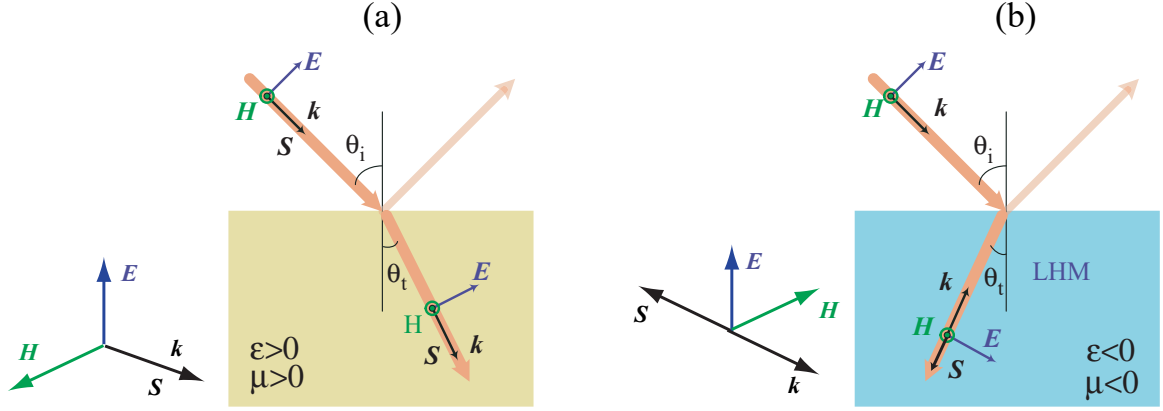


Figura 2. Refracción en la superficie de un medio ordinario y en un LHM. En un medio con $\epsilon(\omega), \mu(\omega) > 0$, (panel (a)) los vectores $\mathbf{k}$ y $\mathbf{S}$ van en la misma dirección y con $\epsilon(\omega), \mu(\omega) < 0$, (panel (b)) van en direcciones opuestas; es decir, los vectores $\mathbf{k}$ y $\mathbf{S}$ son antiparalelos dentro del medio con IRN.

en su forma diferencial para campos con frecuencia ω en un medio libre de cargas y corrientes externas y cuya permitividad eléctrica $\epsilon(\omega)$ y permeabilidad magnética $\mu(\omega)$ dependen de ω ,

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \quad (1)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}. \quad (2)$$

Al considerar una onda plana monocromática armónica cuyos campos dependen de la posición y del tiempo a través de $\exp i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)$ y usando las relaciones constitutivas para materiales lineales $\mathbf{D} = \epsilon(\omega)\mathbf{E}$ y $\mathbf{B} = \mu(\omega)\mathbf{H}$, obtenemos

$$\mathbf{k} \times \mathbf{E} = \frac{\omega}{c} \mu(\omega) \mathbf{H}, \quad (3)$$

$$\mathbf{k} \times \mathbf{H} = -\frac{\omega}{c} \epsilon(\omega) \mathbf{E}. \quad (4)$$

Estas expresiones muestran que $\mathbf{k}$, $\mathbf{E}$ y $\mathbf{H}$ forman una tríada de vectores ortogonales. Su orientación –derecha o izquierda– depende del signo de ϵ y μ como se puede ver en las figs. 2(a) y (b). Si ambas son positivas ($\epsilon(\omega), \mu(\omega) > 0$) tenemos una tríada

derecha y si ambas son negativas ($\epsilon(\omega), \mu(\omega) < 0$) tenemos una tríada izquierda. Como el vector de Poynting está dado por $\mathbf{S} = \mathbf{E} \times \mathbf{H}$, entonces la tríada ortogonal $\mathbf{S}, \mathbf{E}, \mathbf{H}$ siempre es derecha, y por tanto, cuando $\epsilon, \mu < 0$, tiene la orientación opuesta a $\mathbf{k}, \mathbf{E}, \mathbf{H}$. Esto se traduce en que $\mathbf{S}$ y $\mathbf{k}$ son antiparalelos dentro del LHM. Este comportamiento debe implicar que en un LHM la fase (los frentes de onda) viaja en dirección contraria a la propagación de los haces de luz, dada por el vector de Poynting. Es decir, la velocidad de grupo, que caracteriza el flujo de energía, y la velocidad de fase, que caracteriza el movimiento de los frentes de onda, apuntan en direcciones opuestas en un LHM. Como consecuencia de esto, se presenta un fenómeno conocido como refracción negativa, el cual se deriva al considerar la continuidad de la componente tangencial del vector de onda $\mathbf{k}$ y de la componente normal del vector de Poynting. De esta manera, cuando la onda electromagnética pasa de un medio convencional a un LHM, ésta se refracta con un ángulo negativo respecto a la normal de la superficie, como se puede ver en la fig. 2(b). Notemos también de esta figura que, como los rayos de la onda electromagnética van en dirección del vector de Poynting, se cumple la misma ley de la refracción $n_i \sin \theta_i = n_t \sin \theta_t$, considerando el índice de refracción como negativo cuando el medio sea un LHM.

Veselago sólo describió el comportamiento de los LHMs, ya que ningún material natural conocido presentaba un rango de frecuencias con $\mu < 0$ y $\epsilon < 0$. Por esta razón ningún experimento se pudo realizar hasta el año 2000, cuando se construyó una estructura artificial compuesta de resonadores de anillos cortados (SRRs¹) y barras metálicas delgadas, con la cual se demostró que ésta presentaba una banda de frecuencias en la que tanto ϵ como μ eran negativos (Smith *et al.*, 2000).

¹Por sus siglas en inglés, Split-Ring Resonators.

II.2.1. Construcción del primer LHM y verificación experimental de refracción negativa

En el año 2000 se construyó el primer LHM, el cual era una estructura artificial lo suficientemente pequeña para ser considerada como un medio efectivo que se podía describir como un material homogéneo no ordinario. Esta estructura fue construida por Smith (Smith *et al.*, 2000) y se basó en los trabajos de Pendry (Pendry *et al.*, 1996, 1998, 1999). En estos trabajos, el equipo dirigido por J. B. Pendry propuso y demostró que con redes de barras metálicas delgadas se podían obtener permitividades negativas para el rango de las microondas (Pendry *et al.*, 1996, 1998) y que los materiales con arreglos de SRRs producen permeabilidad negativa sobre ciertas bandas de frecuencia (Pendry *et al.*, 1999). La idea del equipo de Smith fue juntar las dos estructuras propuestas por Pendry para conseguir simultáneamente la permeabilidad y permitividad negativas, lo que correspondería a un índice de refracción real y por lo tanto, permitiría la propagación. El diseño de Smith consistió en construir por separado una estructura de barras metálicas delgadas y otra de SRRs para el mismo rango de frecuencias y posteriormente, combinarlas para la obtención de una estructura compuesta (Smith *et al.*, 2000). En esta estructura las barras metálicas se colocaron entre los SRRs, con los ejes de las barras metálicas intersectando los ejes de los SRRs. Esto llevó al equipo de Smith a concluir que tal configuración minimizaba la interacción entre los anillos y las barras metálicas, permitiendo así una división clara entre las respuestas eléctrica (las barras metálicas) y magnética (los SRRs) (Smith *et al.*, 2000; Yen *et al.*, 2004). Cuando no se consideran pérdidas (lo cual se logra utilizando buenos conductores para la construcción de la estructura compuesta), dichas respuestas vienen dadas por (Pendry

et al., 1998, 1999)

$$\epsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}, \quad \text{y} \quad \mu(\omega) = 1 - \frac{F\omega^2}{\omega^2 - \omega_0^2}, \quad (5)$$

donde ω_p es la frecuencia de plasma, F es un parámetro correspondiente a la fracción de área de la celda unitaria ocupada por el interior del SSR y ω_0 es la frecuencia de resonancia, dependiente de la capacitancia e inductancia del sistema.

En el año 2001, Shelby y sus compañeros de trabajo demostraron experimentalmente el fenómeno de refracción negativa (Shelby *et al.*, 2001a,b). Para ello construyeron un LHM 2D (Fig. 3(b), cortesía del Centro de Investigación Glenn de la Administración Nacional de Aeronáutica y el Espacio (NASA²)) en forma de cuña, diseñado para tener un IRN ($n = -2.7$) a frecuencias de microondas y otro de teflón ($n = 1.4$). En este experimento, mostrado en la fig. 3(c), un haz de microondas incidió sobre la superficie plana de la cuña pasando a través del ancho sin desviarse y luego refractándose en la segunda interfaz. Se midió la dependencia angular de la potencia refractada, estableciendo el ángulo de refracción. Los resultados obtenidos se muestran en la fig. 3(d), donde se ve que la refracción con teflón se produce hacia ángulos positivos (curva azul), mientras que con la cuña de LHM se produce en el sentido opuesto (curva roja). La fig. 3(a) muestra el perfil de un único resonador formado por dos anillos cuadrados cortados.

Después de esta primera demostración de refracción negativa, se reportaron dos experimentos más de la ley de Snell, ambos utilizando cuñas de LHM con un diseño similar al usado en la primera demostración en condiciones de campo lejano (Houck *et al.*, 2003; Parazzoli *et al.*, 2003). Estas mediciones adicionales han bastado para convencer a la mayoría que los materiales con IRN son una realidad.

²Por sus siglas en inglés, National Aeronautics and Space Administration.

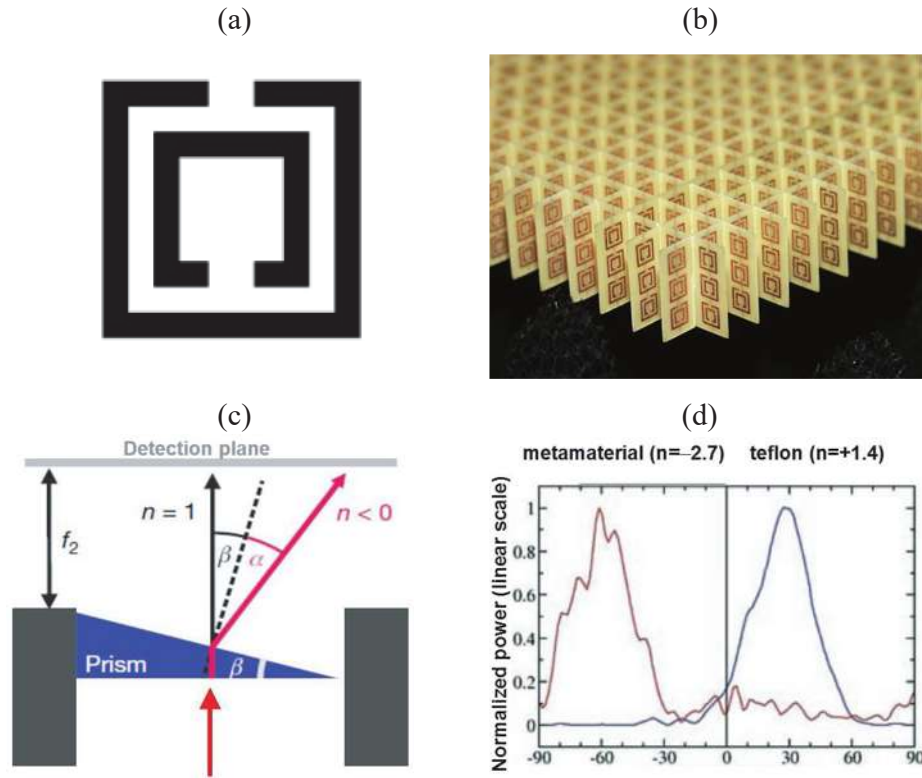


Figura 3. (a) Ejemplo de un sólo resonador de anillo cuadrado y celda unitaria de un LHM. (b) Ejemplo de un LHM 2D (cortesía del Centro de Investigación Glenn de la NASA). (c) LHM en forma de cuña diseñado para tener un IRN. (d) Potencia detectada como una función del ángulo para una cuña de teflón ($n = 1.4$, curva azul) y una cuña de LHM ($n = -2.7$, curva roja).

Es importante mencionar que los SRRs no funcionan exclusivamente a frecuencias de microondas. Simplemente, los experimentos iniciales fueron realizados en el rango de microondas, porque así la longitud de onda es del orden de centímetros y las dimensiones de los SRRs del orden de milímetros, de manera que se pueden fabricar fácilmente mediante técnicas ordinarias de fotolitografía de circuitos impresos.

Por otro lado, un material natural, el cual puede también ser aprovechado en aplicaciones fotónicas es el silicio al hacerse poroso (Smith and Collins, 1992; Zhang, 2003; Escorcia and Agarwal, 2007), convirtiéndose en un material nanoestructurado con el que se pueden construir estructuras fotónicas. Por ejemplo: sistemas multicapas de SP

que pueden filtrar o reflejar la luz que corresponden a un CF 1D donde el índice de refracción varía de forma periódica. El sistema multicapas se comporta como espejo para las frecuencias dentro de su brecha fotónica, ya que refleja todas éstas y se puede diseñar para que sea selectivo con las frecuencias que refleja. En la siguiente sección se dan algunas características del SP, así como una breve descripción de la técnica utilizada para su producción; ya que en este trabajo se llevó a cabo el estudio teórico-numérico de estas estructuras.

II.3. CFs 1D formados de multicapas de SP

El SP es un material artificial obtenido, mediante la corrosión electroquímica de silicio cristalino (c-Si³). Dicha modificación, provee al material de nuevas propiedades optoelectrónicas. La estructura de este material está compuesta por una red de poros interconectados por c-Si que forma un esqueleto. El grado de porosidad y el material contenido en los poros permiten sintonizar las propiedades eléctricas y ópticas, convirtiéndolo en un material con potenciales aplicaciones en biotecnología y optoelectrónica. Este material fue descubierto por Arthur Uhlir Jr. en 1955, mientras desarrollaba métodos electroquímicos para el maquinado de obleas de c-Si en los Laboratorios Bell (Kochergin and Föll, 2009). Uhlir encontró que durante el proceso de anodizado del silicio monocristalino en una solución que contiene flúor se genera una red de poros que evoluciona en profundidad siguiendo, en forma preferencial, la dirección cristalina (1 0 0) (Föll *et al.*, 2002; Kochergin and Föll, 2009).

Las obleas de c-Si que se utilizan para obtener el SP, en general están dopadas (se

³Por sus siglas en inglés, Crystalline silicon.

introducen impurezas al semiconductor) para incrementar su conductividad eléctrica. El material que se utiliza para el dopaje define la cantidad y el tipo de portadores mayoritarios (electrones o huecos). La aplicación de los semiconductores del grupo IV de la tabla periódica como el Si en la electrónica se inicia a partir del descubrimiento de que se les puede dopar con elementos del grupo III (B, Al, Ga, In) de la tabla periódica para producir c-Si tipo p (tipo p, por positivo), cuyos portadores mayoritarios son huecos, o con elementos del grupo V (P, As, Sb) para producir c-Si tipo n (tipo n, por negativo), cuyos portadores mayoritarios son electrones.

El c-Si es fundamental en electrónica, pero no se emplea en la optoelectrónica debido a su baja eficiencia como emisor de luz. La fotoluminiscencia en un semiconductor involucra la excitación de un electrón de la banda de valencia a la banda de conducción y la subsiguiente recombinación del electrón con un hueco. El c-Si es un semiconductor de brecha energética *indirecta* ($E_g=1.1$ eV), ya que el mínimo de la banda de conducción y el máximo de la banda de valencia tienen diferentes momentos cristalinos, lo cual vuelve menos probable la recombinación óptica. Es por ello que el c-Si presenta luminiscencia extremadamente deficiente y sólo en la región del infrarrojo. Sin embargo, el silicio poroso es un material nanoestructurado que presenta fotoluminiscencia a una energía mayor que la brecha energética del c-Si y ésta se puede modular en la región del espectro visible (Canham, 1990).

El SP se produce mediante el ataque electroquímico de una oblea de c-Si en una solución de HF (Smith and Collins, 1992; Zhang, 2003; Escorcía and Agarwal, 2007). La reacción electroquímica se inicia por la presencia de huecos en la superficie, ya sea procedentes de las impurezas del c-Si o inducidos por iluminación, que reaccionan con el HF al aplicar una corriente anódica. Diferentes modelos han sido propuestos para

explicar el mecanismo de reacción que se da en la fabricación del SP por métodos electroquímicos, siendo el más aceptado el propuesto por Lehman y Gösele (Lehmann and Gösele, 1991), el cual se esquematiza en la fig. 4. Este modelo consiste en la remoción de átomos de silicio por agentes nucleofílicos F^- . El proceso comienza con

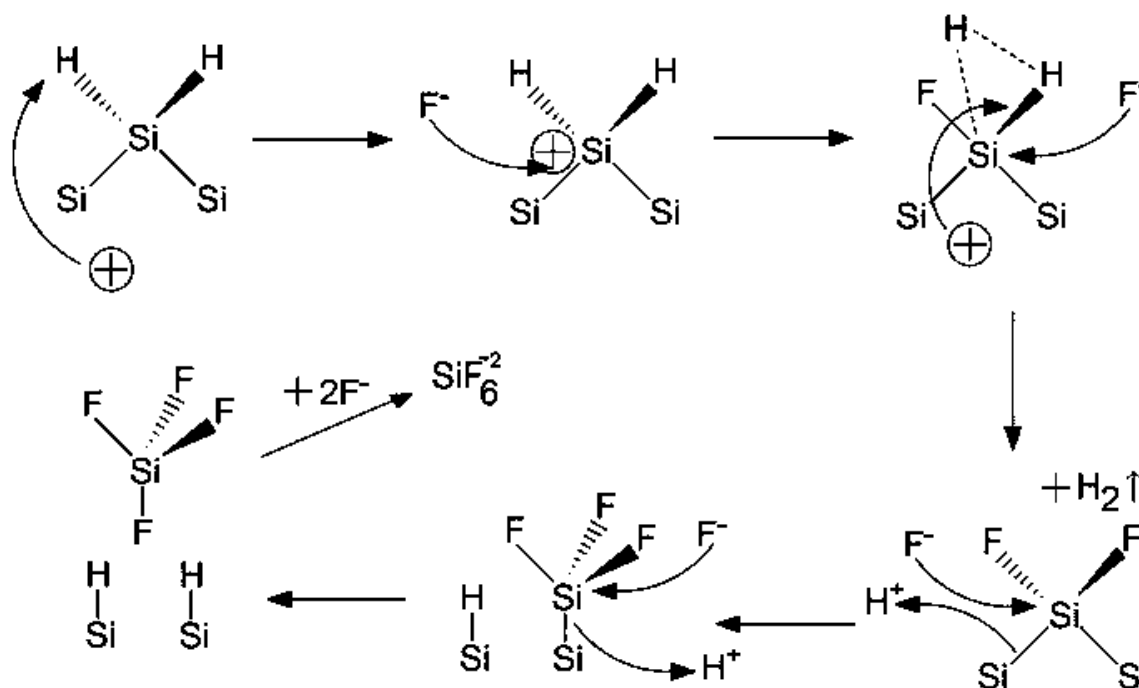


Figura 4. Proceso de reacción para el ataque electroquímico de Si en soluciones de HF (ver texto) (Ariza-Flores, 2013).

un flujo de huecos (h^+) hacia la superficie del silicio, promovidos por una corriente electrónica en dirección inversa (de la superficie hacia a la base del silicio). Esto genera una densidad de carga positiva localizada principalmente en los átomos de silicio de la superficie. Enseguida, un ión fluoruro ataca el silicio desplazando un enlace con alguno de los hidrógenos. Posteriormente, el hidrógeno es desplazado formando un puente con algún hidrógeno adyacente, mientras que el flúor forma un enlace covalente con el silicio. El ataque se repite ya que se bombean huecos continuamente a la superficie de la muestra, los que provocan que otro flúor se una químicamente y los hidrógenos que

forman los puentes sean liberados como gas H_2 . El ataque se repite una vez más, pero al no haber más hidrógenos disponibles, los enlaces entre silicios adyacentes sufren un mecanismo de reacción análogo, en donde uno de estos silicios captura un hidrógeno de la solución y otro se une al flúor. El proceso continúa hasta el último enlace entre silicios, formando SiF_4 y liberándolo de la superficie. En la disolución, la especie SiF_4 captura dos iones fluoruro para generar el ión SiF_6^{2-} que es termodinámicamente más estable en solución. El resultado final es la remoción de un átomo de silicio de la superficie y la hidrogenación de los átomos adyacentes. De esta manera, se van removiendo los átomos de silicio para dar lugar a la formación de los poros en la estructura.

La estructura del SP varía dependiendo de las condiciones de ataque electroquímico. Ésta puede ser similar a la de un coral con un esqueleto cristalino muy fino del orden de unos cuantos nanómetros hasta ser un arreglo ordenado de macroporos cuyo diámetro es superior a 50 nm. Debido a que la reacción electroquímica depende de la densidad de portadores de carga positivos, la resistividad eléctrica del sustrato de c-Si determina el tipo de estructura del SP. Así por ejemplo, en el SP producido a partir de sustratos de c-Si del tipo n con una resistividad de 1-10 Ω -cm, el espesor del esqueleto es del orden de 5-10 nm. Como consecuencia hay efectos de confinamiento cuántico dentro del esqueleto que abren la brecha energética del silicio, dando lugar a una emisión luminiscente. En cambio, en el SP producido a partir de sustratos de c-Si tipo p con una resistividad de 10^{-2} a 10^{-3} Ω -cm, el espesor del esqueleto es del orden de 10-20 nm. Este presenta una emisión luminiscente baja y sólo en el infrarrojo, pero se puede variar la porosidad, y con ello el índice de refracción, en un amplio rango para crear estructuras fotónicas de multicapas (Pavesi, 1997; Ariza-Flores *et al.*, 2011a, 2012, 2014; Puente-Díaz *et al.*, 2020; Castillo-Gallardo *et al.*, 2021).

La síntesis de multicapas de SP se basa en el hecho de que el ataque electroquímico es un proceso autolimitado y sólo ocurre en la profundidad de los poros donde hay mayor concentración de huecos. Es decir, en la región donde ya se han formado los poros, un cambio en la corriente de anodizado no altera la estructura ya formada del mismo. Al alternar la densidad de corriente durante el ataque electroquímico se produce un perfil de índices de refracción de acuerdo a la secuencia de capas requerida para crear estructuras fotónicas. De esta forma, al incrementar/disminuir la densidad de corriente se provoca un incremento/disminución de la porosidad (Zhang, 2003), correspondiente a disminuir/incrementar el índice de refracción de la muestra. Por otro lado, al incrementar/disminuir el tiempo de anodizado, se obtienen estructuras de mayor/menor espesor (Behzad *et al.*, 2012).

De esta manera, para fabricar estructuras multicapas, basta con variar la densidad de corriente cada determinado tiempo, como se muestra en la fig. 5. Para cada valor de la corriente se forma una capa porosa de un determinado espesor físico. Este proceso nos permite obtener capas de distintos índices de refracción, que conforman una estructura fotónica unidimensional.

II.3.1. Proceso de fabricación del SP

Como mencionamos arriba, existe una técnica simple y económica para la fabricación del SP, basada en la anodización electroquímica de obleas de c-Si en una solución de HF (Smith and Collins, 1992). En la fig. 6(a) se describe el proceso de fabricación del SP. Primero, se corta una oblea de c-Si en pedazos de aproximadamente $2 \times 2 \text{ cm}^2$. Enseguida, se remueve la capa de óxido de las superficies de la oblea cortada. Para ello, se sumerge en una solución diluida de HF al 2 % volumen a volumen (v/v) durante 20

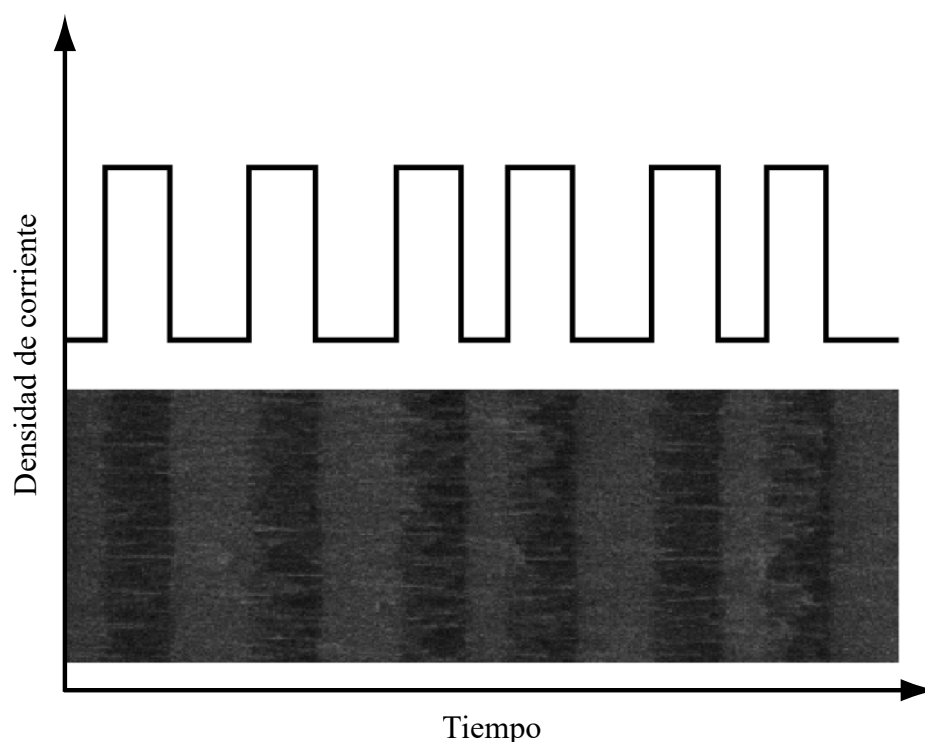


Figura 5. Densidad de corriente como función del tiempo de aplicación para la fabricación de estructuras multicapas de SP (Ariza-Flores, 2013) y micrografía de la estructura resultante.

minutos (Beale *et al.*, 1985). Enseguida, se lava con jabón neutro y se enjuaga con agua destilada. Después, se limpia con líquido para limpiar lentes, retirando así cualquier partícula de polvo. Posteriormente, se sumerge nuevamente en una nueva solución de HF al 2 % v/v, durante 5 minutos. Finalmente, se seca cuidadosamente con un paño muy suave para limpiar cristales. Una de las finalidades de remover la capa de óxido de la muestra es asegurar un buen contacto conductor-semiconductor en las caras de la oblea. El siguiente paso, es la preparación de la solución electrolítica. El electrolito es una solución de HF (al 48 % en peso) y etanol (al 99.9 % en peso), en proporción 1:1 v/v. La solución es indispensable para remover el silicio al interior del poro. La reacción electroquímica se lleva a cabo en una celda de teflón, ya que el teflón, es uno de los pocos materiales que no reaccionan con el HF (ver figs. 6(b) y (c)) y sirve como contenedor para llevar a cabo un proceso electroquímico sin degradarse. En la parte

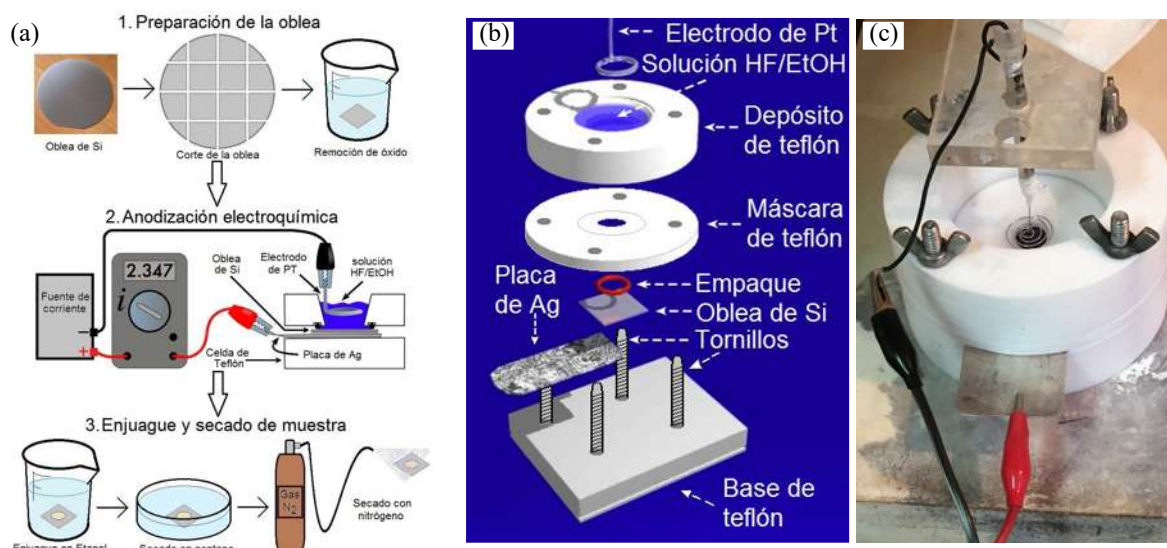


Figura 6. (a) Proceso de fabricación de muestras de SP (ver texto), (b) esquema de la celda electroquímica desarmada (Ariza-Flores, 2013) y (c) montaje de la celda electroquímica real.

superior, se coloca el cátodo, un electrodo de platino que proporciona electrones a la reacción. La celda consta de una base de teflón en la cual se colocan unos tornillos que sujetan al sistema. Sobre la base, se coloca una placa de plata que sirve como ánodo. Sobre la placa se coloca la oblea de Si, previamente limpiada. La placa hace un buen contacto eléctrico con la superficie inferior de la oblea. En la superficie superior de la oblea se coloca una máscara junto con un empaque para evitar que se derrame la solución y que sólo ataque un área controlada. Por arriba de la máscara, se encuentra un depósito de teflón que hace contacto con la máscara y contiene el electrolito de HF/Etanol. Todo el sistema es sujetado por los tornillos en la base, que atraviesan hasta el depósito de teflón y son sujetados por cuatro tuercas (ver figs. 6(b) y (c)). Finalmente, se introduce el electrodo de platino en la solución, a una altura constante y paralela a la cara de la muestra.

Al término del ataque electroquímico descrito en la sección II.3. es necesario desmontar la celda y secarla. Al retirar la muestra, es necesario colocarla inmediatamente en

una solución de etanol al 99.9 % para enjuagarla y lavarla. De esta manera, se retira la mayor cantidad de residuos de HF. Posteriormente, se seca con un flujo constante de nitrógeno gaseoso, el cual evapora el etanol y desplaza cualquier partícula de polvo que pudiera depositarse del medio ambiente.

Para modelar las propiedades macroscópicas de nuestros sistemas multicapas de SP, estudiados en este trabajo, usamos la fórmula de Bruggeman. La fórmula describe a un medio compuesto como si fuera un material homogéneo que responde al campo electromagnético mediante una respuesta macroscópica efectiva y resulta útil para sistemas estructurados de dos o más componentes. Dicha teoría se presenta en la siguiente subsección.

II.3.2. Teoría de medio efectivo

La teoría de medio efectivo (TME) es un modelo que permite calcular las propiedades macroscópicas de un medio compuesto a partir de las propiedades y fracciones de cada uno de sus componentes. Existen diversas aproximaciones para un medio efectivo (Bruggeman, 1935; Looyenga, 1965; Datta *et al.*, 1993), las cuales describen al medio compuesto como si fuera un material homogéneo que responde al campo electromagnético mediante una respuesta macroscópica efectiva, en la cual se incorporan los efectos relevantes del comportamiento microscópico de la estructura. Dentro de estas aproximaciones, la fórmula de Bruggeman (Bruggeman, 1935; Pap *et al.*, 2006) es muy común en sistemas experimentales como es el SP.

En este trabajo describimos la TME como se hizo en los trabajos de Bruggeman (Bruggeman, 1935), Landauer (Landauer, 1952) y Bergman (Bergman and Stroud,

1992), en los cuales se considera al medio efectivo como una mezcla de dos tipos de granos compactos distribuidos de forma aleatoria, a los cuales los denotamos por A y B, como se muestra en la fig. 7(a), con fracciones de volumen $f_A = f$ y $f_B = 1 - f$, respectivamente y caracterizados por diferentes conductividades σ_A y σ_B . Queremos calcular la conductividad efectiva σ_e de este compuesto. Para lograr esto, imaginamos que cada grano, en lugar de estar embebido en su entorno aleatorio real, está embebido en un medio efectivo homogéneo de conductividad σ_e , como se muestra en la fig. 7(b), donde aproximamos a cada grano como si tuviera una forma esférica. De esta manera,

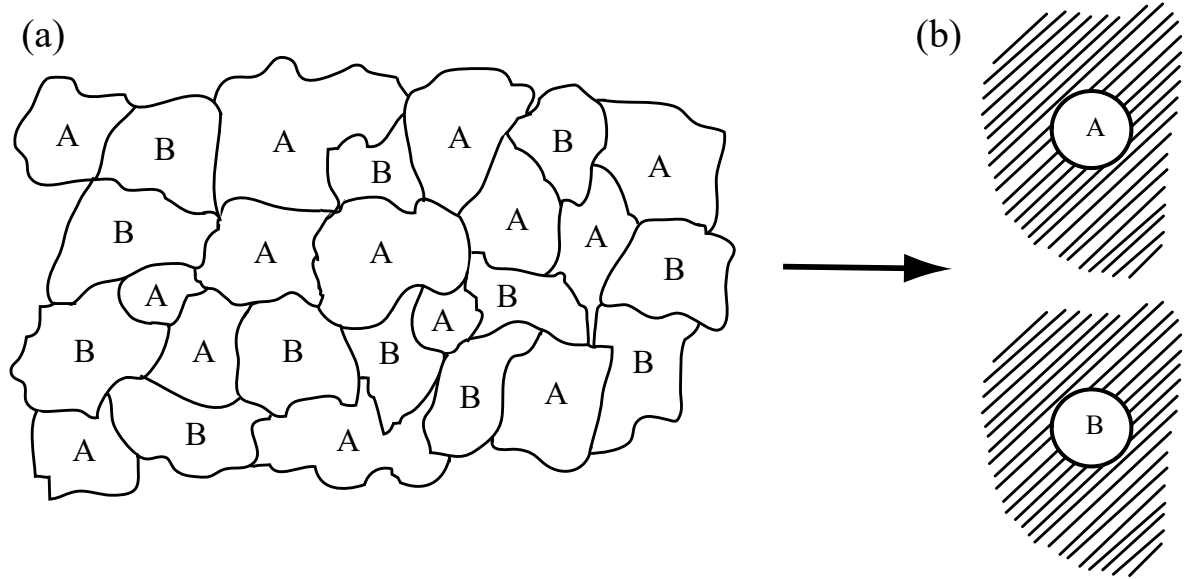


Figura 7. (a) Diagrama de un compuesto de dos componentes formado por granos compactos distribuidos de forma aleatoria denotados A y B, con conductividades σ_A y σ_B . (b) Ilustración del procedimiento de incrustación adoptada en la TME. Suponemos cada grano como si tuviera una forma esférica y estuviera embebido, no en su entorno real, sino en un entorno efectivo con medio de conductividad σ_e .

la conductividad del medio efectivo σ_e estaría definida como

$$\langle \mathbf{J} \rangle = \sigma_e \langle \mathbf{E} \rangle, \quad (6)$$

donde los paréntesis indican promedios de volumen.

Al suponer que los granos son esféricos, el campo eléctrico y la corriente dentro del

grano $i = A$ o B son uniformes y vienen dadas por un resultado de la electrostática,

$$\mathbf{E}_{\text{interior},i} = \left(\frac{3\sigma_e}{2\sigma_e + \sigma_i} \right) \mathbf{E}_{\text{externo}}, \quad (7)$$

$$\mathbf{J}_{\text{interior},i} = \sigma_i \mathbf{E}_{\text{interior},i}, \quad (8)$$

donde $\mathbf{E}_{\text{externo}}$ es el campo externo. Los promedios $\langle \mathbf{E} \rangle$ y $\langle \mathbf{J} \rangle$ están dados por

$$\langle \mathbf{E} \rangle = \sum_i f_i \mathbf{E}_{\text{interior},i}, \quad (9)$$

$$\langle \mathbf{J} \rangle = \sum_i f_i \mathbf{J}_{\text{interior},i}, \quad (10)$$

por lo que usar la ec. (6) nos lleva a

$$\sum_i f_i \frac{\sigma_e - \sigma_i}{2\sigma_e + \sigma_i} = 0. \quad (11)$$

En el caso de dos componentes, el resultado se reduce a

$$f_A \frac{\sigma_e - \sigma_A}{2\sigma_e + \sigma_A} + f_B \frac{\sigma_e - \sigma_B}{2\sigma_e + \sigma_B} = 0. \quad (12)$$

La ec. (11) se puede reorganizar para dar a la TME un origen físico aparentemente diferente. La podemos escribir como

$$\langle \mathbf{P} \rangle = 0, \quad (13)$$

donde

$$\mathbf{P} = \frac{i}{\omega} (\mathbf{J} - \sigma_e \mathbf{E}), \quad (14)$$

es la polarización extra de cada medio respecto a la del medio efectivo. De acuerdo con la ec. (13), σ_e está determinada por la condición de que el promedio espacial de $\mathbf{P}$ desaparezca. En la TME, $\mathbf{P}$ se aproxima en la i -ésima celda por

$$\begin{aligned} -i\omega \mathbf{P}_i &= \mathbf{J}_{\text{interior},i} - \sigma_e \mathbf{E}_{\text{interior},i} \\ &= (\sigma_i - \sigma_e) \left(\frac{3\sigma_e}{2\sigma_e + \sigma_i} \right) \mathbf{E}_{\text{externo}}, \end{aligned} \quad (15)$$

por lo que al establecer el promedio de esta cantidad igual a cero nos da la ec. (11). La ec. (11) puede resolverse fácilmente para la conductividad del medio efectivo σ_e en función de su composición, la cual nos da la ecuación cuadrática a resolver

$$2\sigma_e^2 - [\sigma_A(2f_A - f_B) + \sigma_B(2f_B - f_A)]\sigma_e - \sigma_A\sigma_B = 0, \quad (16)$$

cuya solución es

$$\sigma_e = \frac{1}{4} \left(\eta \pm [\eta^2 + 8\sigma_A\sigma_B]^{\frac{1}{2}} \right), \quad (17)$$

donde $\eta = \sigma_A(2f_A - f_B) + \sigma_B(2f_B - f_A)$. La solución física de la ecuación cuadrática se puede determinar a partir de los requisitos de positividad de σ_e . La conductividad de un material compuesto en función de f es de particular interés en dos casos especiales, uno es el límite cuando $\sigma_B = 0$ y σ_A es finito, el cual corresponde a un compuesto aislante-metal y el otro cuando σ_B es finito y $\sigma_A \rightarrow \infty$, correspondiente a un compuesto de metal y conductor perfecto. En estos casos, como señaló por primera vez Landauer (Landauer, 1952), la TME predice que σ_e tiene propiedades singulares cerca de un umbral de percolación en $f = f_c \equiv 1/3$. En el primer caso, se encuentra

$$\sigma_e = \begin{cases} 0 & f < f_c, \\ \frac{3}{2}\sigma_A(f - f_c) & f > f_c, \end{cases} \quad (18)$$

y en el segundo caso,

$$\sigma_e = \begin{cases} \frac{1}{3}\sigma_B(f_c - f)^{-1} & f < f_c, \\ \infty & f > f_c. \end{cases} \quad (19)$$

El valor $f_c = 1/3$ tiene una interpretación física natural: es el umbral de conectividad, por encima del cual hay una ruta conectada del material A que se extiende por toda la muestra. La TME predice que para los granos aproximadamente esféricos $f_c = 1/3$. En general, en d dimensiones y granos compactos, se encuentra que la TME predice $f_c =$

$1/d$. Para otras formas de granos, o para una distribución de formas, las predicciones de la TME pueden variar ampliamente (Stroud, 1975).

La TME no se limita únicamente a la conductividad eléctrica de un conductor no homogéneo. De hecho, se aplica a cualquier coeficiente de transporte efectivo que conecte un campo irrotacional con una densidad de corriente libre de divergencias. En el caso de la conductividad eléctrica, estas cantidades son el campo eléctrico y la densidad de corriente eléctrica, pero se pueden escribir muchos otros casos matemáticamente equivalentes.

La TME también se puede generalizar a frecuencias finitas, siempre que los campos tengan longitudes de onda suficientemente grandes comparadas con la escala espacial de las inhomogeneidades del medio compuesto. El requisito físico es que los campos eléctricos y los desplazamientos sean aproximadamente uniformes dentro de cualquier grano dado del medio no homogéneo. Para generalizar los resultados a frecuencia finita, se describe los componentes en términos de funciones dieléctricas complejas $\epsilon_A(\omega)$ y $\epsilon_B(\omega)$. Las funciones dieléctricas incluyen las densidades de corriente

$$\epsilon_j(\omega) = 1 + \frac{4\pi i}{\omega} \sigma_j(\omega), \quad (20)$$

donde $j = A$ o B . Aquí $\sigma_j(\omega)$ es la conductividad que surge de las cargas libres y del movimiento de las cargas de polarización. En la j -ésima componente, el campo eléctrico $\mathbf{E}$ y el desplazamiento $\mathbf{D}$ están relacionados por

$$\mathbf{D}(\omega) = \epsilon_j(\omega) \mathbf{E}(\omega). \quad (21)$$

Dado que en el caso cuasiestático, $\nabla \times \mathbf{E} = 0$ y $\nabla \cdot \mathbf{D} = 0$, se deduce que se pueden aplicar exactamente las mismas ecuaciones utilizadas para obtener σ_e para encontrar

ϵ_e en frecuencias finitas. En otras palabras, ϵ_e satisface

$$f \frac{\epsilon_e - \epsilon_A}{2\epsilon_e + \epsilon_A} + (1 - f) \frac{\epsilon_e - \epsilon_B}{2\epsilon_e + \epsilon_B} = 0. \quad (22)$$

La ec. (22) es llamada ecuación de Bruggeman para dos medios. Esta relaciona la constante dieléctrica efectiva ϵ_e con las constantes dieléctricas de cada medio: ϵ_A y ϵ_B .

Al aplicar la ecuación de Bruggeman al SP, el cual se puede representar por la mezcla de dos materiales (aire y silicio), se tendría:

$$p \frac{\epsilon_{SP} - \epsilon_{Aire}}{2\epsilon_{SP} + \epsilon_{Aire}} + (1 - p) \frac{\epsilon_{SP} - \epsilon_{Si}}{2\epsilon_{SP} + \epsilon_{Si}} = 0, \quad (23)$$

donde ϵ_{SP} , ϵ_{Si} , ϵ_{Aire} corresponden a las constantes dieléctricas del SP (medio efectivo), silicio y aire, respectivamente, y p es la porosidad de la estructura. Al usar la relación $n = \sqrt{\epsilon}$ para medios no magnéticos, la ec. (23) se puede reescribir como

$$p \frac{n_{SP}^2 - n_{Aire}^2}{2n_{SP}^2 + n_{Aire}^2} + (1 - p) \frac{n_{SP}^2 - n_{Si}^2}{2n_{SP}^2 + n_{Si}^2} = 0, \quad (24)$$

donde n_{SP} , n_{Si} , n_{Aire} corresponden a los índices de refracción del SP, silicio y aire, respectivamente. Haciendo un poco de álgebra con la ec. (24), ésta se puede expresar como

$$n_{SP}^4 + \frac{(3p - 2)n_{Si}^2 - (3p - 1)n_{Aire}^2}{2} n_{SP}^2 - \frac{(n_{Si}^2)(n_{Aire}^2)}{2} = 0, \quad (25)$$

cuya solución es

$$n_{SP} = \pm \frac{1}{2} \sqrt{-T_1 \pm \sqrt{8(n_{Si}^2)(n_{Aire}^2) + (T_1)^2}}, \quad (26)$$

donde $T_1 = (3p - 2)n_{Si}^2 - (3p - 1)n_{Aire}^2$. La solución física de la ec. (26) se puede determinar a partir de los requisitos de positividad de n_{SP} .

Capítulo III

MÉTODO DE LA MATRIZ DE TRANSFERENCIA

En este capítulo se presenta un breve desarrollo descriptivo del método de matriz de transferencia convencional para calcular las propiedades ópticas de una estructura multicapas. La cual podría estar hecha de repeticiones periódicas de una celda unitaria compuesta por dos capas alternadas con índices de refracción n_1 y n_2 o completamente aperiódicas donde el espesor de los sucesivos pares de capas aumenta gradualmente. Este método funciona bien para muchos sistemas. Sin embargo, para sistemas grandes que presentan disipación, se vuelve inestable de forma tal que los cálculos basados en él no son confiables. Para atacar este problema, presentamos dos métodos alternativos para lograr estabilidad numérica, confiabilidad y eficiencia computacional. Estos son: el uso de una matriz total para resolver los campos en todas las superficies simultáneamente y una expansión en los modos de Bloch de un sistema artificialmente repetido. Aplicamos estos métodos al cálculo del espectro de reflectancia de estructuras multicapas grandes aperiódicas trinadas (*chirped*) y estructuras multicapas que

consisten en el apilamiento de reflectores entonados a distintas longitudes de onda.

III.1. Método convencional

Consideremos un sistema compuesto de N capas de ancho d_j e índice de refracción n_j siendo $j = 1, \dots, N$, como se muestra en la fig. 8, con interfaces paralelas al plano xy y apiladas a lo largo de la dirección z . La propagación de una onda electromagnética en

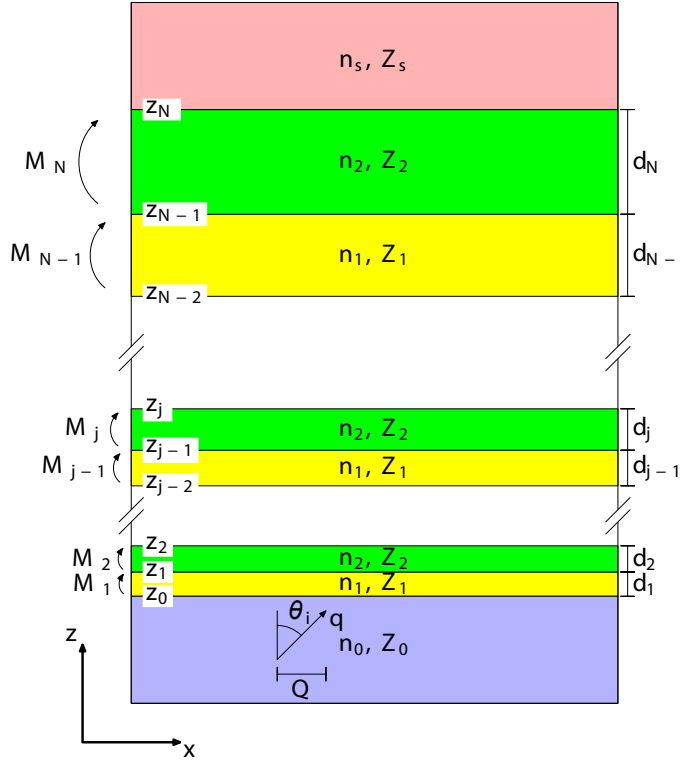


Figura 8. Sistema multicapa compuesto por N capas numeradas por $j = 1 \dots N$ con anchos d_j y caracterizadas por una matriz de transferencia M_j . El sistema está compuesto por dos materiales alternados con índices de refracción n_1 y n_2 depositados sobre un sustrato con índice de refracción n_s y se ilumina desde el ambiente con índice de refracción n_0 que tomamos como vacío ($n_0 = 1$). Todas las interfaces se encuentran en el plano xy , el eje de la estructura está a lo largo de z y tomamos zx como plano de incidencia. Indicamos la altura z_j de cada interfaz, el vector de onda del campo incidente con número de onda $q = \omega/c = 2\pi/\lambda$, el ángulo de incidencia θ_i , la proyección paralela $Q = q \sin \theta_i$ y las impedancias de superficie para las polarizaciones TE y TM, dadas por $Z_j = q/k_j$ y $Z_j = k_j/q\epsilon_j$, respectivamente.

este sistema, puede describirse mediante una matriz de transferencia 2×2 ,

$$\mathbf{M} = \mathbf{M}_N \mathbf{M}_{N-1} \dots \mathbf{M}_2 \mathbf{M}_1, \quad (27)$$

que relaciona las componentes paralelas a las interfaces de los campos eléctricos y magnéticos, $E_{\parallel}$ y $H_{\parallel}$, a través de la estructura,

$$\begin{pmatrix} E_{\parallel} \\ H_{\parallel} \end{pmatrix}_{z_N} = \mathbf{M} \begin{pmatrix} E_{\parallel} \\ H_{\parallel} \end{pmatrix}_{z_0}, \quad (28)$$

donde designamos por z_{j-1} y z_j a las interfaces de la capa j , z_0 corresponde a la interfaz con el ambiente de índice de refracción n_0 y z_N a la interfaz con el sustrato de índice de refracción $n_s = n_{N+1}$ y $\mathbf{M}_j$ relaciona los campos a través de la j -ésima capa, desde z_{j-1} a z_j ,

$$\begin{pmatrix} E_{\parallel} \\ H_{\parallel} \end{pmatrix}_{z_j} = \mathbf{M}_j \begin{pmatrix} E_{\parallel} \\ H_{\parallel} \end{pmatrix}_{z_{j-1}}, \quad (29)$$

y está dada por

$$\mathbf{M}_j = \begin{pmatrix} \cos k_j d_j & i Z_j \sin k_j d_j \\ i Y_j \sin k_j d_j & \cos k_j d_j \end{pmatrix}, \quad (30)$$

siendo

$$k_j = \sqrt{\epsilon_j q^2 - Q^2}, \quad (31)$$

la componente z del vector de onda para los campos que se mueven en la dirección z dentro de la j -ésima capa. Z_j es la impedancia superficial correspondiente, $Y_j = 1/Z_j$ es la admitancia superficial, $\epsilon_j = n_j^2$ es la permitividad eléctrica (por simplicidad, asumimos que todos los medios son no magnéticos, con permeabilidad $\mu_j = 1$), $q = \omega/c = 2\pi/\lambda$ es el número de onda de espacio libre correspondiente a la longitud de onda λ y Q es la proyección del vector de onda sobre las interfaces, el cual se conserva de acuerdo con la ley de Snell y la ley de reflexión, $Q = n_0 q \sin \theta_i$, donde θ_i es el ángulo

de incidencia. Las impedancias de superficie definidas por $Z_j = E_{\parallel}(z_j)/H_{\parallel}(z_j)$, dentro de la j -ésima capa están dadas por $Z_j = q/k_j$ para la polarización TE y $Z_j = k_j/q\epsilon_j$ para la polarización TM.

Podemos escribir los campos en el ambiente, en z_0^- , en términos de una onda incidente, cuya amplitud normalizamos a 1, y una onda reflejada, con amplitud r , como

$$E_{\parallel}(z_0) = \begin{cases} 1 + r & \text{(TE)} \\ Z_0(1 - r) & \text{(TM)} \end{cases}, \quad H_{\parallel}(z_0) = \begin{cases} Y_0(1 - r) & \text{(TE)} \\ 1 + r & \text{(TM)} \end{cases}, \quad (32)$$

y escribir los campos en el sustrato en z_N^+ , en términos de una onda transmitida de amplitud t ,

$$E_{\parallel}(z_N) = \begin{cases} t & \text{(TE)} \\ Z_s t & \text{(TM)} \end{cases}, \quad H_{\parallel}(z_N) = \begin{cases} Y_s t & \text{(TE)} \\ t & \text{(TM)} \end{cases}. \quad (33)$$

La ec. (28) se convierte entonces en un sistema de dos ecuaciones que pueden resolverse para las dos incógnitas, las amplitudes de reflexión y transmisión r y t , respectivamente.

III.2. Uso de la matriz extendida o completa

El procedimiento anterior es muy simple, eficiente y funciona bien para muchos sistemas. Sin embargo, en los casos de capas absorbentes, para las cuales ϵ_j tiene una parte imaginaria, y para sistemas metálicos o justo por encima de una resonancia para sistemas dieléctricos, para los cuales ϵ_j puede ser negativa, las componentes del vector de onda k_j pueden volverse complejas. Este puede ser el caso, incluso para sistemas transparentes si Q fuese tan grande que los argumentos de las raíces cuadradas en la ec. (31) se volviesen negativos. En estos casos, las funciones trigonométricas en la matriz de transferencia (ec. (30)) adquieren una contribución exponencial. Tras la multiplicación

de muchas de ellas para obtener la matriz de transferencia de todo el sistema (ec. (27)), todos los elementos de la matriz crecerían exponencialmente con el tamaño del sistema, produciendo matrices extremadamente mal condicionadas que pueden volverse inútiles para el cálculo preciso de las propiedades ópticas.

Notamos que, incluso cuando hay disipación, la matriz de transferencia de cada capa debe ser unimodular, $\det \mathbf{M}_j = 1$ (Pérez-Alvarez and Garcia-Moliner, 2004). Por lo tanto, $\mathbf{M}$ también debe ser unimodular y sus dos valores propios, deben ser mutuamente inversos. Sin embargo, en presencia de disipación, todos los elementos de la matriz de transferencia serían grandes. Por lo tanto, debería haber una cancelación exquisita de términos grandes en el determinante para producir el valor 1. Un pequeño ruido numérico destruiría esta cancelación e impediría el cálculo exacto del valor propio más pequeño.

Una alternativa al procedimiento anterior es utilizar una matriz extendida o completa de $2N \times 2N$ (Pérez-Alvarez and Garcia-Moliner, 2004) en lugar de una única matriz de transferencia de 2×2 , para resolver simultáneamente el conjunto de N ecuaciones de 2×2 (ec. 29) junto con las ecs. (32) y (33) para r , t , y los campos $E_{\parallel}(z_j)$ y $H_{\parallel}(z_j)$ en todas las interfaces internas $j = 1, \dots, N - 1$. De este modo, resolvemos una ecuación de la forma

$$\mathbf{L}\mathbf{F} = \mathbf{I}, \quad (34)$$

donde

$$\mathbf{F} = (r, E_{\parallel}(z_1), H_{\parallel}(z_1), \dots, E_{\parallel}(z_{N-1}), H_{\parallel}(z_{N-1}), t)^T, \quad (35)$$

contiene información sobre el campo en todas partes dentro de la estructura,

$$\mathbf{I} = (I_1, I_2, \dots, 0, 0)^T, \quad (36)$$

es el término inhomogéneo de la ecuación, con

$$I_1 = \begin{cases} -(m_{11}^1 + (Y_0)m_{12}^1), & \text{(TE)} \\ -Z_0(m_{11}^1 + (Y_0)m_{12}^1), & \text{(TM)} \end{cases} \quad I_2 = \begin{cases} -(m_{21}^1 + (Y_0)m_{22}^1), & \text{(TE)} \\ -Z_0(m_{21}^1 + (Y_0)m_{22}^1), & \text{(TM)} \end{cases} \quad (37)$$

y

$$\mathbf{L} = \begin{pmatrix} L_{11} & -1 & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 \\ L_{21} & 0 & -1 & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 \\ 0 & m_{11}^2 & m_{12}^2 & -1 & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ 0 & m_{21}^2 & m_{22}^2 & 0 & -1 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & m_{11}^{N-1} & m_{12}^{N-1} & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & m_{21}^{N-1} & m_{22}^{N-1} & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & m_{11}^N & m_{12}^N & L_{(2N-1)(2N)} \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & m_{21}^N & m_{22}^N & L_{(2N)(2N)} \end{pmatrix}, \quad (38)$$

es una matriz grande, tridiagonal por bloques, que acopla los componentes del campo entre sí. Aquí, el superíndice T denota la transpuesta de una matriz. En estas expresiones, hemos indicado los elementos de la matriz de transferencia $\mathbf{M}_j$ de la capa

j -ésima, $j = 1, \dots, N$ (ec. (30)), por m_{lr}^j con $l, r = 1, 2$ e introducimos las cantidades

$$L_{11} = \begin{cases} m_{11}^1 - (Y_0)m_{12}^1, & (\text{TE}) \\ -Z_0(m_{11}^1 - (Y_0)m_{12}^1), & (\text{TM}) \end{cases} \quad (39)$$

$$L_{21} = \begin{cases} m_{21}^1 - (Y_0)m_{22}^1, & (\text{TE}) \\ -Z_0(m_{21}^1 - (Y_0)m_{22}^1), & (\text{TM}) \end{cases}$$

$$L_{(2N-1)(2N)} = \begin{cases} -1, & (\text{TE}) \\ -Z_s, & (\text{TM}) \end{cases} \quad (40)$$

$$L_{(2N)(2N)} = \begin{cases} -Y_s, & (\text{TE}) \\ -1. & (\text{TM}) \end{cases} \quad (41)$$

Se pueden emplear muchos métodos estándar para resolver la ec. (34), como los métodos de eliminación de Gauss (Stoer and Bulirsch, 1993; Olschowka and Neumaier, 1996), Gauss-Jordan (Stoer and Bulirsch, 1993; Wilkinson and Reinsch, 1971), Choleski (Stoer and Bulirsch, 1993; Kershaw, 1978), Gradiente Conjugado (Stoer and Bulirsch, 1993; Wilkinson and Reinsch, 1971; Hestenes and Stiefel, 1952), residual mínimo generalizado (Stoer and Bulirsch, 1993; Saad and Schultz, 1986), etc. Algunos pueden aprovechar la escasez y la tridiagonalidad por bloques de la matriz de coeficientes (ec. (38)), mientras que otros no. En cualquier caso, estos métodos incluyen estrategias de pivoteo para elegir juiciosamente la secuencia de pasos a seguir para simplificar el sistema de ecuaciones, con el fin de estabilizar numéricamente el procedimiento de solución.

El formalismo habitual de la matriz de transferencia es equivalente a una eliminación inmediata de todos los campos $E_{\parallel}(z_j)$ y $H_{\parallel}(z_j)$, $j = 1, \dots, N - 1$, que a priori, puede

no ser la mejor estrategia con respecto a la estabilidad numérica de la solución. Por esta razón, esperamos que las soluciones de la ec. (34) puedan obtenerse con precisión en sistemas para los que las ecs. (28), (32) y (33) no es posible.

III.3. Método alternativo: expansión en los modos de Bloch de un sistema artificialmente repetido

En la subsección anterior presentamos un método para obtener los coeficientes ópticos de una estructura multicapas junto con los campos en todas sus interfaces, que esperamos sea más estable que el método común de matriz de transferencia. Sin embargo, implica un recurso computacional mucho mayor. Esto puede no representar un recurso computacional significativo para un sólo cálculo, pero puede ser importante, por ejemplo, al modelar una estructura optimizada a través de un procedimiento de minimización que requiere que se calculen los espectros completos para todos los conjuntos de parámetros de cierto diseño. Por esta razón, en esta subsección desarrollamos un método alternativo. Con este fin, tomamos el sistema multicapas completo de la fig. 8 (las capas $j = 1, \dots, N$, y las replicamos periódicamente, para formar un cristal fotónico artificial). Entonces, podemos describir los modos normales de esta estructura, los cuales, de acuerdo al teorema de Bloch para un sistema periódico, pueden escribirse como una superposición de ondas de Bloch, cada una de las cuales adquiere un *factor de fase* a medida que se propaga de un periodo al siguiente. Por lo tanto, cada onda de Bloch obedecería la expresión

$$\begin{pmatrix} E_{\parallel}^{\pm} \\ H_{\parallel}^{\pm} \end{pmatrix}_{z_N} = \mathbf{M} \begin{pmatrix} E_{\parallel}^{\pm} \\ H_{\parallel}^{\pm} \end{pmatrix}_{z_0} = e^{\pm iPD} \begin{pmatrix} E_{\parallel}^{\pm} \\ H_{\parallel}^{\pm} \end{pmatrix}_{z_0}, \quad (42)$$

donde $D = z_N - z_0$ es el periodo, que corresponde al espesor real del sistema multicapas y $\pm P$ representa un vector de Bloch en 1D, correspondiente a una onda que se propaga a lo largo de la dirección $\pm z$ (Pérez-Huerta *et al.*, 2018; Mochán *et al.*, 1987; Mochán and del Castillo-Mussot, 1988). Así, $\Lambda_{\pm} = e^{\pm iPD}$ son los valores propios de la matriz de transferencia $\mathbf{M}$ y $E_{\parallel}^{\pm}$ y $H_{\parallel}^{\pm}$, son los vectores propios correspondientes. Hemos utilizado el hecho de que el $\det \mathbf{M} = 1$ exactamente, de modo que el producto de los valores propios debería ser $\Lambda_+ \Lambda_- = 1$ y la relación de dispersión de los modos Bloch se puede obtener en principio de

$$\cos PD = \frac{1}{2} \text{tr } \mathbf{M}, \quad (43)$$

donde tr denota, la traza. Vale la pena mencionar que la ec. (43) puede obtenerse al resolver el problema de eigenvalores dado por la ec. (42).

Consideremos ahora un sistema finito de ancho MD , compuesto al apilar M periodos juntos sobre un sustrato. En este caso, se perdería la periodicidad y un sólo modo de Bloch, no resolvería el problema de la onda electromagnética. Sin embargo, la onda de Bloch que se mueve hacia arriba se reflejaría hacia abajo en la interfaz con el sustrato, y una onda de Bloch que se mueve hacia abajo se reflejaría hacia arriba, en la interfaz con el ambiente. Por lo tanto, las propiedades ópticas de un sistema finito pueden obtenerse considerando una onda entrante desde el ambiente, una onda reflejada hacia el ambiente, una onda transmitida hacia el sustrato y dos ondas de Bloch, dentro del sistema multicapas: una moviéndose hacia arriba y otra moviéndose hacia abajo, como se ilustra en la fig. 9 para el caso extremo de sólo un periodo $M = 1$, que es el caso que analizamos a continuación. La continuidad de $E_{\parallel}$ y $H_{\parallel}$ conduce a dos ecuaciones en cada interfaz, con las cuales podemos obtener las cuatro incógnitas, a saber: r , t y las amplitudes de ambas ondas de Bloch. Notemos que para un sistema infinito, el vector de Bloch P debería ser real, ya que la onda de Bloch de otra manera, divergiría cuando

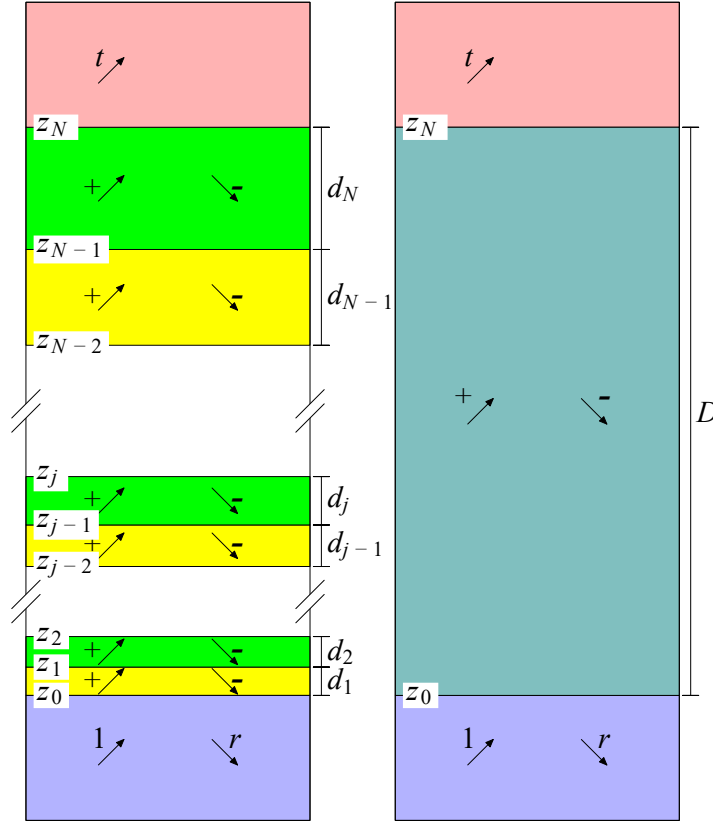


Figura 9. Una onda de amplitud 1 incide desde el ambiente hacia la superficie de un sistema multicapas, donde se refleja parcialmente en el ambiente y se transmite hacia el sustrato. Dentro de cada capa hay ondas que se propagan hacia arriba (+) y hacia abajo (-). El sistema multicapas puede ser reemplazado por una capa ancha efectiva, correspondiente a un periodo de un sistema periódicamente repetido, dentro de la cual hay una onda Bloch propagándose hacia arriba y otra propagándose hacia abajo. Los coeficientes ópticos r y t y las amplitudes de las ondas de Bloch se pueden obtener aplicando condiciones de frontera para $E_{\parallel}$ y $H_{\parallel}$ en z_0 y z_N .

$z \rightarrow \infty$ o $z \rightarrow -\infty$. Sin embargo, para un sistema finito, podemos permitir que P sea complejo.

En presencia de incluso una muy pequeña disipación, las ondas de Bloch deberían decaer a medida que se propagan. Por lo tanto, identificamos el valor propio del modo que se mueve hacia arriba por $\Lambda_+ = e^{iPD}$ como el que obedece $|\Lambda_+| < 1$, correspondiente a $\text{Im } P > 0$, agregando una cantidad insignificante de disipación si es necesario, para

evitar los casos $|\Lambda_+| = 1$. Similarmente, la onda que se mueve hacia abajo obedece

$$|\Lambda_-| > 1. \quad (44)$$

Podemos evitar los problemas de inestabilidad numérica discutidos anteriormente si primero identificamos el valor propio de la onda que se mueve hacia abajo

$$\Lambda_- = \frac{1}{2} \text{tr} \mathbf{M} \pm i \sqrt{1 - (\text{tr} \mathbf{M} / 2)^2}, \quad (45)$$

donde elegimos el signo de manera que obedezca la ec. (44) y luego, obtenemos el valor propio de la onda que se mueve hacia arriba,

$$\Lambda_+ = \frac{1}{\Lambda_-}. \quad (46)$$

Siguiendo este procedimiento, evitamos las cancelaciones que amplifican el ruido numérico y obtenemos valores propios que son consistentes, con la unimodularidad exacta de la matriz de transferencia.

Habiendo obtenido los valores propios $\Lambda_{\pm}$ de la matriz de transferencia, podemos obtener los vectores propios correspondientes $E_{\parallel}^{\pm}$ y $H_{\parallel}^{\pm}$ a partir de la ec. (42), y de ellos, las impedancias superficiales correspondientes:

$$Z^{\pm} = -\frac{M_{12}}{M_{11} - \Lambda_{\pm}}, \quad (47)$$

donde M_{ij} son elementos de la matriz de transferencia $\mathbf{M}$. Al escribir los campos en z_0 y z_N como una superposición de los campos propagándose (o decayendo) hacia arriba y hacia abajo $E_{\parallel}^{\pm} = Z^{\pm} H_{\parallel}^{\pm}$, podemos relacionar los campos en z_N con los campos en z_0 , a través de una matriz de transferencia *reconstruida*,

$$\begin{pmatrix} E_{\parallel} \\ H_{\parallel} \end{pmatrix}_{z_N} = \tilde{\mathbf{M}} \begin{pmatrix} E_{\parallel} \\ H_{\parallel} \end{pmatrix}_{z_0}, \quad (48)$$

donde

$$\tilde{\mathbf{M}} = \frac{1}{Z^+ - Z^-} \begin{pmatrix} Z^+ e^{iPD} - Z^- e^{-iPD} & -2iZ^+ Z^- \sin PD \\ 2i \sin PD & Z^+ e^{-iPD} - Z^- e^{iPD} \end{pmatrix}. \quad (49)$$

Para un cálculo exacto, esta matriz sería idéntica a la de la ec. (27) y ambos serían unimodulares, pero para un cálculo numérico real esperamos que esta matriz cumpla mejor con la unimodularidad.

Como ejemplo simple, se considera un espejo de Bragg formado por N capas alternas de dieléctricos transparentes con índices de refracción $n_1 = 2$ y $n_2 = 4$ y anchos $d_1 = \lambda_0/4n_1$ y $d_2 = \lambda_0/4n_2$, sintonizados a cierta longitud de onda λ_0 . En la fig. 10 mostramos los elementos M_{ij} de la matriz de transferencia, calculada para incidencia normal a partir de la ec. (27) para una longitud de onda ligeramente descentrada $\lambda = 0.9999\lambda_0$ para un número diferente de capas N . También mostramos, los corres-

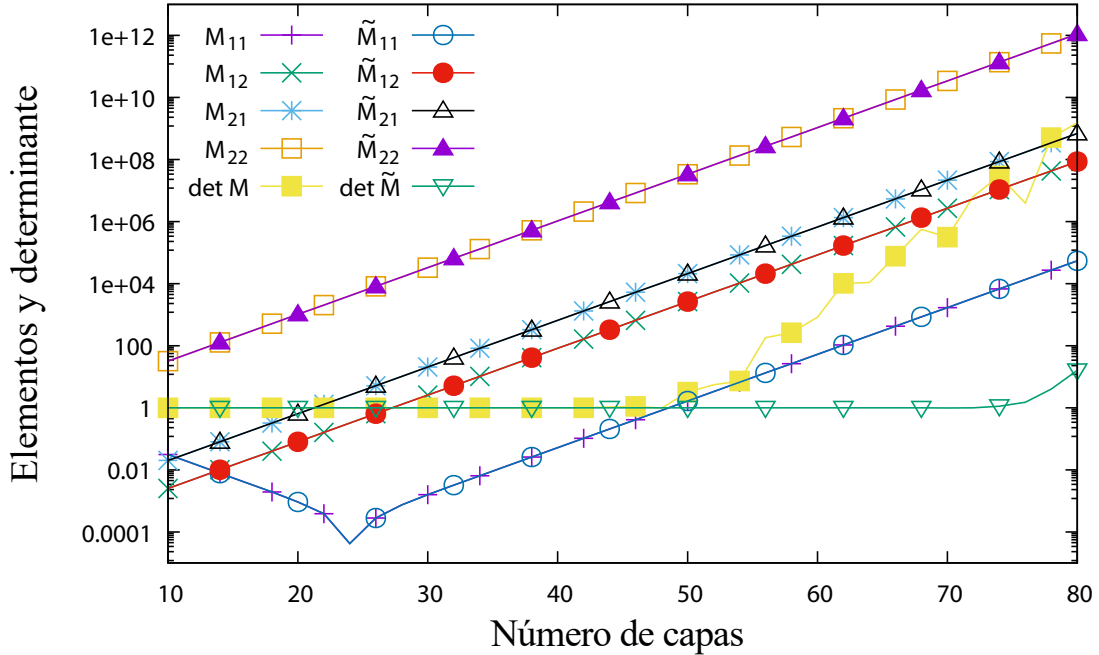


Figura 10. Elementos de la matriz y determinante de la matriz de transferencia $\mathbf{M}$ y la matriz de transferencia reconstruida $\tilde{\mathbf{M}}$ para un espejo de Bragg formado por dos capas alternas de índices $n_1 = 2$ y $n_2 = 4$ de anchos $d_1 = \lambda_0/4n_1$ y $d_2 = \lambda_0/4n_2$ calculado en $\lambda = 0.9999\lambda_0$ para incidencia normal.

pondientes elementos $\tilde{M}_{ij}$ de la matriz de transferencia reconstruida. Como estamos calculando dentro de una brecha fotónica, los elementos de la matriz de transferencia alcanzan valores muy altos. Sin embargo, no parece haber una diferencia discernible entre los elementos de las matrices de transferencia original y reconstruida $\mathbf{M}$ y $\tilde{\mathbf{M}}$. Sin embargo, para sistemas mayores de $N \sim 50$ capas, el determinante de la matriz original, calculado con precisión simple, se desvía fuertemente en varios órdenes de magnitud del valor esperado 1, debido a la acumulación de errores de redondeo. Por otro lado, el determinante de la matriz reconstruida permanece cercano al valor nominal para N hasta alrededor de 75 capas, donde comienza a desviarse debido a errores de redondeo *no acumulativos*. Como se muestra a continuación, la matriz reconstruida puede usarse para calcular propiedades ópticas para sistemas aún más amplios.

El resultado anterior dado por las ecs. (48) y (49) puede generalizarse fácilmente a un sistema de MN capas compuestas por $M > 1$ repeticiones de una estructura arbitraria con N capas. Para ello, sólo es necesario interpretar $\mathbf{M}$ en las ecs. (43) y (45) como la matriz de transferencia de un periodo, y sustituir z_N por z_{MN} en la ec. (48) y D por MD en la ec. (49).

Finalmente, podemos resolver las ecs. (32), (33), (48) y (49) para obtener expresiones explícitas para los coeficientes ópticos:

$$r = \mp \frac{Z_0 \tilde{M}_{11} + \tilde{M}_{12} - Z_0 Z_s \tilde{M}_{21} - Z_s \tilde{M}_{22}}{Z_0 \tilde{M}_{11} - \tilde{M}_{12} - Z_0 Z_s \tilde{M}_{21} + Z_s \tilde{M}_{22}}, \quad (50)$$

y

$$t = \frac{2Z_\alpha}{Z_0 \tilde{M}_{11} - \tilde{M}_{12} - Z_0 Z_s \tilde{M}_{21} + Z_s \tilde{M}_{22}}, \quad (51)$$

donde elegimos el signo superior $-$ en la ec. (50) y el subíndice $\alpha = s$ en la ec. (51), para el caso de la polarización TE. Mientras que el signo inferior $+$ y el subíndice $\alpha = 0$, corresponden a la polarización TM. Como de costumbre, la reflectancia viene dada por

$R = |r|^2$ y la transmitancia por $T = \beta |t|^2$ con $\beta = \text{Re}(Z_0/Z_s)$, para el caso de la polarización TE y $\beta = \text{Re}(Z_s/Z_0)$, para el caso de la polarización TM.

Notamos que se puede factorizar y cancelar de la ec. (50) un factor posiblemente grande e^{-iPD} y que el término dominante cuando $\text{Im}(PD)$ es grande es

$$r \approx \pm \frac{Z^+ - Z_0}{Z^+ + Z_0}, \quad (52)$$

lo que coincide con el resultado para un sistema semi-infinito, ya que habría una contribución insignificante de la onda de Bloch reflejada en el sustrato. En este caso, puede ser suficiente usar una matriz de transferencia parcial,

$$\mathbf{M}' = \mathbf{M}_{N'} \mathbf{M}_{N'-1} \dots \mathbf{M}_2 \mathbf{M}_1, \quad (53)$$

con $N' < N$, pero lo suficientemente grande como para que $Z_{N'}$ esté más allá del alcance de la onda de Bloch, que se mueve hacia arriba.

III.4. Resultados

En las siguientes subsecciones se presentan los resultados obtenidos referentes al diseño y análisis del espectro de reflectancia de dos tipos de estructuras multicapas de SP tipo *chirped*. Para ello, se hace modelando el ancho de las sucesivas capas mediante expresiones analíticas con parámetros a determinar y por apilamiento de espejos tipo Bragg entonados a diferentes longitudes de onda. Al aplicar el método convencional de la matriz de transferencia, la matriz de transferencia extendida o completa y el de expansión de ondas de Bloch descritos en las secciones anteriores. Experimentalmente, se llevó a cabo la fabricación y caracterización (estructural y óptica) de estas estructuras, por lo que se muestra la comparación de los espectros de reflectancia calculados numéricamente con los resultados experimentales.

III.4.1. Diseño de superredes mediante un perfil continuo

En la fig. 11 mostramos los espectros de reflectancia calculados con los tres métodos discutidos anteriormente, para un sistema compuesto por $P = 101$ pares de capas de SP con porosidades alternadas $p_1 = 41 \%$ y $p_2 = 76 \%$ respectivamente, sobre un sustrato de Si. Los espesores d_{2k-1} y d_{2k} ($k = 1, \dots, P$) se eligieron para corresponder a una

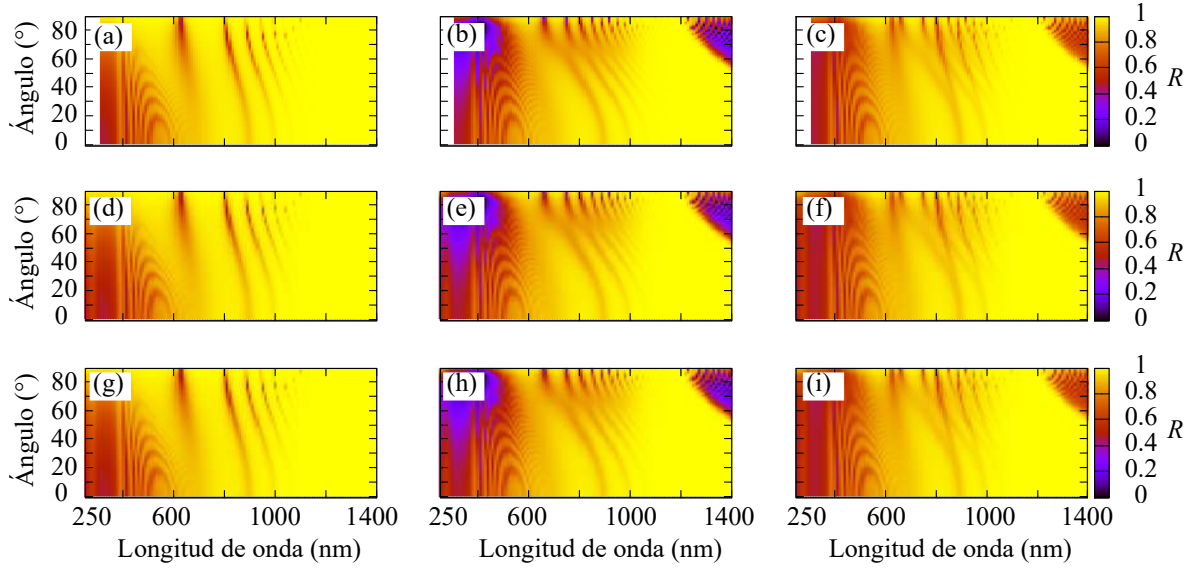


Figura 11. Espectros de reflectancia de una estructura de 101 pares de capas de SP, calculados en función del ángulo de incidencia θ_i y la longitud de onda λ utilizando (a)-(c) la matriz de transferencia, (d)-(f) la matriz extendida y (g)-(i) el método de expansión de Bloch para las polarizaciones TE (panel izquierdo) y TM (panel central), y para luz no polarizada (panel derecho). Las capas tienen porosidades de $p_1 = 41 \%$ y $p_2 = 76 \%$ y anchos obtenidos de las ecs. (54) y (55) eligiendo $\lambda_i = 400 \text{ nm}$, $\lambda_f = 1400 \text{ nm}$ y $\alpha = 0.35$.

placa de un cuarto de longitud de onda,

$$k_{2k-1}^* d_{2k-1} = k_{2k}^* d_{2k} = \pi/2, \quad (54)$$

como en un espejo Bragg (Bruyant *et al.*, 2003; Xifré-Pérez *et al.*, 2009), donde k_{2k-1}^* y k_{2k}^* se obtuvieron de la ec. (31) evaluados a una longitud de onda de diseño dependiente de la profundidad dada por (Ariza-Flores *et al.*, 2012)

$$\lambda_k^* = \lambda_i + (\lambda_f - \lambda_i) \left(\frac{k-1}{P-1} \right)^\alpha, \quad (55)$$

con longitud de onda inicial $\lambda_i = 400$ nm y longitud de onda final $\lambda_f = 1400$ nm. El valor del exponente $\alpha = 0.35$ fue elegido maximizando la reflectancia promediada sobre el rango de las longitudes de onda y el rango angular de 250 nm a 1400 nm y 0° a 89° , respectivamente. Para ese fin, utilizamos el método *simplex* de Nelder-Mead (Nelder and Mead, 1965; Lagarias *et al.*, 1998) a través del paquete MINUIT (James and Winkler, 2004). Este es un algoritmo de optimización simple, pero robusto y ampliamente utilizado. La reflectancia promedio óptima que obtuvimos fue de 0.91. La ec. (55) ha demostrado producir estructuras multicapas *chirped* con alta reflectancia en un amplio rango de frecuencias (Ariza-Flores *et al.*, 2012). La función descrita por la ec. (55) nos permite obtener una superred formada del apilamiento de distintas estructuras multicapas que sean buenos reflectores para distintas longitudes de onda. Es decir, la estructura se forma con los reflectores ultravioletas en la superficie, seguido de los visibles y seguido de los infrarrojos, pensando que la luz de cualquier color será reflejada a alguna profundidad. Los índices de refracción de las capas de SP se obtuvieron para cada longitud de onda, utilizando la teoría del medio efectivo de Bruggeman (Pap *et al.*, 2006) y la respuesta de Si dependiente de la longitud de onda (Schinke *et al.*, 2015; Edwards, 1997).

De los resultados de la fig. 11 podemos notar que usando la matriz de transferencia 2×2 los espectros de reflectancia no se pudieron calcular para las longitudes de onda $\lambda < 310$ nm, para las cuales el Si es altamente disipativo y la matriz de transferencia, haciendo el cálculo con doble precisión, se desborda numéricamente. Sin embargo, este desbordamiento corresponde a una situación en la que la onda de Bloch ascendente no alcanzaría al sustrato y la contribución de la onda de Bloch reflejada sería insignificante, por lo que podemos usar la aproximación dada por la ec. (52) con la impedancia superficial Z^+ , dada por la ec. (47) y la matriz de transferencia parcial, obtenida de

la ec. (53) y eligiendo N' lo suficientemente grande como para lograr la convergencia en los coeficientes ópticos y a su vez, lo suficientemente pequeño, como para evitar el desbordamiento.

Los resultados del método de matriz extendida coinciden estrechamente con los de la matriz de transferencia estándar donde este último converge. Los resultados del uso del método de expansión de Bloch son indistinguibles de los de la matriz extendida. Por lo tanto, a pesar del hecho de que el método de la matriz de transferencia estándar es muy útil y de uso común, falla cuando el sistema es muy disipativo o está compuesto por un gran número de capas. La matriz extendida y los métodos de expansión de Bloch no tienen esta limitación. Además, coinciden entre sí, así como con el método de la matriz de transferencia cuando éste converge. Aunque se obtiene estabilidad numérica cuando se trabaja con la matriz extendida, el tiempo de cálculo que requiere es mucho mayor que el de las matrices 2×2 . El tiempo puede disminuir al reducir el número de incógnitas, agregando las capas en grupos caracterizados por una matriz única dada por el producto de las matrices de transferencia de los miembros del grupo, eligiendo un número suficientemente pequeño de capas para que el determinante numérico obtenido de cada matriz de grupo, no se aleje del valor nominal 1. Incluso, aplicando esta agrupación por separado (para la región donde el Si es altamente disipativo), se requiere varios grupos pequeños y para el resto del rango de longitud de onda, donde el Si es prácticamente no disipativo, el tiempo de cómputo requerido para el cálculo del espectro de reflectancia fue mucho mayor que el obtenido, al usar la expansión de Bloch. Por lo tanto, concluimos que la expansión de Bloch nos proporciona estabilidad numérica, confiabilidad y eficiencia computacional. Sin embargo, una ventaja de la matriz extendida es que permite un cálculo de los perfiles de campo, como se muestra a continuación.

En la fig. 12 mostramos la magnitud al cuadrado del campo eléctrico en función de la profundidad, para el caso de un campo incidente con polarización TE, correspondiente a la misma estructura que en la fig. 11, para varios ángulos de incidencia y longitudes de onda. Observamos que la profundidad de penetración del campo electromagnético

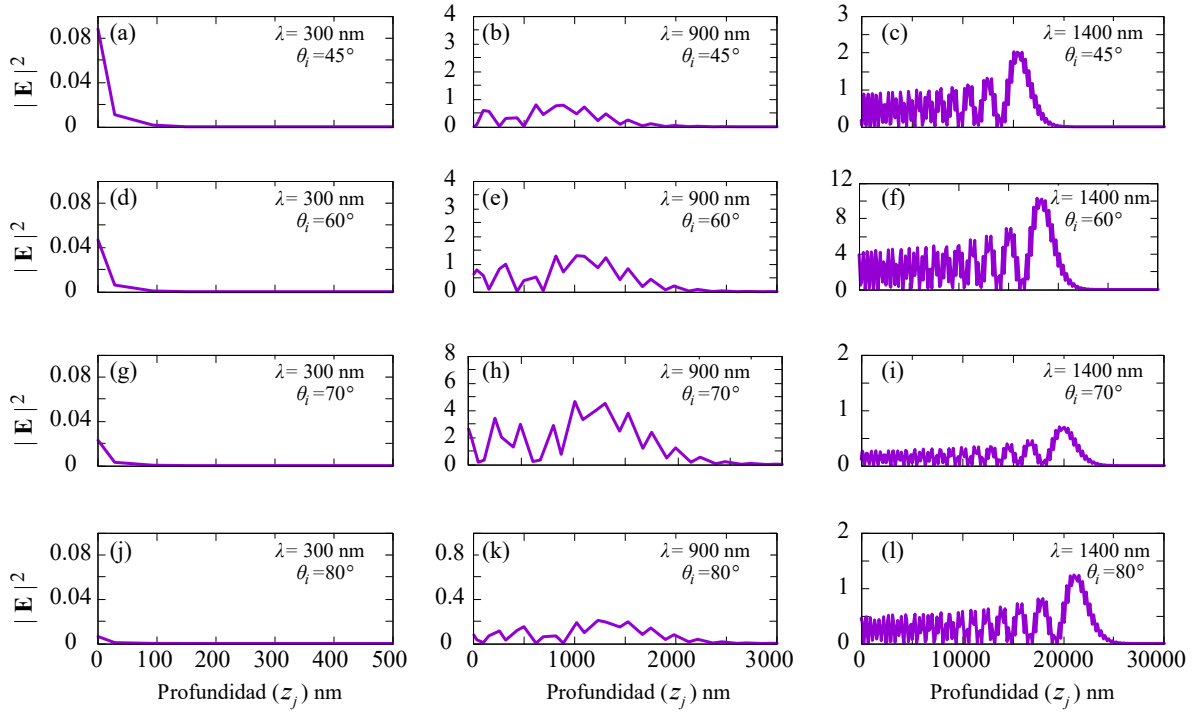


Figura 12. Magnitud al cuadrado del campo eléctrico para polarización TE en función de la profundidad para el mismo sistema que en la fig. 11 para diferentes ángulos de incidencia ($\theta_i = 45^\circ, 60^\circ, 70^\circ$, y 80° de arriba hacia abajo) y varias longitudes de onda ($\lambda = 300$ nm, 900 nm, y 1400 nm de izquierda a derecha).

aumenta a medida que aumenta la longitud de onda. Esto no es inesperado, ya que diseñamos nuestra estructura con capas más gruesas en el interior. La profundidad de penetración también aumenta, a medida que aumenta el ángulo de incidencia. Nótese las oscilaciones en el perfil del campo, más notable para los casos de penetración más profunda. Hay oscilaciones de escala de longitud corta correspondientes a la textura de la estructura, y oscilaciones de escala de longitud más larga debido a la interferencia entre las ondas reflejadas de forma múltiple, desde la región donde la propagación

está prohibida debido a las reflexiones de Bragg y desde la superficie frontal de la estructura. Estas oscilaciones a gran escala son responsables de las oscilaciones visibles en los espectros de reflectancia para longitudes de onda largas en la fig. 11. Si bien el espesor total de esta estructura es $D \approx 32 \mu\text{m}$, la profundidad de penetración no es mayor que $25 \mu\text{m}$, cubriendo sólo 83 de los 101 periodos, en el caso de $\lambda = 1400 \text{ nm}$ y $\theta_i = 80^\circ$. En el caso correspondiente pero para la polarización TM, el campo penetra una distancia mucho mayor. Por ejemplo, en la fig. 13 observamos que en la misma estructura que en la fig. 12 pero para la polarización TM, el campo ya penetra más de $25 \mu\text{m}$ para $\lambda = 1400 \text{ nm}$ y $\theta_i = 45^\circ$, mientras que para ángulos más grandes, penetra toda la estructura. Los resultados anteriores sugieren que para algunas combinaciones de

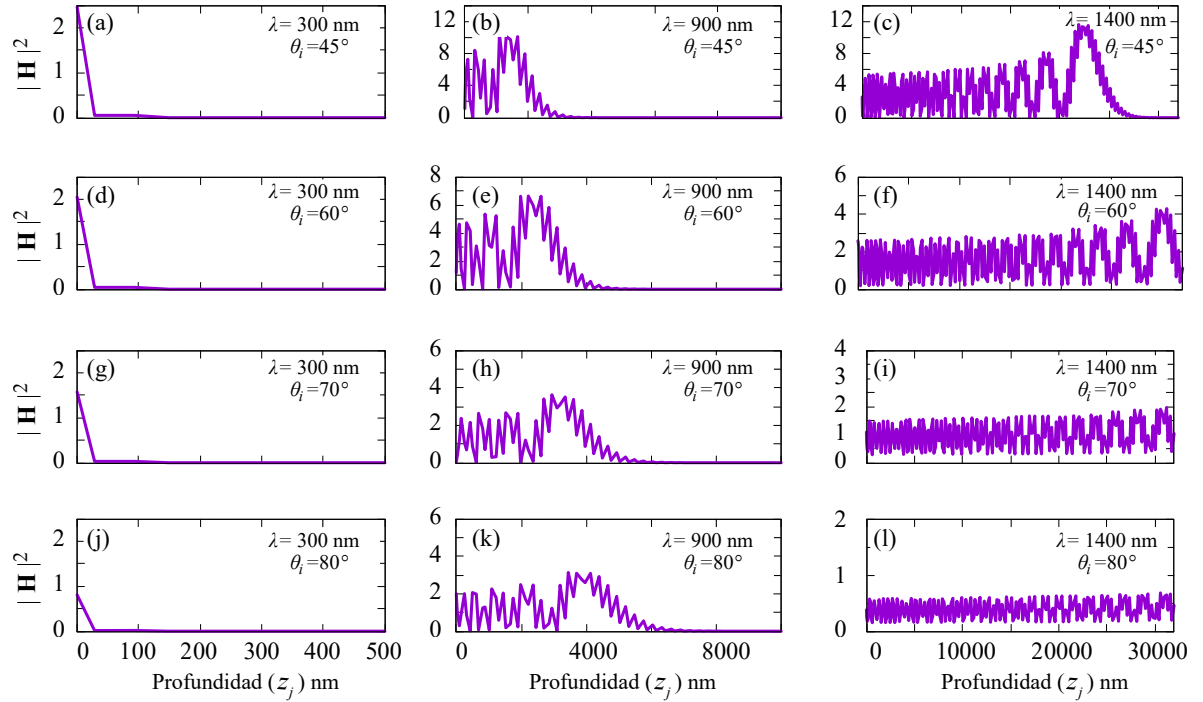


Figura 13. Magnitud al cuadrado del campo magnético en función de la profundidad, como en la fig. 12, pero para la polarización TM.

polarización, longitud de onda y ángulo de incidencia, la estructura más pequeña puede producir los mismos resultados que la estructura completa, discutida anteriormente,

pero no para otras combinaciones.

En la fig. 14 mostramos los espectros de reflectancia calculados para las polarizaciones TE y TM, y para luz no polarizada, utilizando la expansión de Bloch para un sistema multicapas que consta de los primeros 83 periodos del sistema correspondiente a la fig. 11 con 101 periodos. De acuerdo con la fig. 12, este sistema es más ancho que

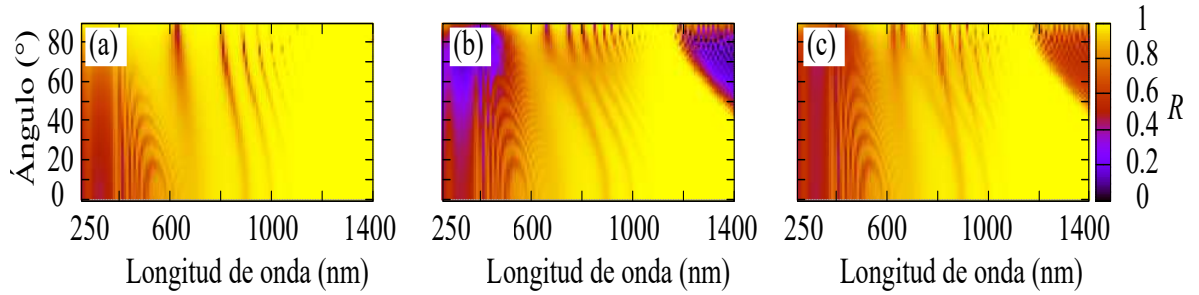


Figura 14. Espectros de reflectancia en función de la longitud de onda y el ángulo de incidencia obtenidos para las polarizaciones TE (izquierda), TM (centro) y para luz no polarizada (derecha), utilizando la expansión de Bloch para una estructura como en la fig.11, pero con sólo los primeros 83 periodos.

la profundidad de penetración para la polarización TE y $\theta_i < 80^\circ$ y podemos observar, la correspondencia esperada entre la fig. 14(a)-(c) con la fig. 11(g)-(i). Hemos verificado esta concordancia cuantitativamente. Para polarización TE es mejor, dada la menor profundidad de penetración, que para TM. Aunque consideramos aquí sistemas más estrechos, el método de matriz de transferencia habitual falló en el UV mientras que la matriz extendida y el método de expansión de Bloch tuvieron éxito y fueron consistentes.

En la fig. 15 mostramos la reflectancia experimental para luz incidente no polarizada en función de la longitud de onda para varios ángulos de incidencia correspondiente a una muestra fabricada de acuerdo a la estructura presentada en la fig. 11. La muestra consta de 101 pares de capas con porosidades 41 % y 76 % y anchos obtenidos de las

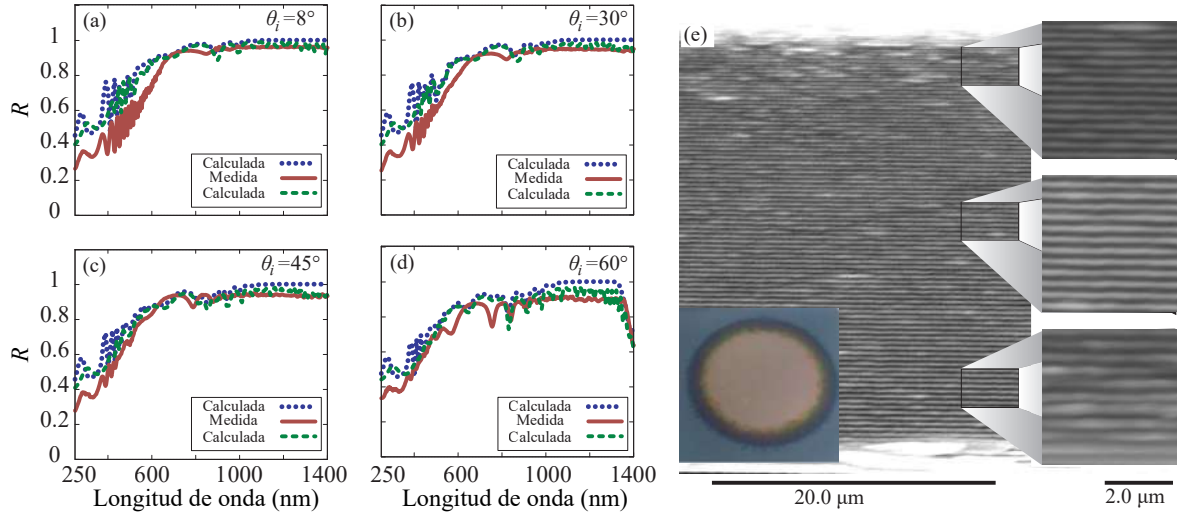


Figura 15. Espectros de reflectancia medidos experimentalmente (línea roja continua) y calculados (línea azul discontinua) en función de la longitud de onda para diversos ángulos de incidencia (a) 8° , (b) 30° , (c) 45° y (d) 60° . También incluimos un cálculo modificado que tiene en cuenta algunos efectos de rugosidad y confinamiento (línea verde discontinua, ver texto). (e) Micrografía de la sección transversal de la estructura fotónica correspondiente al mismo sistema que en la fig. 11. En el lado derecho, se muestra una ampliación de ciertas regiones de la estructura. En la parte inferior, hay una fotografía de la estructura sintetizada.

ecs. (54) y (55) con $\lambda_i = 400 \text{ nm}$, $\lambda_f = 1400 \text{ nm}$ y $\nu = 0.35$. Las imágenes SEM de la estructura sintetizada también se muestran en la figura, mostrando el aumento gradual del grosor de las capas a medida que aumenta la profundidad. A modo de comparación, la fig. 15 también muestra los resultados teóricos obtenidos como en la fig. 11. Pudimos calcular R para las longitudes de onda más bajas gracias a nuestros formalismos propuestos. Los espectros calculados y medidos tienen características similares, aunque la reflectancia experimental es menor, sobre todo para ángulos mayores, y para longitudes de onda más cortas, para las cuales la reflectancia teórica muestra oscilaciones mayores. Las diferencias entre los espectros experimentales y calculados podrían deberse en parte, a la dispersión de la luz en las interfaces reales, que naturalmente tienen cierta rugosidad (Missoni *et al.*, 2020). También pueden deberse a cambios inducidos por los efectos del confinamiento electrónico en la función dieléctrica de la fase Si del silicio poroso. Como

se ha argumentado (Theiß *et al.*, 1994; Theiß, 1997): en el rango espectral azul, la parte imaginaria de la respuesta de la fase sólida del silicio poroso fuertemente dopado tipo p es significativamente mayor que la del silicio en bulto, y sus transiciones entre bandas se ensanchan y se desplazan hacia el rojo. Así, en la fig. 15 también mostramos resultados teóricos obtenidos como en la fig. 11, pero incorporando algunos efectos de rugosidad a través de una matriz de transferencia interfacial (Missoni *et al.*, 2020) e incorporando efectos de confinamiento convolucionando la función dieléctrica de la fase Si (Schinke *et al.*, 2015; Edwards, 1997) con un peso gaussiano para correrla al rojo y ampliar sus características espectrales. Los parámetros de la teoría modificada son la altura de la rugosidad y del desplazamiento al rojo y el ensanchamiento de la respuesta del Si. Así, ajustamos un desplazamiento de $0.032 \mu\text{m}$ y un ensanchamiento espectral de $0.022 \mu\text{m}$, del orden de los discutidos en las refs. (Theiß *et al.*, 1994; Theiß, 1997), y una amplitud de rugosidad dependiente de la profundidad cuyo incremento crece de 0.5 a 2.6 nm, desde el ambiente hacia el sustrato y en proporción a los anchos de cada capa. La teoría modificada produce una reflectancia general más baja, oscilaciones reducidas para longitudes de onda cortas y la disminución de la reflectancia de longitudes de onda y ángulos grandes, de acuerdo con el experimento. En la fig. 15 también ilustramos el perfil de la estructura a través de una imagen SEM. El aumento gradual del espesor de las capas, a medida que aumenta la profundidad es visible y es consistente con nuestro diseño dado por la ec. (55).

Detalles experimentales

La estructura multicapas de SP referente al sistema de la fig. 11 se sintetizó mediante grabado anódico de una oblea de c-Si tipo p (100) con una resistividad de 0.002-0.005

Ω -cm, en condiciones galvanostáticas (Escorcia and Agarwal, 2007; Canham, 1990). El proceso de anodización electroquímico se realizó como se describió en la subsección II.3.1. La densidad de corriente y la duración del grabado de cada capa se controlaron utilizando una fuente de corriente programable. Las densidades de corriente se eligieron como 2 y 305 mA/cm². Las porosidades correspondientes a estas corrientes son 41 % y 76 %, respectivamente y se obtuvieron sintetizando una capa de silicio poroso expuesta durante un cierto tiempo empleando una técnica gravimétrica. Para esto, la oblea de silicio se pesó en tres etapas: antes (m_1) y después del ataque electroquímico (m_2), posteriormente se disolvió la capa de SP (m_3), y finalmente se aplicó la siguiente fórmula $p = (m_1 - m_2)/(m_1 - m_3)$ (Pap *et al.*, 2006). Para obtener la velocidad de formación de las películas de SP en función de la densidad de corriente, las capas de SP se sintetizaron nuevamente con los mismos parámetros y el espesor de la capa se midió con microscopía electrónica de barrido (SEM¹). Las mediciones de reflectividad absoluta se llevaron a cabo con un espectrofotómetro Perkin Elmer Lambda 950 UV/Vis con un accesorio de reflectancia universal de ángulo variable (URA²) para diferentes ángulos de incidencia ($\theta_i = 8^\circ, 30^\circ, 45^\circ$ y 60°), utilizando luz no polarizada. Los valores máximo y mínimo de θ_i fueron limitados por el rango angular del URA.

III.4.2. Diseño de superredes mediante el apilamiento de reflectores

Otra estrategia para el diseño de estructuras con un amplio espectro de alta reflectancia es el apilamiento de reflectores diseñados para distintas longitudes de onda, con los

¹Por sus siglas en inglés, Scanning Electron Microscopy.

²Por sus siglas en inglés, Universal Reflectance Accesory.

reflectores ultravioletas en la superficie, seguido de los visibles y de los infrarrojos, como se muestra en la fig. 16(a). Cada reflector está compuesto de algunos periodos

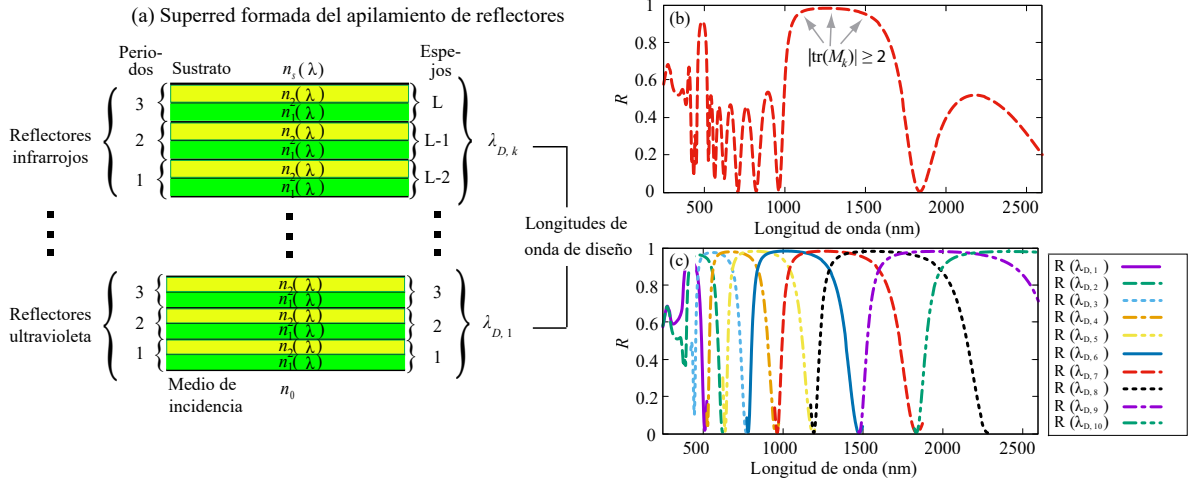


Figura 16. (a) Diagrama de una estructura que consiste en el apilamiento de reflectores diseñados para distintas longitudes de onda, con los reflectores ultravioletas en la superficie, seguido de los visibles y de los infrarrojos. Cada reflector está compuesto de algunos periodos del sistema periódico que forman al reflector de Bragg correspondiente. (b) Espectro de reflectancia de un reflector diseñado a un ángulo de $\theta_D = 45^\circ$ cuyos espesores corresponden a una placa de un cuarto de cierta longitud de onda de diseño $\lambda_{D,k}$. (c) Espectros de reflectancia de los distintos reflectores que conforman la estructura.

del sistema periódico que forman al reflector, de modo que su banda de alta reflectividad se superpone a la banda del reflector anterior y la del siguiente reflector. Las longitudes de onda de diseño de esta estructura fueron elegidas centrando cada una en el borde más rojo de la banda de alta reflectividad del reflector previo. La banda es aquella región en la cual $|\text{tr}(M_k)| \geq 2$ (Barriuso *et al.*, 2005)) donde M_k es la matriz de transferencia de un periodo del k -ésimo reflector. Es decir, se parte del análisis del espectro de reflectancia del primer reflector en el ultravioleta y se selecciona la longitud de onda máxima de su brecha (ver fig. 16(b)) para diseñar el siguiente reflector, continuando de esta manera hasta cubrir el rango de longitudes de onda deseado. Mediante el empalme de los espectros de reflectancia de estos reflectores (ver fig. 16(c)), se obtiene la estructura que se muestra en la fig. 16(a), de la cual esperamos que la luz de cualquier color

intermedio sea reflejada a alguna profundidad.

Siguiendo este procedimiento, se analizaron 2 tipos de estructuras en el rango de longitudes de onda de 250 nm a 3000 nm: una estructura donde todos los reflectores que la componen tienen el mismo número de periodos ($P = 3$, ver fig. 16(a)) y otra, donde cada reflector tiene un número diferente de periodos. Los espesores de las películas de cada reflector se eligieron para corresponder a placas de un cuarto de cierta longitud de onda de diseño $\lambda_{D,k}$ a un ángulo de incidencia de diseño $\theta_D = 45^\circ$. En las figs. 17(a)-(c) se muestran los espectros de reflectancia calculados con el método de expansión de Bloch (Puente-Díaz *et al.*, 2020) para un sistema compuesto por $P = 39$ pares de capas de SP con porosidades alternadas $p_1 = 51\%$ y $p_2 = 76\%$ respectivamente, sobre un sustrato

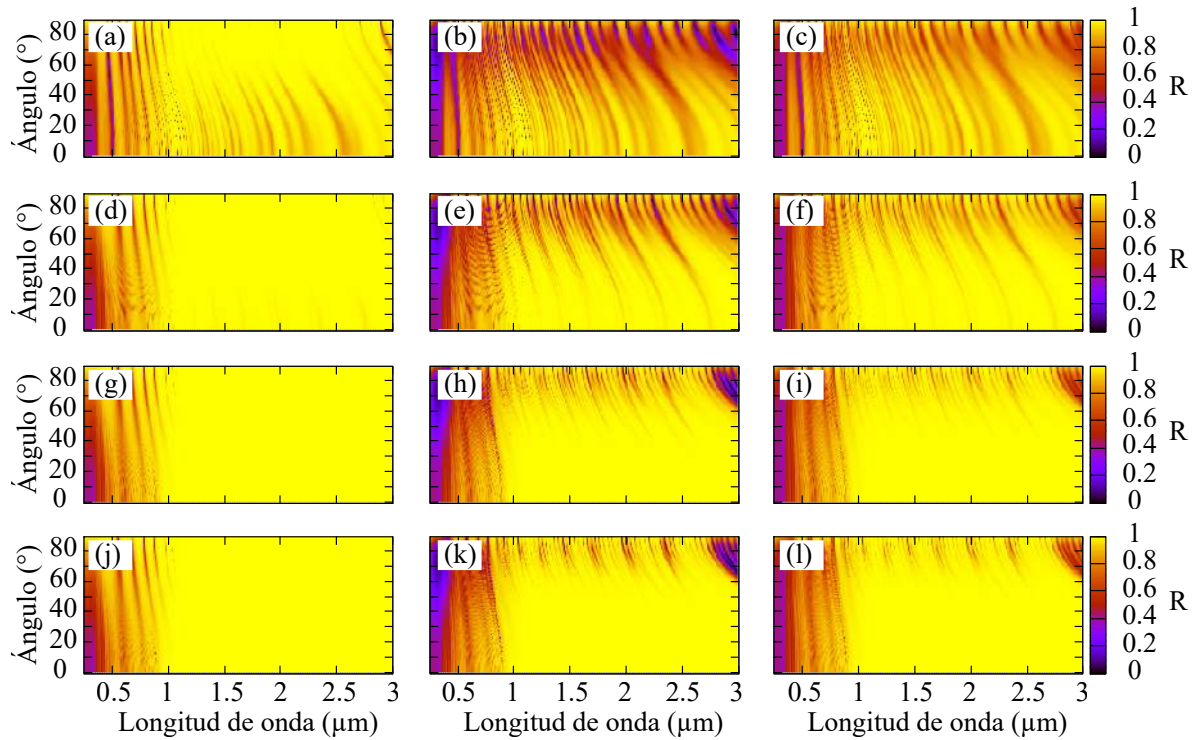


Figura 17. Espectros de reflectancia calculados para una estructura de ((a)-(c)) 39, ((d)-(f)) 59, ((g)-(i)) 91 y ((j)-(l)) 107 pares de capas de SP, como función del ángulo de incidencia θ_i y de la longitud de onda λ para las polarizaciones TE (panel izquierdo), TM (panel central) y luz no polarizada (panel derecho). Las capas tienen porosidades $p_1 = 51\%$ y $p_2 = 76\%$.

de Si, para el cual un sistema es singular, obteniendo un promedio de reflectancia de 84 % (Luz no polarizada) y un espesor de $D \approx 16.7 \mu\text{m}$. Las longitudes de onda de diseño elegidas fueron $\lambda_D = 395 \text{ nm}, 505 \text{ nm}, 585 \text{ nm}, 682 \text{ nm}, 797 \text{ nm}, 935 \text{ nm}, 1100 \text{ nm}, 1292 \text{ nm}, 1520 \text{ nm}, 1787 \text{ nm}, 2105 \text{ nm}, 2480 \text{ nm}$ y 2922 nm .

Para mejorar la reflectancia promedio de la superred obtenida, se procedió al aumentar o disminuir el número de periodos de los reflectores individuales que conforman la estructura de la siguiente manera: para las longitudes de onda de diseño que cumplen con $\lambda_D < 500 \text{ nm}$ consideramos 1 periodo en lugar de los 3 previos; para $500 \text{ nm} < \lambda_D < 650 \text{ nm}$, consideramos 2 periodos; para $650 \text{ nm} < \lambda_D < 800 \text{ nm}$, consideramos 3 periodos y para $800 \text{ nm} < \lambda_D$ consideramos 6, 10 y 12 periodos obteniendo sistemas con un total de $P = 59, 91$ y 107 pares de capas de SP, respectivamente. Los espectros de reflectancia correspondientes a estas estructuras son mostrados en las figs. 17(d)-(f), (g)-(i) y (j)-(l), de los cuales obtuvimos una reflectancia promedio de 89 %, 91 % y 92 %, respectivamente. El ancho total de las estructuras correspondientes fueron $D \approx 30.2 \mu\text{m}$, $D \approx 48.9 \mu\text{m}$ y $D \approx 58.3 \mu\text{m}$, respectivamente.

En la fig. 18 se muestra la reflectancia experimental para luz incidente no polarizada como función de la longitud de onda para varios ángulos de incidencia. La muestra fabricada corresponde a la estructura presentada en la fig. 17(i), la cual consiste de $P = 91$ pares de capas de SP con porosidades alternadas $p_1 = 51 \%$ y $p_2 = 76 \%$. Los detalles experimentales son los mismos presentados en la subsección III.4.1., pero eligiendo densidades de corriente de 35 y 305 mA/cm^2 , para obtener las porosidades de la estructura. En la parte inferior derecha de la fig. 18(f) se muestra una fotografía de la estructura sintetizada. En la fig. 18 también se muestran los resultados teóricos obtenidos como en la fig. 17(i). Los espectros calculados y medidos tienen carac-

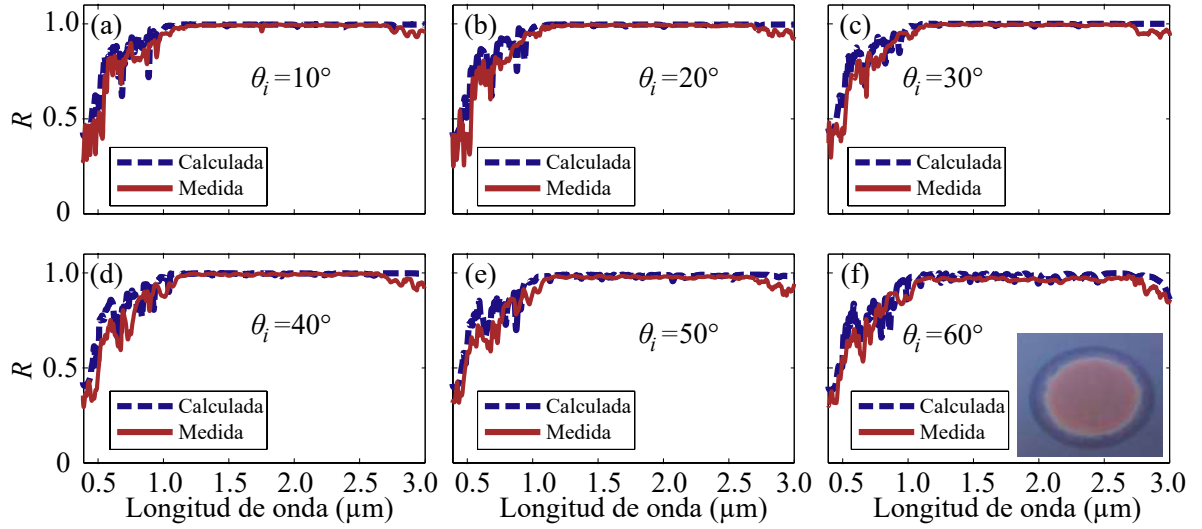


Figura 18. Espectros de reflectancia medidos experimentalmente (línea roja continua) y simulados (línea azul discontinua) en función de la longitud de onda para (a) 10° , (b) 20° , (c) 30° , (d) 40° , (e) 50° y (f) 60° , correspondientes al mismo sistema de la fig. 17(i) (panel derecho). En la parte inferior derecha de la fig. (f) se muestra una fotografía de la estructura sintetizada.

terísticas similares, aunque la reflectancia experimental es más baja en longitudes de onda más cortas, donde la reflectancia teórica muestra oscilaciones más grandes. Las diferencias entre los espectros experimentales y calculados podrían deberse a cambios inducidos por el confinamiento en la función dieléctrica de la fase Si del silicio poroso, como se ha argumentado (Theiß *et al.*, 1994; Theiß, 1997) que en el rango espectral azul, la parte imaginaria de la respuesta de la fase sólida del silicio poroso dopado tipo-p es significativamente más grande que el silicio de bulto y sus transiciones interbandas se ensanchan y se desplazan hacia el rojo.

De esta manera, al diseñar una estructura con el criterio discutido anteriormente, este nos muestra que las estructuras fabricadas son más estables y tienen bastante concordancia con el espectro numérico obtenido, en comparación con el diseño de estructuras (como se muestran en el trabajo (Puente-Díaz *et al.*, 2020)), donde la rugosidad presente sobre las paredes en las interfaces juega un papel muy importante, produciendo

que la reflectancia experimental sea más baja para las longitudes de onda y ángulos de incidencia grandes.

Los resultados mostrados en esta subsección sobre el diseño de las estructuras de apilamiento de reflectores diseñados para distintas longitudes de onda, son resultados previos, ya que mediante una colaboración con el CIICAp (UAEM) se llevó a cabo la optimización de los parámetros con los cuales son creadas las estructuras, tanto de estas estructuras como de los sistemas multicapas trinados compuestos de SP, presentados en nuestro trabajo (Puente-Díaz *et al.*, 2020), y cuyos resultados se pueden encontrar en la referencia (Castillo-Gallardo *et al.*, 2021), permitiendo maximizar la reflectancia promediada sobre un rango espectral y angular dado. En estos trabajos se presentan dos estructuras trinadas con espesores de $21.6\ \mu\text{m}$ y $60.4\ \mu\text{m}$, que presentan un amplio espectro de reflectancia con anchos de banda de 360 nm y 1800 nm, centrados en 1160 nm y 1925 nm, respectivamente. También se presenta una estructura apilada con un ancho de banda de 1800 nm centrado en 1850 nm y un espesor de $41.5\ \mu\text{m}$, que es casi dos tercios del espesor de la estructura trinada.

Capítulo IV

MÉTODO DE LA ECUACIÓN INTEGRAL

En este capítulo se describe el MEI que permite el estudio numérico de estructuras fotónicas compuestas por un sistema periódico en 1D y 2D, formado por cualquier tipo de red con geometrías arbitrarias y para cualquier pareja de materiales que lo conformen. Aplicamos esta teoría para obtener las estructuras de bandas de un CF 2D infinito y la reflectancia de un CF 2D finito formado de arreglos periódicos de red cuadrada de cilindros paralelos infinitamente largos con superficies lisas y rugosas, que contienen medios de LHM y/o dieléctrico.

IV.1. Descripción teórica

El objetivo en esta parte de la tesis es estudiar un CF 2D que contiene medios LHM o dieléctrico formado por una red con celda cuadrada unitaria conteniendo una inclusión cilíndrica. Consideramos ondas que se propagan con vector de onda $\mathbf{k}$ en el plano xy ,

normal al eje de los cilindros y estudiamos los casos de polarizaciones TE y TM. A continuación, se llevará a cabo la descripción de un método numérico para calcular las estructuras de bandas de un CF 2D infinito y la respuesta electromagnética de un CF 2D finito, basado en la solución numérica de la ecuación de Helmholtz usando ecuaciones integrales (Mendoza-Suárez *et al.*, 2006, 2007). Esta metodología parte del segundo teorema integral de Green permitiendo obtener un par de ecuaciones integrales acopladas que involucran como incógnitas, la componente del campo a lo largo de la dirección de simetría (E_z en el caso TE o H_z en el caso TM) y su derivada normal evaluadas en los contornos de las fronteras involucradas en la geometría del sistema. La discretización del sistema resulta en una ecuación matricial homogénea (CF 2D infinito) y no homogénea (CF 2D finito) cuya solución determina las funciones fuente. Con ellas se pueden calcular las estructuras de bandas y la respuesta electromagnética de un CF 2D infinito y finito, respectivamente.

El método aquí expuesto implica ecuaciones independientes del tiempo, ya que se evalúan los campos a una frecuencia dada e involucra valores a lo largo de los contornos de las fronteras determinadas por la geometría del sistema. La ecuación integral se puede resolver sin hacer consideración de los campos en el interior de las diversas regiones del sistema más que en sus fronteras. Esto presenta algunas ventajas en comparación con otros métodos, ya que sólo se tiene en cuenta un número finito de puntos de muestreo a lo largo de los contornos de la celda unitaria, permitiendo un ahorro en recursos computacionales (Centeno-Jiménez, 2014).

IV.2. CF 2D infinito

Consideremos el modelo propuesto mostrado en la fig. 19(a) de un CF 2D formado por una celda cuadrada unitaria que contiene una inclusión con una geometría arbitraria,

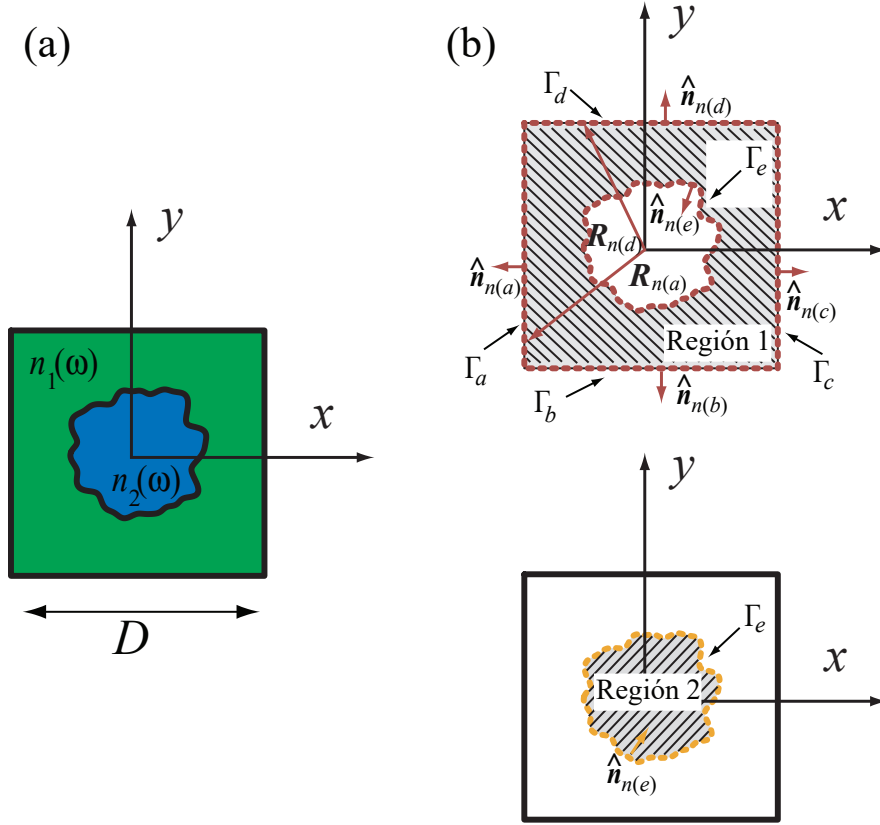


Figura 19. (a) Celda unitaria de un cristal fotónico bidimensional infinito. La celda cuadrada de lado D está compuesta de dos materiales diferentes con índices de refracción $n_1(\omega)$ y $n_2(\omega)$, respectivamente. (b) Discretización de los contornos cerrados (líneas discontinuas de color rojo y amarillo) que limitan los materiales del CF 2D, los cuales para nuestro sistema son $C_1 = \Gamma_a + \Gamma_b + \Gamma_c + \Gamma_d + \Gamma_e$ para la región 1 y $C_2 = \Gamma_e$ para la región 2. El punto de observación se toma en la vecindad de los contornos haciendo $\mathbf{r}_m = \mathbf{R}_{n(q)} + \xi \hat{\mathbf{n}}_{n(q)}$ con $q = a, b, \dots, e$, donde $n = 1, 2, \dots, N_q$ denota los puntos correspondientes resultantes de una partición dada. $\mathbf{R}_{n(q)}$ representa los vectores de posición utilizados para recorrer los diferentes puntos de los contornos Γ_q , ξ es una cantidad infinitesimal positiva y $\hat{\mathbf{n}}_{n(q)}$ son los vectores normales en cada punto de los contornos. En nuestro sistema en la región 1 la dirección de las normales se eligieron hacia afuera y para la región 2 la dirección de las normales se eligieron hacia adentro. El vector $\mathbf{r}'$ se desplaza sobre los contornos por medio de los vectores de posición $\mathbf{R}_q$ con $q = a, b, \dots, e$.

cuyos medios que lo componen pueden ser LHMs o dieléctricos. El medio de la inclusión posee un índice de refracción $n_2(\omega)$ y está rodeado por otro medio con índice de refracción $n_1(\omega)$, para una frecuencia dada ω . Podemos plantear el problema en términos de la solución de las ecuaciones de Maxwell homogéneas, por lo que al considerar que nuestro sistema está compuesto por medios homogéneos sin fuentes ($\rho = 0$ y $\mathbf{J} = 0$), en cuyo caso el campo obedece la ecuación de onda para cada subregión homogénea de nuestro sistema. Asumimos campos electromagnéticos con una dependencia armónica en el tiempo $e^{-i\omega t}$. Además, consideraremos propagación con vector de onda $\mathbf{k}$ en el plano xy , normal al eje de la inclusión. La ecuación de onda se reduce a la ecuación de Helmholtz,

$$\nabla^2 \Psi_j(\mathbf{r}) + k_j^2 \Psi_j(\mathbf{r}) = 0, \quad (56)$$

donde $\Psi_j(\mathbf{r})$ representa el campo eléctrico E_z , en el caso de la polarización TE y el campo magnético H_z , en el caso de la polarización TM, ambos en el j -ésimo medio (ver fig. 19(a)). $\mathbf{r} = x\hat{i} + y\hat{j}$ es un vector 2D en el plano xy que representa la posición del punto de observación e ignoramos la coordenada z ya que el sistema tiene simetría traslacional en dicha dirección. La magnitud del vector de onda está dada por

$$k_j = \pm n_j(\omega) \frac{\omega}{c}, \quad (57)$$

donde el índice de refracción $n_j(\omega) = \pm \sqrt{\mu_j(\omega)\varepsilon_j(\omega)}$ está en términos de la permeabilidad magnética $\mu_j(\omega)$ y de la permitividad eléctrica $\varepsilon_j(\omega)$, ambas dependientes de la frecuencia ω . El signo que aparece en la expresión para el índice de refracción $n_j(\omega)$ debe ser tomado como negativo cuando se considere un LHM y positivo, cuando el medio sea un material dieléctrico. Asimismo, la velocidad de la luz en el vacío está indicada por c .

Para resolver la ec. (56), consideremos una función de Green $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ para el j -ésimo

medio, que depende de las coordenadas cartesianas de un punto que puede considerarse como “punto de observación” $\mathbf{r}$ y otro, que puede denominarse “punto fuente” $\mathbf{r}'$. La función de Green obedece una ecuación de Helmholtz con una fuente puntual,

$$\nabla^2 G_j(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + k_j^2 G_j(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -4\pi\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (58)$$

donde $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ denota la delta de Dirac.

En nuestro problema, que tiene simetría translacional en z , una solución a la ec. (58) es (Maradudin *et al.*, 1990; Mendoza-Suárez and Méndez, 1997; Mendoza-Suárez *et al.*, 2006, 2007)

$$G_j(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = i\pi H_0^{(1)}(k_j |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|), \quad (59)$$

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

Al aplicar el segundo teorema integral de Green bidimensional a $\Psi_j(\mathbf{r})$ y $G_j(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ para cada región correspondiente al j -ésimo medio, tenemos (Mendoza-Suárez *et al.*, 2006, 2007)

$$\begin{aligned} \frac{1}{4\pi} \oint_{C_j} \left[G_j(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \frac{\partial \Psi_j(\mathbf{r}')}{\partial n'_j} - \Psi_j(\mathbf{r}') \frac{\partial G_j(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{\partial n'_j} \right] ds' &= \int_{S_j} \Psi_j(\mathbf{r}') \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) da', \\ &= \Psi_j(\mathbf{r}) \theta_j(\mathbf{r}), \end{aligned} \quad (60)$$

donde la integral de superficie (con S_j limitada por el contorno cerrado correspondiente C_j) se ha representado mediante el producto del campo por la función escalón

$$\theta_j(\mathbf{r}) = \begin{cases} 1 & \text{si } \mathbf{r} \in S_j \\ 0 & \text{si } \mathbf{r} \notin S_j. \end{cases} \quad (61)$$

En la ec. (60), $\mathbf{r}$ representa la posición del observador (es decir, donde se desea obtener el campo), $\mathbf{r}'$ se recorre sobre los contornos C_j , ds' es el diferencial de longitud de arco y $\partial/\partial n'_j$ es la derivada normal que va hacia afuera del contorno cerrado correspondiente

C_j , los cuales para nuestro sistema son $C_1 = \Gamma_a + \Gamma_b + \Gamma_c + \Gamma_d + \Gamma_e$ y $C_2 = \Gamma_e$ (ver fig. 19(b)). Es importante aclarar que el contorno cerrado C_1 que limita al medio 1 está formado por los lados de la celda y la propia inclusión; es decir, por los contornos Γ_q con $q = a, b, \dots, e$, mientras que el contorno cerrado C_2 que limita al medio 2 está formado por la inclusión, correspondiente al contorno Γ_e . Se puede obtener un conjunto de ecuaciones integrales acopladas para $\Psi_j(\mathbf{r}')$ y $\partial\Psi_j(\mathbf{r}')/\partial n'_j$ a partir de la ec. (60) haciendo que $\mathbf{r}$ represente los vectores $\mathbf{R}_a + \xi\hat{\mathbf{n}}_a$, $\mathbf{R}_b + \xi\hat{\mathbf{n}}_b$, $\mathbf{R}_c + \xi\hat{\mathbf{n}}_c$, $\mathbf{R}_d + \xi\hat{\mathbf{n}}_d$ y $\mathbf{R}_e + \xi\hat{\mathbf{n}}_e$ donde $\mathbf{R}_a$, $\mathbf{R}_b$, $\mathbf{R}_c$, $\mathbf{R}_d$ y $\mathbf{R}_e$ son vectores de posición utilizados para recorrer los contornos Γ_a , Γ_b , Γ_c , Γ_d y Γ_e respectivamente, ξ es una cantidad infinitesimal positiva, y $\hat{\mathbf{n}}_a$, $\hat{\mathbf{n}}_b$, $\hat{\mathbf{n}}_c$, $\hat{\mathbf{n}}_d$ y $\hat{\mathbf{n}}_e$ representan las normales a los contornos correspondientes (ver fig. 19(b)):

$$\begin{aligned} \frac{1}{4\pi} \lim_{\xi \rightarrow 0^+} \left\{ \int_{\Gamma_a} \left[G_1(\mathbf{R}_a + \xi\hat{\mathbf{n}}_a, \mathbf{r}') \frac{\partial\Psi_a}{\partial n'_a} - \Psi_a \frac{\partial G_1(\mathbf{R}_a + \xi\hat{\mathbf{n}}_a, \mathbf{r}')}{\partial n'_a} \right] ds' \right. \\ + \int_{\Gamma_b} \left[G_1(\mathbf{R}_b + \xi\hat{\mathbf{n}}_b, \mathbf{r}') \frac{\partial\Psi_b}{\partial n'_b} - \Psi_b \frac{\partial G_1(\mathbf{R}_b + \xi\hat{\mathbf{n}}_b, \mathbf{r}')}{\partial n'_b} \right] ds' \\ + \int_{\Gamma_c} \left[G_1(\mathbf{R}_c + \xi\hat{\mathbf{n}}_c, \mathbf{r}') \frac{\partial\Psi_c}{\partial n'_c} - \Psi_c \frac{\partial G_1(\mathbf{R}_c + \xi\hat{\mathbf{n}}_c, \mathbf{r}')}{\partial n'_c} \right] ds' \\ + \int_{\Gamma_d} \left[G_1(\mathbf{R}_d + \xi\hat{\mathbf{n}}_d, \mathbf{r}') \frac{\partial\Psi_d}{\partial n'_d} - \Psi_d \frac{\partial G_1(\mathbf{R}_d + \xi\hat{\mathbf{n}}_d, \mathbf{r}')}{\partial n'_d} \right] ds' \\ \left. + \int_{\Gamma_e} \left[G_1(\mathbf{R}_e + \xi\hat{\mathbf{n}}_e, \mathbf{r}') \frac{\partial\Psi_e}{\partial n'_e} - \Psi_e \frac{\partial G_1(\mathbf{R}_e + \xi\hat{\mathbf{n}}_e, \mathbf{r}')}{\partial n'_e} \right] ds' \right\} = 0, \end{aligned} \quad (62)$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{4\pi} \lim_{\xi \rightarrow 0^+} \left\{ \int_{\Gamma_a} \left[G_1(\mathbf{R}_b + \xi\hat{\mathbf{n}}_b, \mathbf{r}') \frac{\partial\Psi_a}{\partial n'_a} - \Psi_a \frac{\partial G_1(\mathbf{R}_b + \xi\hat{\mathbf{n}}_b, \mathbf{r}')}{\partial n'_a} \right] ds' \right. \\ + \int_{\Gamma_b} \left[G_1(\mathbf{R}_b + \xi\hat{\mathbf{n}}_b, \mathbf{r}') \frac{\partial\Psi_b}{\partial n'_b} - \Psi_b \frac{\partial G_1(\mathbf{R}_b + \xi\hat{\mathbf{n}}_b, \mathbf{r}')}{\partial n'_b} \right] ds' \\ + \int_{\Gamma_c} \left[G_1(\mathbf{R}_b + \xi\hat{\mathbf{n}}_b, \mathbf{r}') \frac{\partial\Psi_c}{\partial n'_c} - \Psi_c \frac{\partial G_1(\mathbf{R}_b + \xi\hat{\mathbf{n}}_b, \mathbf{r}')}{\partial n'_c} \right] ds' \\ + \int_{\Gamma_d} \left[G_1(\mathbf{R}_b + \xi\hat{\mathbf{n}}_b, \mathbf{r}') \frac{\partial\Psi_d}{\partial n'_d} - \Psi_d \frac{\partial G_1(\mathbf{R}_b + \xi\hat{\mathbf{n}}_b, \mathbf{r}')}{\partial n'_d} \right] ds' \\ \left. + \int_{\Gamma_e} \left[G_1(\mathbf{R}_b + \xi\hat{\mathbf{n}}_b, \mathbf{r}') \frac{\partial\Psi_e}{\partial n'_e} - \Psi_e \frac{\partial G_1(\mathbf{R}_b + \xi\hat{\mathbf{n}}_b, \mathbf{r}')}{\partial n'_e} \right] ds' \right\} = 0, \end{aligned} \quad (63)$$

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{4\pi} \lim_{\xi \rightarrow 0^+} \left\{ \int_{\Gamma_a} \left[G_1(\mathbf{R}_c + \xi \hat{\mathbf{n}}_c, \mathbf{r}') \frac{\partial \Psi_a}{\partial n'_a} - \Psi_a \frac{\partial G_1(\mathbf{R}_c + \xi \hat{\mathbf{n}}_c, \mathbf{r}')}{\partial n'_a} \right] ds' \right. \\
& \quad + \int_{\Gamma_b} \left[G_1(\mathbf{R}_c + \xi \hat{\mathbf{n}}_c, \mathbf{r}') \frac{\partial \Psi_b}{\partial n'_b} - \Psi_b \frac{\partial G_1(\mathbf{R}_c + \xi \hat{\mathbf{n}}_c, \mathbf{r}')}{\partial n'_b} \right] ds' \\
& \quad + \int_{\Gamma_c} \left[G_1(\mathbf{R}_c + \xi \hat{\mathbf{n}}_c, \mathbf{r}') \frac{\partial \Psi_c}{\partial n'_c} - \Psi_c \frac{\partial G_1(\mathbf{R}_c + \xi \hat{\mathbf{n}}_c, \mathbf{r}')}{\partial n'_c} \right] ds' \\
& \quad + \int_{\Gamma_d} \left[G_1(\mathbf{R}_c + \xi \hat{\mathbf{n}}_c, \mathbf{r}') \frac{\partial \Psi_d}{\partial n'_d} - \Psi_d \frac{\partial G_1(\mathbf{R}_c + \xi \hat{\mathbf{n}}_c, \mathbf{r}')}{\partial n'_d} \right] ds' \\
& \quad \left. + \int_{\Gamma_e} \left[G_1(\mathbf{R}_c + \xi \hat{\mathbf{n}}_c, \mathbf{r}') \frac{\partial \Psi_e}{\partial n'_e} - \Psi_e \frac{\partial G_1(\mathbf{R}_c + \xi \hat{\mathbf{n}}_c, \mathbf{r}')}{\partial n'_e} \right] ds' \right\} = 0, \tag{64}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{4\pi} \lim_{\xi \rightarrow 0^+} \left\{ \int_{\Gamma_a} \left[G_1(\mathbf{R}_d + \xi \hat{\mathbf{n}}_d, \mathbf{r}') \frac{\partial \Psi_a}{\partial n'_a} - \Psi_a \frac{\partial G_1(\mathbf{R}_d + \xi \hat{\mathbf{n}}_d, \mathbf{r}')}{\partial n'_a} \right] ds' \right. \\
& \quad + \int_{\Gamma_b} \left[G_1(\mathbf{R}_d + \xi \hat{\mathbf{n}}_d, \mathbf{r}') \frac{\partial \Psi_b}{\partial n'_b} - \Psi_b \frac{\partial G_1(\mathbf{R}_d + \xi \hat{\mathbf{n}}_d, \mathbf{r}')}{\partial n'_b} \right] ds' \\
& \quad + \int_{\Gamma_c} \left[G_1(\mathbf{R}_d + \xi \hat{\mathbf{n}}_d, \mathbf{r}') \frac{\partial \Psi_c}{\partial n'_c} - \Psi_c \frac{\partial G_1(\mathbf{R}_d + \xi \hat{\mathbf{n}}_d, \mathbf{r}')}{\partial n'_c} \right] ds' \\
& \quad + \int_{\Gamma_d} \left[G_1(\mathbf{R}_d + \xi \hat{\mathbf{n}}_d, \mathbf{r}') \frac{\partial \Psi_d}{\partial n'_d} - \Psi_d \frac{\partial G_1(\mathbf{R}_d + \xi \hat{\mathbf{n}}_d, \mathbf{r}')}{\partial n'_d} \right] ds' \\
& \quad \left. + \int_{\Gamma_e} \left[G_1(\mathbf{R}_d + \xi \hat{\mathbf{n}}_d, \mathbf{r}') \frac{\partial \Psi_e}{\partial n'_e} - \Psi_e \frac{\partial G_1(\mathbf{R}_d + \xi \hat{\mathbf{n}}_d, \mathbf{r}')}{\partial n'_e} \right] ds' \right\} = 0, \tag{65}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{4\pi} \lim_{\xi \rightarrow 0^+} \left\{ \int_{\Gamma_a} \left[G_1(\mathbf{R}_e + \xi \hat{\mathbf{n}}_e, \mathbf{r}') \frac{\partial \Psi_a}{\partial n'_a} - \Psi_a \frac{\partial G_1(\mathbf{R}_e + \xi \hat{\mathbf{n}}_e, \mathbf{r}')}{\partial n'_a} \right] ds' \right. \\
& \quad + \int_{\Gamma_b} \left[G_1(\mathbf{R}_e + \xi \hat{\mathbf{n}}_e, \mathbf{r}') \frac{\partial \Psi_b}{\partial n'_b} - \Psi_b \frac{\partial G_1(\mathbf{R}_e + \xi \hat{\mathbf{n}}_e, \mathbf{r}')}{\partial n'_b} \right] ds' \\
& \quad + \int_{\Gamma_c} \left[G_1(\mathbf{R}_e + \xi \hat{\mathbf{n}}_e, \mathbf{r}') \frac{\partial \Psi_c}{\partial n'_c} - \Psi_c \frac{\partial G_1(\mathbf{R}_e + \xi \hat{\mathbf{n}}_e, \mathbf{r}')}{\partial n'_c} \right] ds' \\
& \quad + \int_{\Gamma_d} \left[G_1(\mathbf{R}_e + \xi \hat{\mathbf{n}}_e, \mathbf{r}') \frac{\partial \Psi_d}{\partial n'_d} - \Psi_d \frac{\partial G_1(\mathbf{R}_e + \xi \hat{\mathbf{n}}_e, \mathbf{r}')}{\partial n'_d} \right] ds' \\
& \quad \left. + \int_{\Gamma_e} \left[G_1(\mathbf{R}_e + \xi \hat{\mathbf{n}}_e, \mathbf{r}') \frac{\partial \Psi_e}{\partial n'_e} - \Psi_e \frac{\partial G_1(\mathbf{R}_e + \xi \hat{\mathbf{n}}_e, \mathbf{r}')}{\partial n'_e} \right] ds' \right\} = 0, \tag{66}
\end{aligned}$$

y

$$\frac{1}{4\pi} \lim_{\xi \rightarrow 0^+} \left\{ - \int_{\Gamma_e} \left[G_2(\mathbf{R}_e + \xi \hat{\mathbf{n}}_e, \mathbf{r}') \frac{\partial \tilde{\Psi}_e}{\partial n'_e} - \tilde{\Psi}_e \frac{\partial G_2(\mathbf{R}_e + \xi \hat{\mathbf{n}}_e, \mathbf{r}')}{\partial n'_e} \right] ds' \right\} = \tilde{\Psi}_e, \tag{67}$$

donde hemos llamado $\Psi_a = \Psi_1(\mathbf{R}_a)$, $\Psi_b = \Psi_1(\mathbf{R}_b)$, $\Psi_c = \Psi_1(\mathbf{R}_c)$, $\Psi_d = \Psi_1(\mathbf{R}_d)$, $\Psi_e = \Psi_1(\mathbf{R}_e)$ y $\tilde{\Psi}_e = \Psi_2(\mathbf{R}_e)$. El límite es necesario para evitar la singularidad de

la función de Green cuando su argumento es cero. Se siguió la convención de que las normales a la superficie limitada por su correspondiente contorno cerrado se definen hacia afuera, por lo que en caso de estar dirigidas hacia adentro se introduce un signo negativo en la integral de contorno. Por esta razón en la ec. (67) hemos introducido un signo negativo en la integral de contorno ya que las normales al contorno cerrado están dirigidas hacia adentro de la región 2 (ver fig. 19(b)).

Es importante mencionar que en el sistema de ecuaciones integrales dadas por las ecs. (62)–(66) obtenidas al analizar la región R_1 , dado que las direcciones de las normales van hacia afuera (ver fig. 19(b)) el punto de observación $\mathbf{r}$ está fuera de la región, por lo cual la función escalón referida por la ec. (61) es $\theta_1(\mathbf{r}) = 0$, dado que $\mathbf{r} \notin S_1$. De igual manera en la ec. (67) obtenida al analizar la región R_2 , $\theta_2(\mathbf{r}) = 1$, debido a que la dirección de las normales van hacia adentro y el punto de observación $\mathbf{r}$ está dentro de la región, es decir, $\mathbf{r} \in S_2$.

Será conveniente describir la geometría del problema que representa los puntos de los perfiles usando coordenadas cartesianas $x(s)$, $y(s)$ como funciones paramétricas de la longitud de arco s , y sus derivadas $x'(s)$, $y'(s)$, $x''(s)$, $y''(s)$ hasta el segundo orden; ya que los elementos de matriz que calcularemos para resolver nuestro sistema lineal homogéneo tendrán términos de derivadas de segundo orden, como se mostrará más adelante. Estas funciones paramétricas se generan numéricamente recorriendo los perfiles Γ_a , Γ_b , $\dots$, Γ_e , por los vectores de posición,

$$\mathbf{R}_{n(q)} = (x_{n(q)}, y_{n(q)}) = [x(s_{n(q)}), y(s_{n(q)})], \quad (68)$$

donde $q = a, b, \dots, e$ se usa para indicar las diferentes trayectorias de integración Γ_a , Γ_b , $\dots$, Γ_e , y $n = 1, 2, \dots, N_q$ denota sus puntos correspondientes resultantes de una partición dada. Llamamos N_q al número de puntos tomados a lo largo del contorno

correspondiente Γ_q . Entonces, tenemos un total de $N_a + N_b + N_c + N_d + N_e$ puntos de muestreo. Cabe señalar que para el contorno Γ_e de la inclusión, se aplica el mismo tipo de discretización que la desarrollada sobre el contorno $\Gamma_a + \Gamma_b + \Gamma_c + \Gamma_d$ correspondiente a las paredes de la celda, obteniendo un número distinto de puntos asociado a cada contorno.

Para resolver numéricamente el sistema de ecuaciones integrales dado por las ecs. (62)–(67), consideremos los dos tipos de términos diferentes que aparecen en éstas. Para ello, hacemos una discretización del contorno Γ_q en n pequeños intervalos como $(s_{n(q)} - \Delta s/2, s_{n(q)} + \Delta s/2)$ con Δs como la longitud del arco que separa dos puntos consecutivos dentro un perfil dado, tales que estos sean suficientemente pequeños para tener un muestreo fino. Se recomienda un paso de discretización Δs que sea una fracción pequeña de la longitud de onda mínima λ_{min} usada en nuestro problema. Dado que el número de puntos asociado a cada contorno es distinto, los pequeños segmentos de longitud de arco a considerar Δs , son conmensurables en virtud al tamaño de la inclusión que es la que determina qué tan pequeña es la magnitud con la que se trabaja computacionalmente.

De esta manera, al considerar el paso de discretización propuesto anteriormente, podemos aproximar al campo $\Psi_j(\mathbf{r}')$ y su derivada normal $\partial\Psi_j(\mathbf{r}')/\partial n'_j$ como constantes en los intervalos y de esta manera podemos escribir las integrales de contorno como

$$\begin{aligned} \frac{1}{4\pi} \lim_{\xi \rightarrow 0^+} \int_{\Gamma_q} G_j(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \frac{\partial\Psi_j(\mathbf{r}')}{\partial n'_j} ds' &\approx \sum_{n=1}^{N_q} \Phi_{n(q)}^{(j)} \left[\frac{1}{4\pi} \lim_{\xi \rightarrow 0^+} \int_{s_{n(q)} - \Delta s/2}^{s_{n(q)} + \Delta s/2} G_j(\mathbf{r}, \mathbf{r}') ds' \right] \\ &\approx \sum_{n=1}^{N_q} \Phi_{n(q)}^{(j)} L_{mn(q)}^{(j)}, \end{aligned} \quad (69)$$

y

$$\begin{aligned} \frac{1}{4\pi} \lim_{\xi \rightarrow 0^+} \int_{\Gamma_q} \Psi_j(\mathbf{r}') \frac{\partial G_j(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{\partial n'_j} ds' &\approx \sum_{n=1}^{N_q} \Psi_{n(q)}^{(j)} \left[\frac{1}{4\pi} \lim_{\xi \rightarrow 0^+} \int_{s_{n(q)} - \Delta s/2}^{s_{n(q)} + \Delta s/2} \frac{\partial G_j(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{\partial n'_j} ds' \right] \\ &\approx \sum_{n=1}^{N_q} \Psi_{n(q)}^{(j)} N_{mn(q)}^{(j)}, \end{aligned} \quad (70)$$

donde definimos

$$\Psi_{n(q)}^{(j)} = \Psi_j(\mathbf{r}')|_{\mathbf{r}'=\mathbf{R}_{n(q)}}, \quad (71)$$

$$\Phi_{n(q)}^{(j)} = \left. \frac{\partial \Psi_j(\mathbf{r}')}{\partial n'_j} \right|_{\mathbf{r}'=\mathbf{R}_{n(q)}}, \quad (72)$$

que corresponden a los campos y sus correspondientes derivadas normales. Aquí m es el m -ésimo punto de observación el cual denotaremos como $\mathbf{r}_m = (x_{m(p)}, y_{m(p)}) = \mathbf{R}_{m(p)} + \xi \hat{\mathbf{n}}_{m(p)}$, con $p = a, b, \dots, e$ donde $\mathbf{R}_{m(p)}$ representan las coordenadas de posición en los contornos $\Gamma_a, \Gamma_b, \dots, \Gamma_e$. $L_{mn(q)}^{(j)}$ y $N_{mn(q)}^{(j)}$ son los elementos de matriz donde j denota el j -ésimo medio, los cuales formarán parte de una matriz cuadrada $\mathbf{M}$ de rango $2(N_a + N_b + N_e) \times 2(N_a + N_b + N_e)$. El cual se obtiene al usar las condiciones de frontera en el contorno Γ_e debidas a la continuidad del campo entre los materiales y las condiciones de periodicidad dadas por el teorema de Bloch que requieren que $N_c = N_a$ y $N_d = N_b$, como se mostrará más adelante. La matriz está asociada a un sistema lineal homogéneo de ecuaciones donde las incógnitas serán los campos y sus respectivas derivadas normales evaluadas en los puntos de muestreo a lo largo de los contornos de integración Γ_q con $q = a, b, \dots, e$.

Al sustituir nuestra función de Green dada por la ec. (59) en las integrales que aparecen en las ecs. (69) y (70) cuando Δs es muy pequeño se tienen los siguientes dos casos:

(a) Cuando $m \neq n$

Como en el proceso de integración las variables de $\mathbf{r}'(s')$ variarán alrededor del punto s_n dentro de la pequeña vecindad Δs , podemos expandir este vector en serie de Taylor

$$\mathbf{r}'(s) = \mathbf{r}'|_{\mathbf{r}'=\mathbf{R}_{n(q)}} + (s - s_{n(q)}) \left. \frac{d\mathbf{r}'}{ds} \right|_{\mathbf{r}'=\mathbf{R}_{n(q)}} + \frac{(s - s_{n(q)})^2}{2} \left. \frac{d^2\mathbf{r}'}{ds^2} \right|_{\mathbf{r}'=\mathbf{R}_{n(q)}} + \dots, \quad (73)$$

y considerar solamente el primer término ($\mathbf{r}'(s') = \mathbf{r}'_{n(q)} = \mathbf{R}_{n(q)}$) para calcular los elementos $L_{mn(q)}^{(j)}$ y $N_{mn(q)}^{(j)}$. Así al evaluar las integrales en el punto de observación dado por $\mathbf{r}_m = (x_{m(p)}, y_{m(p)}) = \mathbf{R}_{m(p)} + \xi \hat{\mathbf{n}}_{m(p)}$ con $p = a, b, \dots, e$ se tiene que

$$\begin{aligned} L_{mn(q)}^{(j)} &= \frac{i}{4} \lim_{\xi \rightarrow 0^+} \int_{s_{n(q)} - \Delta s/2}^{s_{n(q)} + \Delta s/2} H_0^{(1)}(k_j |\mathbf{r}_m - \mathbf{r}'(s')|) ds' \\ &= \frac{i}{4} \int_{s_{n(q)} - \Delta s/2}^{s_{n(q)} + \Delta s/2} H_0^{(1)}(k_j |\mathbf{R}_{m(p)} - \mathbf{R}_{n(q)}|) ds' \\ &= \frac{i\Delta s}{4} H_0^{(1)}(k_j |\mathbf{R}_{m(p)} - \mathbf{R}_{n(q)}|), \end{aligned} \quad (74)$$

y

$$\begin{aligned} N_{mn(q)}^{(j)} &= \frac{i}{4} \lim_{\xi \rightarrow 0^+} \int_{s_{n(q)} - \Delta s/2}^{s_{n(q)} + \Delta s/2} \frac{\partial H_0^{(1)}(k_j |\mathbf{r}_m - \mathbf{r}'(s')|)}{\partial n'_j} ds' \\ &= \frac{i}{4} \int_{s_{n(q)} - \Delta s/2}^{s_{n(q)} + \Delta s/2} \frac{\partial H_0^{(1)}(k_j |\mathbf{R}_{m(p)} - \mathbf{R}_{n(q)}|)}{\partial n'_j} ds' \\ &= \frac{i}{4} \int_{s_{n(q)} - \Delta s/2}^{s_{n(q)} + \Delta s/2} \hat{\mathbf{n}}_{n(q)} \cdot \nabla' H_0^{(1)}(k_j |\mathbf{R}_{m(p)} - \mathbf{R}_{n(q)}|) ds' \\ &= \frac{i\Delta s}{4} \hat{\mathbf{n}}_{n(q)} \cdot \nabla' H_0^{(1)}(k_j |\mathbf{R}_{m(p)} - \mathbf{R}_{n(q)}|). \end{aligned} \quad (75)$$

En la ec. (75), $\hat{\mathbf{n}}_{n(q)}$ es la normal al contorno Γ_q en el punto de integración $\mathbf{r}' = \mathbf{R}_{n(q)}$.

Si llamamos $\mathbf{R}_{mn(q)} = \mathbf{R}_{m(p)} - \mathbf{R}_{n(q)}$ y hacemos $u = k_j R_{mn(q)}$, entonces el término del

lado derecho de la ec. (75) se puede reescribir como

$$\begin{aligned}
\left(\frac{i\Delta s}{4}\right) \hat{\mathbf{n}}_{n(q)} \cdot \nabla' H_0^{(1)}(u) &= \left(\frac{i\Delta s}{4}\right) \left[n_x \frac{\partial H_0^{(1)}(u)}{\partial x_{n(q)}} + n_y \frac{\partial H_0^{(1)}(u)}{\partial y_{n(q)}} \right] \\
&= \left(\frac{i\Delta s}{4}\right) \left[n_x \frac{\partial u}{\partial x_{n(q)}} + n_y \frac{\partial u}{\partial y_{n(q)}} \right] \frac{dH_0^{(1)}(u)}{du} \\
&= \left(\frac{i\Delta s}{4}\right) \left[n_x \left(-k_j \frac{x_m - x_{n(q)}}{R_{mn(q)}} \right) + n_y \left(-k_j \frac{y_m - y_{n(q)}}{R_{mn(q)}} \right) \right] \left(-H_1^{(1)}(u) \right) \\
&= \left(\frac{i\Delta s}{4}\right) k_j \hat{\mathbf{n}}_{n(q)} \cdot \frac{\mathbf{R}_{mn(q)}}{R_{mn(q)}} H_1^{(1)}(k_j R_{mn(q)}). \tag{76}
\end{aligned}$$

Al usar este resultado y la notación propuesta en esta última, podemos expresar los elementos de matriz $L_{mn(q)}^{(j)}$ y $N_{mn(q)}^{(j)}$ para $m \neq n$ como

$$L_{mn(q)}^{(j)} = \frac{i\Delta s}{4} H_0^{(1)}(k_j R_{mn(q)}), \tag{77}$$

y

$$N_{mn(q)}^{(j)} = \left(\frac{i\Delta s k_j}{4}\right) \hat{\mathbf{n}}_{n(q)} \cdot \frac{\mathbf{R}_{mn(q)}}{R_{mn(q)}} H_1^{(1)}(k_j R_{mn(q)}). \tag{78}$$

(b) Cuando $m = n$

Cuando el punto de observación es igual al punto de integración; es decir $\mathbf{r}_m = \mathbf{r}'_{n(q)}$ la función de Green posee una singularidad, que para nuestro caso (función de Green en 2D) es removible. Por lo tanto, las integrales dadas por las ecs. (69) y (70) se pueden calcular si utilizamos el proceso del límite de la siguiente manera:

$$\begin{aligned}
L_{nn(q)}^{(j)} &= \frac{i}{4} \lim_{\xi \rightarrow 0^+} \int_{s_{n(q)} - \Delta s/2}^{s_{n(q)} + \Delta s/2} H_0^{(1)}(k_j | \mathbf{r}_n - \mathbf{r}'(s') |) ds' \\
&= \frac{i}{4} \lim_{\xi \rightarrow 0^+} \int_{-\Delta s/2}^{\Delta s/2} H_0^{(1)}(k_j | \mathbf{r}_n - \mathbf{r}'(\eta + s_{n(q)}) |) d\eta, \tag{79}
\end{aligned}$$

y

$$\begin{aligned}
N_{nn(q)}^{(j)} &= \frac{i}{4} \lim_{\xi \rightarrow 0^+} \int_{s_{n(q)} - \Delta s/2}^{s_{n(q)} + \Delta s/2} \frac{\partial H_0^{(1)}(k_j | \mathbf{r}_n - \mathbf{r}'(s') |)}{\partial n'_j} ds' \\
&= \frac{i}{4} \lim_{\xi \rightarrow 0^+} \int_{-\Delta s/2}^{\Delta s/2} \frac{\partial H_0^{(1)}(k_j | \mathbf{r}_n - \mathbf{r}'(\eta + s_{n(q)}) |)}{\partial n'_j} d\eta,
\end{aligned} \tag{80}$$

donde hemos hecho el cambio de variable $\eta = s' - s_{n(q)}$. Como en el proceso de integración las variables de $\mathbf{r}'(\eta + s_{n(q)})$ variarán alrededor del punto s_n dentro de la pequeña vecindad Δs , al igual que en el caso anterior, podemos expandir este vector en serie de Taylor,

$$\mathbf{r}'(\eta + s_{n(q)}) = \mathbf{R}_{n(q)} + \eta \hat{\mathbf{t}}_{n(q)} + \frac{\eta^2}{2} \hat{\mathbf{t}}'_{n(q)} + \dots, \tag{81}$$

donde $\hat{\mathbf{t}}_{n(q)} = \left. \frac{d\mathbf{r}'}{d\eta} \right|_{\mathbf{r}'=\mathbf{R}_{n(q)}}$ es el vector tangencial unitario al contorno en el punto $\mathbf{r}'_{n(q)} = \mathbf{R}_{n(q)}$ y $\hat{\mathbf{t}}'_{n(q)} = \left. \frac{d^2\mathbf{r}'}{d\eta^2} \right|_{\mathbf{r}'=\mathbf{R}_{n(q)}}$ es la derivada del vector $\hat{\mathbf{t}}$, cuyo vector está asociado a la curvatura del contorno Γ_q en el punto $\mathbf{r}'_{n(q)} = \mathbf{R}_{n(q)}$. Al usar esta expansión considerando sólo términos hasta primer orden ($\mathbf{r}'(\eta + s_{n(q)}) = \mathbf{r}'_{n(q)} = \mathbf{R}_{n(q)} + \eta \hat{\mathbf{t}}_{n(q)}$) para calcular los elementos $L_{nn(q)}^{(j)}$ (ec. (79)), se tiene

$$\begin{aligned}
L_{nn(q)}^{(j)} &= \frac{i}{4} \lim_{\xi \rightarrow 0^+} \int_{-\Delta s/2}^{\Delta s/2} H_0^{(1)}(k_j | \xi \hat{\mathbf{n}}_{n(q)} - \eta \hat{\mathbf{t}}_{n(q)} |) d\eta \\
&= \frac{i}{4} \lim_{\xi \rightarrow 0^+} \int_{-\Delta s/2}^{\Delta s/2} H_0^{(1)}\left(k_j \sqrt{\xi^2 + \eta^2}\right) d\eta \\
&= \frac{i}{4} \int_{-\Delta s/2}^{\Delta s/2} H_0^{(1)}(k_j |\eta|) d\eta \\
&= \frac{i}{4} \int_{-\Delta s/2}^{\Delta s/2} \left[1 - \frac{2}{i\pi} \ln(\gamma k_j |\eta|) \right] d\eta \\
&= \frac{i\Delta s}{4} H_0^{(1)}\left(k_j \frac{\Delta s}{2e}\right),
\end{aligned} \tag{82}$$

donde hemos considerado que para pequeños argumentos, la función de Hankel de primera clase y orden cero se puede aproximar como $H_0^{(1)}(x) \approx 1 - (2/i\pi) \ln(\gamma x)$ siendo γ la constante de Euler (Arfken *et al.*, 2012). Similarmente para los elementos de la

matriz $N_{nn(q)}^{(j)}$ (ec. (80)), obtenemos

$$\begin{aligned}
N_{nn(q)}^{(j)} &= \frac{i}{4} \lim_{\xi \rightarrow 0^+} \int_{-\Delta s/2}^{\Delta s/2} \frac{\partial H_0^{(1)} \left(k_j |\mathbf{r}_n - \mathbf{r}'_{n(q)}| \right)}{\partial n'_j} d\eta \\
&= \frac{i}{4} \lim_{\xi \rightarrow 0^+} \int_{-\Delta s/2}^{\Delta s/2} \hat{\mathbf{n}}_{n(q)} \cdot \nabla' H_0^{(1)} \left(k_j |\mathbf{r}_n - \mathbf{r}'_{n(q)}| \right) d\eta \\
&= \frac{i}{4} \lim_{\xi \rightarrow 0^+} \int_{-\Delta s/2}^{\Delta s/2} k_j \hat{\mathbf{n}}_{n(q)} \cdot \frac{\mathbf{R}_{mn(q)}}{R_{mn(q)}} H_1^{(1)} \left(k_j R_{mn(q)} \right) d\eta \\
&= \frac{i}{4} \lim_{\xi \rightarrow 0^+} \int_{-\Delta s/2}^{\Delta s/2} k_j \hat{\mathbf{n}}_{n(q)} \cdot \frac{\xi \hat{\mathbf{n}}_{n(q)} - \eta \hat{\mathbf{t}}_{n(q)} - \frac{\eta^2}{2} \hat{\mathbf{t}}'_{n(q)}}{\sqrt{\xi^2 + \eta^2}} H_1^{(1)} \left(k_j \sqrt{\xi^2 + \eta^2} \right) d\eta \\
&= \frac{i}{4} \lim_{\xi \rightarrow 0^+} \int_{-\Delta s/2}^{\Delta s/2} k_j \frac{\xi - \frac{\eta^2}{2} \hat{\mathbf{n}}_{n(q)} \cdot \hat{\mathbf{t}}'_{n(q)}}{\sqrt{\xi^2 + \eta^2}} \left[\frac{2}{i\pi} \frac{1}{k_j \sqrt{\xi^2 + \eta^2}} \right] d\eta \\
&= \frac{1}{2\pi} \lim_{\xi \rightarrow 0^+} \int_{-\Delta s/2}^{\Delta s/2} \frac{\xi - \frac{\eta^2}{2} \hat{\mathbf{n}}_{n(q)} \cdot \hat{\mathbf{t}}'_{n(q)}}{\xi^2 + \eta^2} d\eta \\
&= \frac{1}{2} + \frac{\Delta s}{4\pi} \hat{\mathbf{n}}_{n(q)} \cdot \hat{\mathbf{t}}'_{n(q)}, \tag{83}
\end{aligned}$$

donde hemos usado la ec. (76) y expandido el vector $\mathbf{r}'(\eta + s_{n(q)})$ hasta segundo orden (ec. (81)) en el numerador para evitar cancelación del argumento de la integral. Además consideramos que para pequeños argumentos, la función de Hankel de primera clase y orden uno se puede aproximar como $H_1^{(1)}(x) \approx 2/(i\pi x)$ (Arfken *et al.*, 2012).

Por lo tanto, combinando las ecs. (77), (78), (82) y (83) podemos expresar los elementos de matriz $L_{mn(q)}^{(j)}$ y $N_{mn(q)}^{(j)}$ por

$$L_{mn(q)}^{(j)} = \frac{i\Delta s}{4} H_0^{(1)}(k_j R_{mn(q)}) (1 - \delta_{mn(q)}) + \left[\frac{i\Delta s}{4} H_0^{(1)} \left(k_j \frac{\Delta s}{2e} \right) \right] \delta_{mn(q)}, \tag{84}$$

$$N_{mn(q)}^{(j)} = \frac{i\Delta s}{4} k_j H_1^{(1)}(k_j R_{mn(q)}) \hat{\mathbf{n}}_n \cdot \frac{\mathbf{R}_{mn(q)}}{R_{mn(q)}} (1 - \delta_{mn(q)}) + \left[\frac{1}{2} + \frac{\Delta s}{4\pi} \hat{\mathbf{n}}_{n(q)} \cdot \hat{\mathbf{t}}'_{n(q)} \right] \delta_{mn(q)}, \tag{85}$$

a orden lineal en Δs , con

$$\hat{\mathbf{n}}_{n(q)} \cdot \mathbf{R}_{mn(q)} = -y'_{n(q)}(x_m - x_{n(q)}) + x'_{n(q)}(y_m - y_{n(q)}), \quad (86)$$

$$\hat{\mathbf{n}}_{n(q)} \cdot \hat{\mathbf{t}}'_{n(q)} = x'_{n(q)}y''_{n(q)} - y'_{n(q)}x''_{n(q)}, \quad (87)$$

$$R_{mn(q)} = \sqrt{(x_m - x_{n(q)})^2 + (y_m - y_{n(q)})^2}. \quad (88)$$

Al usar estas expresiones para los elementos de matriz $L_{mn(q)}^{(j)}$ y $N_{mn(q)}^{(j)}$ junto a las ecs. (69) y (70) podemos expresar el sistema de ecuaciones integrales dado por las ecs. (62)–(66) y (67) por el siguiente sistema algebraico homogéneo:

$$\begin{aligned} & \left[\sum_{n=1}^{N_a} \Phi_{n(a)}^{(1)} L_{mn(a)}^{(1)} - \sum_{n=1}^{N_a} \Psi_{n(a)}^{(1)} N_{mn(a)}^{(1)} \right] \\ & + \left[\sum_{n=1}^{N_b} \Phi_{n(b)}^{(1)} L_{mn(b)}^{(1)} - \sum_{n=1}^{N_b} \Psi_{n(b)}^{(1)} N_{mn(b)}^{(1)} \right] \\ & + \left[\sum_{n=1}^{N_c} \Phi_{n(c)}^{(1)} L_{mn(c)}^{(1)} - \sum_{n=1}^{N_c} \Psi_{n(c)}^{(1)} N_{mn(c)}^{(1)} \right] \\ & + \left[\sum_{n=1}^{N_d} \Phi_{n(d)}^{(1)} L_{mn(d)}^{(1)} - \sum_{n=1}^{N_d} \Psi_{n(d)}^{(1)} N_{mn(d)}^{(1)} \right] \\ & + \left[\sum_{n=1}^{N_e} \Phi_{n(e)}^{(1)} L_{mn(e)}^{(1)} - \sum_{n=1}^{N_e} \Psi_{n(e)}^{(1)} N_{mn(e)}^{(1)} \right] = 0, \end{aligned} \quad (89)$$

y

$$\sum_{n=1}^{N_e} \Phi_{n(e)}^{(2)} L_{mn(e)}^{(2)} + \sum_{n=1}^{N_e} \Psi_{n(e)}^{(2)} \left(\delta_{mn(e)} - N_{mn(e)}^{(2)} \right) = 0. \quad (90)$$

Observando el sistema de ecuaciones anterior, se tienen más incógnitas $2(N_a + N_b + N_c + N_d) + 4N_e$ que de ecuaciones que se hacen presentes $N_a + N_b + N_c + N_d + 2N_e$. Vale la pena aclarar que el número de incógnitas de los campos y sus respectivas derivadas normales evaluadas en los puntos de muestreo a lo largo del contorno de integración Γ_e producen $2N_e$ incógnitas para cada medio, lo cual da un total de $4N_e$ incógnitas. Sin embargo el número de ecuaciones evaluadas en los puntos de observación del contorno Γ_e generarán $2N_e$ ecuaciones. No obstante, las expresiones dadas por las ecs. (89) y

(90) deben cumplir las condiciones de contorno que delimitan el sistema. Por un lado, el teorema de Bloch impone las condiciones de periodicidad sobre la celda unitaria y por otro lado, tenemos las condiciones de frontera que establecen la continuidad de los campos entre los materiales que caracterizan las regiones 1 y 2. De esta manera, en nuestro sistema se cumplen las condiciones de frontera en el contorno Γ_e ,

$$\Psi_{n(e)}^{(1)} = \Psi_{n(e)}^{(2)}, \quad \Phi_{n(e)}^{(2)} = \frac{f_2}{f_1} \Phi_{n(e)}^{(1)}, \quad (91)$$

donde las cantidades $f_{j=1,2}$ están dadas por (Mendoza-Suárez *et al.*, 2006, 2007)

$$f_j = \begin{cases} 1 & \text{Polarización TE} \\ \epsilon_j(\omega) & \text{Polarización TM,} \end{cases} \quad \text{y} \quad f_j = \begin{cases} \mu_j(\omega) & \text{Polarización TE} \\ \epsilon_j(\omega) & \text{Polarización TM,} \end{cases} \quad (92)$$

para medios dieléctricos y LHMs, respectivamente. Dada la simetría de traslación a través de nuestro CF 2D, con base en el teorema de Bloch, se cumple que

$$\Psi(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = \Psi(\mathbf{r})e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{R}}, \quad (93)$$

donde para nuestro sistema $\mathbf{r} = \mathbf{R}_q$ con $q = a, b, c$ y d son los vectores de posición utilizados para recorrer los contornos Γ_a , Γ_b , Γ_c y Γ_d , $\mathbf{K}$ es el vector de Bloch bidimensional y $\mathbf{R} = D_x \hat{i} + D_y \hat{j}$ con D_x y D_y representando las dimensiones de la celda unitaria. Con esta condición de periodicidad se puede mostrar que $\Psi_{n(c)}^{(1)} = \Psi_{n(a)}^{(1)}e^{iK_x D_x}$, $\Phi_{n(c)}^{(1)} = -\Phi_{n(a)}^{(1)}e^{iK_x D_x}$, $\Psi_{n(d)}^{(1)} = \Psi_{n(b)}^{(1)}e^{iK_y D_y}$ y $\Phi_{n(d)}^{(1)} = -\Phi_{n(b)}^{(1)}e^{iK_y D_y}$. Vale la pena mencionar que el signo en las derivadas normales es opuesto porque las normales a los contornos correspondientes están en la dirección opuesta (ver fig. 19(b)).

Al usar las condiciones de frontera dadas por la ec. (91) y las condiciones de periodicidad podemos obtener un conjunto de $2(N_a + N_b + N_e)$ ecuaciones algebraicas homogéneas (ya que las condiciones de periodicidad requieren que $N_c = N_a$ y $N_d = N_b$)

dadas por

$$\begin{aligned}
& \left[\sum_{n=1}^{N_a} \left(L_{mn(a)}^{(1)} - e^{iK_x D_x} L_{mn(c)}^{(1)} \right) \Phi_{n(a)}^{(1)} - \sum_{n=1}^{N_a} \left(N_{mn(a)}^{(1)} + e^{iK_x D_x} N_{mn(c)}^{(1)} \right) \Psi_{n(a)}^{(1)} \right] \\
& + \left[\sum_{n=1}^{N_b} \left(L_{mn(b)}^{(1)} - e^{iK_y D_y} L_{mn(d)}^{(1)} \right) \Phi_{n(b)}^{(1)} - \sum_{n=1}^{N_b} \left(N_{mn(b)}^{(1)} + e^{iK_y D_y} N_{mn(d)}^{(1)} \right) \Psi_{n(b)}^{(1)} \right] \\
& + \left[\sum_{n=1}^{N_e} L_{mn(e)}^{(1)} \Phi_{n(e)}^{(1)} - \sum_{n=1}^{N_e} N_{mn(e)}^{(1)} \Psi_{n(e)}^{(1)} \right] = 0,
\end{aligned} \tag{94}$$

para la región R_1 con $m = 1, 2, \dots, N_p$ con $p = a, b, \dots, e$, como se dijo anteriormente. Para la región R_2 se tiene

$$\frac{f_2}{f_1} \sum_{n=1}^{N_e} L_{mn(e)}^{(2)} \Phi_{n(e)}^{(1)} + \sum_{n=1}^{N_e} \left(\delta_{mn(e)} - N_{mn(e)}^{(2)} \right) \Psi_{n(e)}^{(1)} = 0, \tag{95}$$

recordando que en este caso $m = 1, 2, \dots, N_e$.

Estas dos últimas ecuaciones dan un sistema de ecuaciones que determinan una matriz cuadrada $\mathbf{M}$ de rango $2(N_a + N_b + N_e)$. De este modo, resolvemos un sistema de la forma

$$\mathbf{M}\mathbf{X} = \mathbf{B}, \tag{96}$$

donde

$$\mathbf{X} = (\Phi_{1(a)}^{(1)}, \dots, \Phi_{N_a(a)}^{(1)}, \Psi_{1(a)}^{(1)}, \dots, \Psi_{N_a(a)}^{(1)}, \dots, \Phi_{1(e)}^{(1)}, \dots, \Phi_{N_e(e)}^{(1)}, \Psi_{1(e)}^{(1)}, \dots, \Psi_{N_e(e)}^{(1)})^T, \tag{97}$$

es un vector de $2(N_a + N_b + N_e) \times 1$ el cual contiene las componentes del campo a lo largo de la dirección de simetría (TE o TM) y sus derivadas normales evaluadas en los puntos de muestreo a lo largo de los contornos Γ_z con $z = a, b$ y e de nuestro sistema,

$$\mathbf{B} = (0, 0, \dots, 0, 0)^T, \tag{98}$$

es el término homogéneo de la ecuación con la misma dimensión que $\mathbf{X}$ y

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} \overbrace{M_{mn(a,c)}^1}^{n:1 \rightarrow N_a} & \overbrace{M_{mn(a,c)}^2}^{n:1 \rightarrow N_a} & \overbrace{M_{mn(b,d)}^1}^{n:1 \rightarrow N_b} & \overbrace{M_{mn(b,d)}^2}^{n:1 \rightarrow N_b} & \overbrace{L_{mn(e)}^{(1)}}^{n:1 \rightarrow N_e} & \overbrace{-N_{mn(e)}^{(1)}}^{n:1 \rightarrow N_e} & \left. \vphantom{\begin{matrix} M_{mn(a,c)}^1 \\ M_{mn(a,c)}^2 \\ M_{mn(b,d)}^1 \\ M_{mn(b,d)}^2 \\ L_{mn(e)}^{(1)} \\ -N_{mn(e)}^{(1)} \end{matrix}} \right\} \downarrow_{N_a}^{m:1} \Gamma_{m(a)} \\ M_{mn(a,c)}^1 & M_{mn(a,c)}^2 & M_{mn(b,d)}^1 & M_{mn(b,d)}^2 & L_{mn(e)}^{(1)} & -N_{mn(e)}^{(1)} & \left. \vphantom{\begin{matrix} M_{mn(a,c)}^1 \\ M_{mn(a,c)}^2 \\ M_{mn(b,d)}^1 \\ M_{mn(b,d)}^2 \\ L_{mn(e)}^{(1)} \\ -N_{mn(e)}^{(1)} \end{matrix}} \right\} \downarrow_{N_b}^{m:1} \Gamma_{m(b)} \\ M_{mn(a,c)}^1 & M_{mn(a,c)}^2 & M_{mn(b,d)}^1 & M_{mn(b,d)}^2 & L_{mn(e)}^{(1)} & -N_{mn(e)}^{(1)} & \left. \vphantom{\begin{matrix} M_{mn(a,c)}^1 \\ M_{mn(a,c)}^2 \\ M_{mn(b,d)}^1 \\ M_{mn(b,d)}^2 \\ L_{mn(e)}^{(1)} \\ -N_{mn(e)}^{(1)} \end{matrix}} \right\} \downarrow_{N_a}^{m:1} \Gamma_{m(c)} \\ M_{mn(a,c)}^1 & M_{mn(a,c)}^2 & M_{mn(b,d)}^1 & M_{mn(b,d)}^2 & L_{mn(e)}^{(1)} & -N_{mn(e)}^{(1)} & \left. \vphantom{\begin{matrix} M_{mn(a,c)}^1 \\ M_{mn(a,c)}^2 \\ M_{mn(b,d)}^1 \\ M_{mn(b,d)}^2 \\ L_{mn(e)}^{(1)} \\ -N_{mn(e)}^{(1)} \end{matrix}} \right\} \downarrow_{N_b}^{m:1} \Gamma_{m(d)} \\ M_{mn(a,c)}^1 & M_{mn(a,c)}^2 & M_{mn(b,d)}^1 & M_{mn(b,d)}^2 & L_{mn(e)}^{(1)} & -N_{mn(e)}^{(1)} & \left. \vphantom{\begin{matrix} M_{mn(a,c)}^1 \\ M_{mn(a,c)}^2 \\ M_{mn(b,d)}^1 \\ M_{mn(b,d)}^2 \\ L_{mn(e)}^{(1)} \\ -N_{mn(e)}^{(1)} \end{matrix}} \right\} \downarrow_{N_e}^{m:1} \Gamma_{m(e)} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{f_2}{f_1} L_{mn(e)}^{(2)} & \delta_{mn(e)} - N_{mn(e)}^{(2)} & \left. \vphantom{\begin{matrix} M_{mn(a,c)}^1 \\ M_{mn(a,c)}^2 \\ M_{mn(b,d)}^1 \\ M_{mn(b,d)}^2 \\ L_{mn(e)}^{(1)} \\ -N_{mn(e)}^{(1)} \end{matrix}} \right\} \downarrow_{N_e}^{m:1} \Gamma_{m(e)} \end{pmatrix}, \quad (99)$$

es una matriz cuadrada de $2(N_a + N_b + N_e) \times 2(N_a + N_b + N_e)$, con

$$\begin{aligned} M_{mn(a,c)}^1 &= L_{mn(a)}^{(1)} - e^{iK_x D_x} L_{mn(c)}^{(1)}, \\ M_{mn(a,c)}^2 &= -N_{mn(a)}^{(1)} - e^{iK_x D_x} N_{mn(c)}^{(1)}, \\ M_{mn(b,d)}^1 &= L_{mn(b)}^{(1)} - e^{iK_y D_y} L_{mn(d)}^{(1)}, \\ M_{mn(b,d)}^2 &= -N_{mn(b)}^{(1)} - e^{iK_y D_y} N_{mn(d)}^{(1)}. \end{aligned} \quad (100)$$

En estas expresiones el superíndice T denota la transpuesta de una matriz. Dado que el sistema de ecuaciones es homogéneo, para obtener una solución no trivial su determinante debe ser cero. Así, al definir la función real (que la llamaremos función determinante)

$$D(K, \omega) = \ln(|\det(\mathbf{M})|), \quad (101)$$

los puntos de singularidad de $D(K, \omega)$ nos darán la relación de dispersión $\omega = \omega(K)$, para determinar la estructura de bandas. En la ec. (101) aplicamos la función logaritmo ya que buscamos numéricamente los valores para los cuales K y ω cumplen con la condición $\det(\mathbf{M}) \approx 0$. Por lo cual al aplicar el logaritmo al valor absoluto del determinante de $\mathbf{M}$ buscamos únicamente sus puntos con valores mínimos de esta función

en lugar de las singularidades; es decir, los puntos mínimos locales de esta función dan la relación de dispersión.

El MEI basado en ecuaciones integrales para resolver la ecuación de Helmholtz también se puede aplicar para determinar la reflectancia y transmitancia de CFs finitos de 1D y 2D. Una vez que se obtienen las fuentes $\Psi_j(\mathbf{r}')$ y $\partial\Psi_j(\mathbf{r}')/\partial n'_j$, ahora se puede calcular el campo electromagnético en cualquier punto del espacio (dado por $\mathbf{r}$) mediante las mismas ecuaciones integrales, como se mostrará más adelante. En este trabajo aplicamos este método para obtener la reflectancia de un CF 2D finito o truncado formado de arreglos periódicos de red cuadrada de cilindros paralelos infinitamente largos con superficies lisas y rugosas, que contienen medios de LHM o dieléctrico. A continuación se presenta un desarrollo del MEI al aplicarlo a un CF 2D truncado compuesto por inclusiones que tienen una geometría arbitraria.

IV.3. CF 2D finito

Consideremos un CF 2D truncado que contiene medios de LHM o dieléctrico formado por una red cuadrada con p inclusiones que tienen una geometría arbitraria, como se muestra en la fig. 20(a). Éste está iluminado por una onda electromagnética de frecuencia ω cuyo plano de incidencia es el plano xy . Las regiones R_1 y R_{p+3} están compuestas por vacío ($\varepsilon_1(\omega) = 1$, $\mu_1(\omega) = 1$) y las regiones $R_2 \rightarrow R_{p+2}$ están compuestas por cualquier medio isotrópico caracterizado por sus constantes dieléctricas y permeabilidades magnéticas dependientes de la frecuencia $\varepsilon_2(\omega)$, $\mu_2(\omega)$ y $\varepsilon_3(\omega)$, $\mu_3(\omega)$, correspondientes al medio en el cual se encuentran embebidas las inclusiones y el medio de las inclusiones, respectivamente.

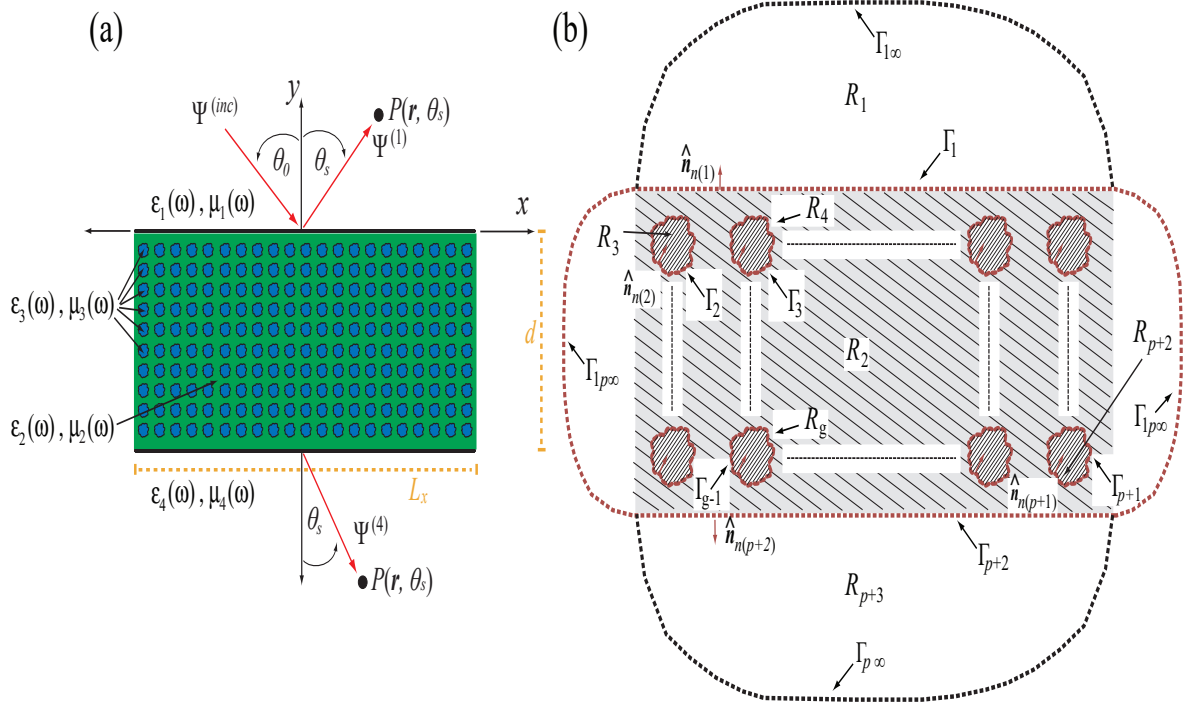


Figura 20. (a) Diagrama de un CF 2D truncado que contiene medios de LHM o dieléctrico, cuyo espesor y longitud son d y L_x , respectivamente. Éste se encuentra formado por una red cuadrada con p inclusiones que tienen una geometría arbitraria. Las regiones 1 y $p + 3$ (R_1 y R_{p+3}) son el vacío ($\varepsilon_1(\omega) = 1$, $\mu_1(\omega) = 1$), las cuales denotamos por los medios $j = 1$ y $j = 4$, respetivamente. Mientras que las regiones $2 \rightarrow p + 2$ ($R_2 \rightarrow R_{p+2}$) son cualquier medio isotrópico caracterizado por sus constantes dieléctricas y permeabilidades magnéticas dependientes de la frecuencia $\varepsilon_2(\omega)$, $\mu_2(\omega)$ y $\varepsilon_3(\omega)$, $\mu_3(\omega)$, correspondientes al medio en el cual se encuentran embebidas las inclusiones denotado por $j = 2$ y el medio que contienen las inclusiones denotado por $j = 3$, respectivamente. La superficie está iluminada por una onda electromagnética representada por $\Psi^{(inc)}(\mathbf{r})$. Los ángulos de incidencia y esparcimiento se denotan por θ_0 y θ_s , respectivamente. (b) Discretización de los contornos cerrados que limitan los materiales del CF 2D truncado, cuyos contornos de integración están indicados por las curvas discontinuas. R_1 y R_{p+3} representan las regiones que encierran los medios de incidencia y de transmisión, respectivamente. R_2 representa la región que encierra al medio en el cual las inclusiones se encuentran embebidas y $R_3 \rightarrow R_{p+2}$ representan las regiones que encierran a los medios que contienen las inclusiones y que son considerados iguales. En nuestro sistema en R_2 la dirección de las normales se eligieron hacia afuera y por consiguiente en las otras regiones la dirección de las normales van hacia adentro.

Al aplicar el teorema de Green a la región R_1 delimitada por el contorno cerrado $C_1 = \Gamma_1 + \Gamma_{1\infty}$ (ver fig. 20(b)) podemos obtener el campo total (Maradudin *et al.*, 1990; Mendoza-Suárez and Méndez, 1997; Mendoza-Suárez *et al.*, 2001; Mendoza-Suárez

et al., 2006, 2007)

$$\Psi_{\text{inc}}(\mathbf{r}) - \frac{1}{4\pi} \oint_{C_1} \left[G_1(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \frac{\partial \Psi_1(\mathbf{r}')}{\partial n'_1} - \Psi_1(\mathbf{r}') \frac{\partial G_1(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{\partial n'_1} \right] ds' = \Psi_1(\mathbf{r}), \quad (102)$$

donde $\Psi_{\text{inc}}(\mathbf{r})$ representa el campo incidente y $G_1(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = i\pi H_0^{(1)}\left(\frac{\omega}{c}|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|\right)$ es la función de Green en la región del vacío. Notemos que en la fig. 20(b) las direcciones de las normales en esta región van hacia adentro y por lo tanto hemos introducido un signo negativo en la integral de contorno en la ec. (102); ya que en el caso infinito habíamos convenido que las normales a la superficie limitada por su correspondiente contorno cerrado se definen hacia afuera y que en caso de estar dirigidas hacia adentro se introducía un signo negativo en la integral de contorno. Además, al considerar las normales hacia adentro, el punto de observación $\mathbf{r}$ está adentro de la región, por lo cual la función escalón referida por la (ec. (61)) es $\theta_1(\mathbf{r}) = 1$, dado que $\mathbf{r} \in S_1$. De una manera similar al aplicar el teorema de Green a las regiones $R_2 \dots R_{p+3}$ delimitadas por los contornos cerrados $C_2 = \Gamma_1 + \Gamma_{g-1} + \Gamma_{1p\infty} + \Gamma_{p+2}$, $C_g = \Gamma_{g-1}$ con $g = 3, \dots, p+2$ y $C_{p+3} = \Gamma_{p+2} + \Gamma_{p\infty}$, respectivamente y al considerar las direcciones de las normales en cada contorno cerrado para cada región (ver fig. 20(b)), se obtiene el siguiente sistema de ecuaciones integrales:

$$\frac{1}{4\pi} \oint_{C_2} \left[G_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \frac{\partial \Psi_2(\mathbf{r}')}{\partial n'_2} - \Psi_2(\mathbf{r}') \frac{\partial G_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{\partial n'_2} \right] ds' = 0, \quad (103)$$

$$-\frac{1}{4\pi} \oint_{C_3} \left[G_3(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \frac{\partial \Psi_3(\mathbf{r}')}{\partial n'_3} - \Psi_3(\mathbf{r}') \frac{\partial G_3(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{\partial n'_3} \right] ds' = \Psi_3(\mathbf{r}), \quad (104)$$

⋮

$$-\frac{1}{4\pi} \oint_{C_{p+2}} \left[G_{p+2}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \frac{\partial \Psi_{p+2}(\mathbf{r}')}{\partial n'_{p+2}} - \Psi_{p+2}(\mathbf{r}') \frac{\partial G_{p+2}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{\partial n'_{p+2}} \right] ds' = \Psi_{p+2}(\mathbf{r}), \quad (105)$$

y

$$-\frac{1}{4\pi} \oint_{C_{p+3}} \left[G_{p+3}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \frac{\partial \Psi_{p+3}(\mathbf{r}')}{\partial n'_{p+3}} - \Psi_{p+3}(\mathbf{r}') \frac{\partial G_{p+3}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{\partial n'_{p+3}} \right] ds' = \Psi_{p+3}(\mathbf{r}). \quad (106)$$

Las contribuciones de las integrales en $\Gamma_{1\infty}$, $\Gamma_{1p\infty}$ y $\Gamma_{p\infty}$ pueden despreciarse, ya que consideramos que estos contornos están tan lejos de modo que los campos en ellos pueden despreciarse, dada la naturaleza de la función de Green que decrece con la distancia. Al considerar las condiciones de frontera (asociadas entre los materiales) sobre el campo y su derivada normal a lo largo de los diferentes contornos Γ_q con $q = 1, 2, \dots, p+1, p+2$ (ver fig. 20(b)) y al discretizar estos contornos en n pequeños intervalos con Δs como la longitud del arco que separa dos puntos consecutivos dentro un perfil dado, como se hizo en el caso infinito y dado que el medio que contienen las inclusiones son iguales $\varepsilon_3(\omega)$, $\mu_3(\omega)$ delimitado por los contornos cerrados C_g con $g = 3, \dots, p+2$, lo denotamos por el medio $j = 3$ y por consiguiente el medio de transmisión $\varepsilon_1(\omega)$, $\mu_1(\omega)$ delimitado por el contorno cerrado C_{p+3} lo denotamos por el medio $j = 4$, podemos expresar el sistema de ecuaciones integrales dado por las ecs. (102)–(106) por el sistema algebraico:

$$\frac{f_1}{f_2} \sum_{n=1}^{N_1} L_{mn(1)}^{(1)} \Phi_{n(1)}^{(2)} + \sum_{n=1}^{N_1} \left(\delta_{mn(1)} - N_{mn(1)}^{(1)} \right) \Psi_{n(1)}^{(2)} = \Psi_m^{\text{inc}}, \quad (107)$$

$$\begin{aligned} & \sum_{n=1}^{N_1} L_{mn(1)}^{(2)} \Phi_{n(1)}^{(2)} - \sum_{n=1}^{N_1} N_{mn(1)}^{(2)} \Psi_{n(1)}^{(2)} + \sum_{n=1}^{N_2} L_{mn(2)}^{(2)} \Phi_{n(2)}^{(2)} \\ & - \sum_{n=1}^{N_2} N_{mn(2)}^{(2)} \Psi_{n(2)}^{(2)} + \dots + \sum_{n=1}^{N_{p+2}} L_{mn(p+2)}^{(2)} \Phi_{n(p+2)}^{(2)} - \sum_{n=1}^{N_{p+2}} N_{mn(p+2)}^{(2)} \Psi_{n(p+2)}^{(2)} = 0, \end{aligned} \quad (108)$$

$$\frac{f_3}{f_2} \sum_{n=1}^{N_2} L_{mn(2)}^{(3)} \Phi_{n(2)}^{(2)} + \sum_{n=1}^{N_2} \left(\delta_{mn(2)} - N_{mn(2)}^{(3)} \right) \Psi_{n(2)}^{(2)} = 0, \quad (109)$$

$$\frac{f_3}{f_2} \sum_{n=1}^{N_3} L_{mn(3)}^{(3)} \Phi_{n(3)}^{(2)} + \sum_{n=1}^{N_3} \left(\delta_{mn(3)} - N_{mn(3)}^{(3)} \right) \Psi_{n(3)}^{(2)} = 0, \quad (110)$$

...

$$\frac{f_3}{f_2} \sum_{n=1}^{N_{p+1}} L_{mn(p+1)}^{(3)} \Phi_{n(p+1)}^{(2)} + \sum_{n=1}^{N_{p+1}} \left(\delta_{mn(p+1)} - N_{mn(p+1)}^{(3)} \right) \Psi_{n(p+1)}^{(2)} = 0, \quad (111)$$

$$\frac{f_4}{f_2} \sum_{n=1}^{N_{p+2}} L_{mn(p+2)}^{(4)} \Phi_{n(p+2)}^{(2)} + \sum_{n=1}^{N_{p+2}} \left(\delta_{mn(p+2)} - N_{mn(p+2)}^{(4)} \right) \Psi_{n(p+2)}^{(2)} = 0. \quad (112)$$

Este sistema algebraico inhomogéneo de ecuaciones lineales determina una matriz cuadrada $\mathbf{M}$ de rango $2(\sum_{q=1}^{p+2} N_q) \times 2(\sum_{q=1}^{p+2} N_q)$, el cual se puede resolver numéricamente para determinar los campos y sus derivadas normales 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 los campos y sus derivadas normales calculados usando la ec. (60) o la ec. (102) en el caso de que el punto en cuestión resida dentro de la región del medio incidente. De esta manera, en nuestro sistema, para calcular el campo total en la región del medio incidente $\Psi_m^{(1)}$ ($\mathbf{r} \in R_1$) usaremos

$$\Psi_m^{(1)} = - \sum_{n=1}^{N_1} L_{mn(1)}^{(1)} \Phi_{n(1)}^{(1)} + \sum_{n=1}^{N_1} N_{mn(1)}^{(1)} \Psi_{n(1)}^{(1)} + \Psi_m^{inc}, \quad (113)$$

y para calcular el campo esparcido en transmisión $\Psi_m^{(4)}$ ($\mathbf{r} \in R_{p+3}$) usaremos

$$\Psi_m^{(4)} = - \sum_{n=1}^{N_{p+2}} L_{mn(p+2)}^{(4)} \Phi_{n(p+2)}^{(4)} + \sum_{n=1}^{N_{p+2}} N_{mn(p+2)}^{(4)} \Psi_{n(p+2)}^{(4)}. \quad (114)$$

Notemos que la ec. (113) nos permite calcular el campo total $\Psi_m^{(1)}$; sin embargo si no se considera el término de la onda incidente Ψ_m^{inc} , entonces $\Psi_m^{(1)}$ representa el campo esparcido en reflexión. Para calcular el campo lejano se utilizarán las expresiones para $L_{mn(q)}^{(j)}$ y $N_{mn(q)}^{(j)}$ que están definidas en las ecs. (77) y (78), respectivamente, donde denotaremos al punto de observación por el vector $\mathbf{r}_m = r_m \sin \theta_s \hat{\mathbf{i}} + r_m \cos \theta_s \hat{\mathbf{j}}$ en el medio de incidencia y $\mathbf{r}_m = r_m \sin \theta_s \hat{\mathbf{i}} - r_m \cos \theta_s \hat{\mathbf{j}}$ en el medio de transmisión, siendo θ_s el ángulo de esparcimiento de la luz (ver fig. 20(a)) y al punto sobre los contornos por $\mathbf{r}_{n(q)} = x_{n(q)} \hat{\mathbf{i}} + y_{n(q)} \hat{\mathbf{j}}$ con $q = 1$ y $p + 2$ correspondientes a los contornos que definen el límite entre las regiones R_1 , R_2 y R_2 , R_{p+3} , respectivamente (ver figs. 20(a) y (b)). Para esto se toma en cuenta que el observador $\mathbf{r}_m$ se encuentra muy lejos del sistema;

es decir, que $r_m \gg r_{n(q)}$ de lo cual se tiene

$$\begin{aligned}
 R_{mn(q)} &= \sqrt{(\mathbf{r}_m - \mathbf{r}_{n(q)}) \cdot (\mathbf{r}_m - \mathbf{r}_{n(q)})} = \sqrt{r_m^2 - 2\mathbf{r}_m \cdot \mathbf{r}_{n(q)} + r_{n(q)}^2} \\
 &= r_m \sqrt{1 - \frac{2\mathbf{r}_m \cdot \mathbf{r}_{n(q)}}{r_m^2} + \left(\frac{r_{n(q)}}{r_m}\right)^2} \approx r_m \sqrt{1 - \frac{2\mathbf{r}_m \cdot \mathbf{r}_{n(q)}}{r_m^2}} \\
 &\approx r_m \left(1 - \frac{\mathbf{r}_m \cdot \mathbf{r}_{n(q)}}{r_m^2}\right) = r_m - \hat{\mathbf{r}}_m \cdot \mathbf{r}_{n(q)},
 \end{aligned} \tag{115}$$

y

$$\sqrt{R_{mn(q)}} \approx \sqrt{r_m} \sqrt{\left(1 - \frac{\mathbf{r}_m \cdot \mathbf{r}_{n(q)}}{r_m^2}\right)} \approx \sqrt{r_m}, \tag{116}$$

por lo que podemos expresar

$$\hat{\mathbf{R}}_{mn(q)} = \frac{\mathbf{R}_{mn(q)}}{R_{mn(q)}} \approx \frac{x_m}{r_m} \hat{\mathbf{i}} + \frac{y_m}{r_m} \hat{\mathbf{j}}, \tag{117}$$

es decir, $\hat{\mathbf{R}}_{mn(q)} \approx \hat{\mathbf{r}}_m$. Al usar estos resultados y una aproximación asintótica para argumentos grandes (Arfken *et al.*, 2012) la función de Hankel $H_0^{(1)}(\zeta)$ se puede expresar como

$$H_0^{(1)}(\zeta) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi\zeta}} e^{-i\frac{\pi}{4}} e^{i\zeta}, \tag{118}$$

y la función $H_1^{(1)}(\zeta)$ como

$$H_1^{(1)}(\zeta) \approx -i\sqrt{\frac{2}{\pi\zeta}} e^{-i\frac{\pi}{4}} e^{i\zeta} = -iH_0^{(1)}(\zeta), \tag{119}$$

donde el argumento es $\zeta = k_j R_{mn(q)}$. Por lo tanto, podemos aproximar $L_{mn(q)}^{(j)}$ y $N_{mn(q)}^{(j)}$ por

$$L_{mn(q)}^{(j)} \approx \varrho_j \frac{e^{ik_j r_m}}{\sqrt{r_m}} e^{-ik_j \hat{\mathbf{r}}_m \cdot \mathbf{r}_{n(q)}}, \tag{120}$$

y

$$\begin{aligned}
 N_{mn(q)}^{(j)} &\approx \left(\varrho_j \frac{e^{ik_j r_m}}{\sqrt{r_m}} e^{-ik_j \hat{\mathbf{r}}_m \cdot \mathbf{r}_{n(q)}} \right) (-ik_j \hat{\mathbf{n}}_{n(q)} \cdot \hat{\mathbf{R}}_{mn(q)}) \\
 &\approx \left(\varrho_j \frac{e^{ik_j r_m}}{\sqrt{r_m}} e^{-ik_j \hat{\mathbf{r}}_m \cdot \mathbf{r}_{n(q)}} \right) (-ik_j \hat{\mathbf{n}}_{n(q)} \cdot \hat{\mathbf{r}}_m),
 \end{aligned} \tag{121}$$

siendo

$$\varrho_j = \left(\frac{i\Delta s}{4} \sqrt{\frac{2}{\pi k_j}} e^{-i\frac{\pi}{4}} \right). \quad (122)$$

Al usar estos resultados, los campos esparcidos en reflexión y transmisión dados por las ecs. (113) y (114) respectivamente, se pueden reescribir como

$$\Psi_m^{(1)} = \varrho_1 \frac{e^{ik_1 r_m}}{\sqrt{r_m}} \sum_{n=1}^{N_1} \left(-ik_1 [\hat{\mathbf{n}}_{n(1)} \cdot \hat{\mathbf{r}}_m] \Psi_{n(1)}^{(1)} - \Phi_{n(1)}^{(1)} \right) e^{-ik_1 \hat{\mathbf{r}}_m \cdot \mathbf{r}_{n(1)}}, \quad (123)$$

y

$$\Psi_m^{(4)} = \varrho_4 \frac{e^{ik_4 r_m}}{\sqrt{r_m}} \sum_{n=1}^{N_{p+2}} \left(-ik_4 [\hat{\mathbf{n}}_{n(p+2)} \cdot \hat{\mathbf{r}}_m] \Psi_{n(p+2)}^{(4)} - \Phi_{n(p+2)}^{(4)} \right) e^{-ik_4 \hat{\mathbf{r}}_m \cdot \mathbf{r}_{n(p+2)}}, \quad (124)$$

donde $\hat{\mathbf{r}}_m = \sin \theta_s \hat{\mathbf{i}} + \cos \theta_s \hat{\mathbf{j}}$ está en el medio de incidencia y $\hat{\mathbf{r}}_m = \sin \theta_s \hat{\mathbf{i}} - \cos \theta_s \hat{\mathbf{j}}$ en el medio de transmisión, $\mathbf{r}_{n(q)} = x_{n(q)} \hat{\mathbf{i}} + y_{n(q)} \hat{\mathbf{j}}$ y $\hat{\mathbf{n}}_{n(q)} = -y'_{n(q)} \hat{\mathbf{i}} + x'_{n(q)} \hat{\mathbf{j}}$ con $q = 1$ y $p + 2$.

De esta manera, para puntos de observación $\mathbf{r}$ lejos de los contornos Γ_q con $q = 1$ y $p + 2$, definimos la amplitud de campo lejano en las zonas de reflexión y transmisión como (Mendoza-Suárez and Méndez, 1997; Mendoza-Suárez *et al.*, 2006)

$$\sigma(\theta_s) = \int_{\Gamma_q} \left\{ -ik_j [\hat{\mathbf{n}}'_q \cdot \hat{\mathbf{r}}] \Psi_{(j)}(\mathbf{r}') - \frac{\partial \Psi_{(j)}(\mathbf{r}')}{\partial n'_q} \right\} e^{-ik_j \mathbf{r}' \cdot \hat{\mathbf{r}}} ds', \quad (125)$$

donde $\hat{\mathbf{n}}'_q$ con $q = 1$ y $p + 2$ es un vector unitario normal a cada interfaz en cada punto, dirigido desde la región R_2 a la región R_1 para $q = 1$ y desde la región R_2 a la región R_{p+3} para $q = p + 2$ y las funciones fuente $\Psi_{(j)}(\mathbf{r}')$ y $\frac{\partial \Psi_{(j)}(\mathbf{r}')}{\partial n'_q}$ con $j = 1$ y 4 se pueden determinar, a partir del sistema algebraico inhomogéneo de ecuaciones lineales dado por las ecs. (107)-(112). El vector unitario $\hat{\mathbf{r}}$ está dado por $\hat{\mathbf{r}} = \sin \theta_s \hat{\mathbf{i}} + \cos \theta_s \hat{\mathbf{j}}$ en el medio de incidencia y $\hat{\mathbf{r}} = \sin \theta_s \hat{\mathbf{i}} - \cos \theta_s \hat{\mathbf{j}}$ en el medio de transmisión, donde θ_s representa el ángulo de esparcimiento.

Los coeficientes de reflexión y transmisión diferenciales, que representan la fracción de potencia incidente y transmitida esparcida por unidad de ángulo, están dados por

(Mendoza-Suárez and Méndez, 1997; Mendoza-Suárez *et al.*, 2006)

$$\left(\frac{\partial R}{\partial \theta_s}\right) = \frac{|\sigma(\theta_s)|^2}{\mathfrak{F}_R(\theta_0)} \quad \text{y} \quad \left(\frac{\partial T}{\partial \theta_s}\right) = \frac{|\sigma(\theta_s)|^2}{\mathfrak{F}_T(\theta_0)}, \quad (126)$$

donde $\mathfrak{F}_\alpha(\theta_0)$ con $\alpha = R$ y T representan un factor de normalización que depende de la onda incidente y de la longitud L en la dirección del eje x (ver fig. 20(a)). Para iluminación con haz Gaussiano de ancho medio g y ángulo de incidencia θ_0 , el factor de normalización viene dado por (Pérez-Aguilar, 2009; Puente-Díaz, 2017)

$$\mathfrak{F}_\alpha(\theta_0) = \begin{cases} 2(2\pi)^{3/2} g k_1 \cos(\theta_0) & \text{si } \alpha = R, \\ 2(2\pi)^{3/2} \left(\frac{n_4}{n_1}\right) g k_4 \cos(\theta_0) & \text{si } \alpha = T. \end{cases} \quad (127)$$

Por otro lado, para iluminación con una onda plana, el factor de normalización toma la forma (Mendoza-Suárez *et al.*, 2006; Puente-Díaz, 2017)

$$\mathfrak{F}_\alpha(\theta_0) = \begin{cases} 8\pi k_1 L_x \cos \theta_0 & \text{si } \alpha = R, \\ 8\pi k_4 \left(\frac{n_4}{n_1}\right) L_x \cos \theta_0 & \text{si } \alpha = T, \end{cases} \quad (128)$$

donde L_x representa la longitud del contorno Γ_1 en la dirección del eje x .

La reflectancia y la transmitancia en función de la frecuencia se obtiene integrando todos los ángulos de esparcimiento en las regiones incidente y de transmisión, esto es (Mendoza-Suárez and Méndez, 1997; Mendoza-Suárez *et al.*, 2006)

$$R(\omega) = \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \left(\frac{\partial R}{\partial \theta_s}\right) d\theta_s \quad \text{y} \quad T(\omega) = \int_{\frac{\pi}{2}}^{-\frac{\pi}{2}} \left(\frac{\partial T}{\partial \theta_s}\right) d\theta_s. \quad (129)$$

El funcionamiento del MEI en sistemas finitos compuestos por una interfaz y dos interfaces iluminados por una onda plana y Gaussiana se analizó en el trabajo (Puente-Díaz, 2017) donde se hizo un comparativo de los resultados numéricos con los analíticos, lográndose una gran concordancia con ambos métodos. Esto dio validez y confiabilidad

al método numérico propuesto para aplicarlo a sistemas más complicados, como fue el CF 2D truncado. En el trabajo mencionado anteriormente también se resalta el hecho de que al iluminar dichos sistemas utilizando una onda Gaussiana, se obtenían mejores resultados numéricos en comparación a una onda plana. Por tal razón, se decidió utilizar este tipo de iluminación en el sistema formado por el CF 2D de longitud finita.

IV.4. Resultados

En las siguientes subsecciones se presentan los resultados obtenidos de las estructuras de bandas de un CF 2D infinito y la respuesta óptica de un CF 2D finito como función del ángulo de incidencia. El CF 2D está formado por una red cuadrada con inclusiones cilíndricas con superficies lisas y rugosas que contienen medios de LHM y/o dieléctrico usando el MEI. Las estructuras de bandas se muestran en términos de la frecuencia reducida $\omega_r = \omega a / 2\pi c$ y el vector de onda de Bloch reducido $k_r = ka / 2\pi$ dentro de la primera zona de Brillouin, para diferentes valores de la fracción de llenado f que está relacionada con el radio de la inclusión cilíndrica como $r_c = (\sqrt{f/\pi})a$. Aquí a es el parámetro de red, que para nuestros cálculos elegimos como la unidad de distancia, $a = 1$.

IV.4.1. CF 2D infinito

A menudo el caso de la rugosidad en la escala de la longitud de onda puede estar presente en las estructuras fotónicas utilizadas en los experimentos de difracción. Por lo tanto, es de interés explorar las consecuencias de tener rugosidad en las paredes que definen las inclusiones de un CF 2D. En el presente trabajo, el perfil de la superficie rugosa en

la pared de inclusión de sección transversal circular se obtiene mediante una realización de un proceso aleatorio de correlación Gaussiana que obedece a una función de densidad de probabilidad exponencial negativa (Maradudin *et al.*, 1990). Este modelo siempre producirá el mismo perfil de superficie irregular a menos que se cambie el valor de la semilla generadora, lo cual modifica el efecto de la rugosidad en las paredes de la inclusión. En este trabajo, para modelar la superficie rugosa se consideró un perfil que tiene rugosidad aleatoria con una longitud de correlación $\delta = 0.0523a$ y una desviación estándar $\sigma = 0.02a$.

En la fig. 21, presentamos las estructuras de bandas calculadas por una red cuadrada de cilindros paralelos infinitamente largos. Se muestran resultados para polarización TE y TM tanto para cilindros dieléctricos en vacío, con permitividades $\varepsilon_2 = 8.9$ y $\varepsilon_1 = 1$ como para huecos cilíndricos en una matriz dieléctrica, con $\varepsilon_2 = 1$ y $\varepsilon_1 = 8.9$. En ambos casos se considera una fracción de llenado de $f = 0.12$ correspondiente a un radio $r_c = 0.1954a$. Observando las estructuras de bandas de las figs. 21(a) y 21(b), se puede ver que hay una ligera variación en las posiciones de algunas secciones de las bandas debido a la rugosidad. En particular, la fig. 21(a) muestra una nueva brecha de banda fotónica angosta en el intervalo de frecuencias normalizadas $\omega_r \in [0.9625, 0.9670]$. También es importante mencionar que elegimos una rugosidad relativamente pequeña con los parámetros indicados en el pie de figura. Por lo tanto, no se han mostrado cambios significativos en los otros casos. No obstante, en el caso de los CFs 2D que incluyen LHM, como mostraremos a continuación, los efectos de rugosidad en las superficies de las inclusiones serán mucho más notables.

Para modelar las propiedades ópticas para el caso de un CF 2D que incluye un LHM

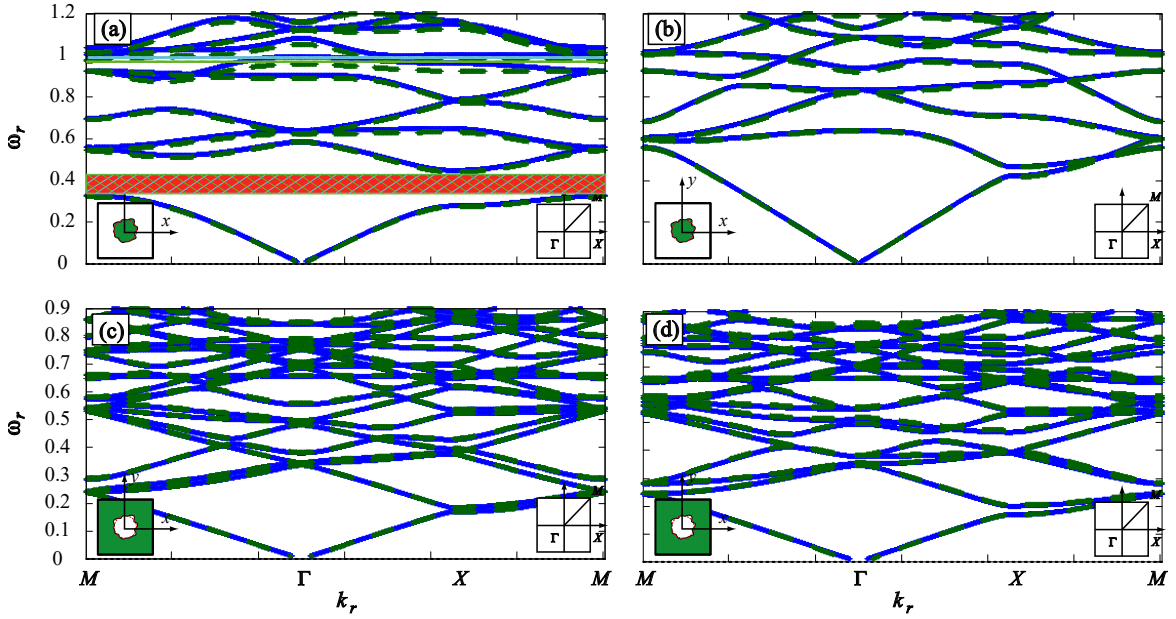


Figura 21. Estructuras de bandas de CFs 2D dieléctricos de red cuadrada de cilindros paralelos infinitamente largos con fracción de llenado de $f = 0.12$ y constantes dieléctricas ((a) y (b)) $\epsilon_1 = 1$, $\epsilon_2 = 8.9$ y ((c) y (d)) $\epsilon_1 = 8.9$, $\epsilon_2 = 1$ bajo polarización ((a) y (c)) y TE y ((b) y (d)) TM. Se presentan resultados para superficies lisas (curvas sólidas de color azul) y para una realización de superficies rugosas (curvas discontinuas de color verde) con una longitud de correlación $\delta = 0.0523a$ y una desviación estándar $\sigma = 0.02a$, donde las secciones lisas y rugosas se muestrearon a intervalos $\Delta s = 0.0222a$. El recuadro izquierdo muestra la celda unitaria en el espacio real y el recuadro derecho, la primera zona de Brillouin de la estructura periódica.

dispersivo, hacemos uso de la siguiente función dieléctrica (Pitarke *et al.*, 1998)

$$\varepsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}, \quad (130)$$

y la permeabilidad magnética (Pendry *et al.*, 1999)

$$\mu(\omega) = 1 - \frac{F\omega^2}{\omega^2 - \omega_0^2}. \quad (131)$$

Estas funciones se muestran en la fig. 22 con los parámetros $\omega_p = 1.592$, $\omega_0 = 0.637$, correspondientes a la frecuencia de plasma y resonancia en unidades reducidas, respectivamente, y el factor $F = 0.56$ (Bria *et al.*, 2004). La región donde este LHM

presenta un índice de refracción negativo está dentro del rango de frecuencia $\omega_0 < \omega < \omega_{LM}$ con $\omega_{LM} = \omega_0 / \sqrt{1 - F}$.

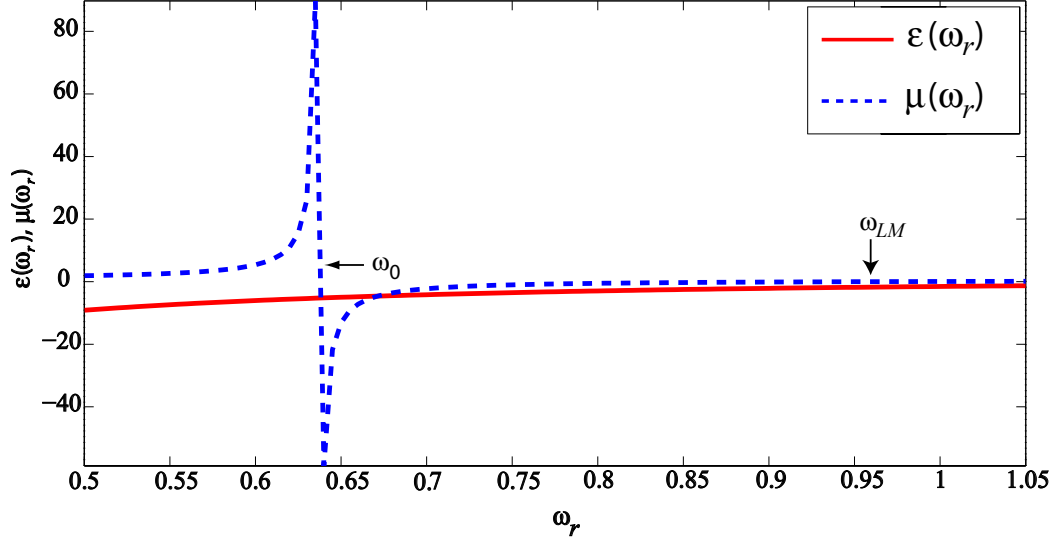


Figura 22. Permitividad ε y permeabilidad μ de un LHM dispersivo como función de la frecuencia reducida ω_r .

En la fig. 23 se muestran los cálculos de las estructuras de bandas para los mismos arreglos periódicos de la fig. 21 pero para medios de LHM dispersivo (Castillo-Gallardo *et al.*, 2019c). De la misma manera, las curvas discontinuas corresponden a una realización de la rugosidad, y las curvas sólidas corresponden al caso liso. Las estructuras de bandas para el caso de cilindros de LHM embebidos en aire ($\epsilon_1 = 1$) con fracción de llenado $f = 0.12$ ($r_c = 0.1954a$) y $f = 0.2$ ($r_c = 0.2523a$), las cuales son obtenidas bajo polarización TM, son mostradas en las figs 23(a) y 23(b), respectivamente. Para el segundo caso de un arreglo periódico de agujeros cilíndricos perforados ($\epsilon_2 = 1$) en una matriz de LHM dispersivo, las estructuras de bandas obtenidas bajo polarización TM se muestran en la fig. 23(c) para $f = 0.12$ y fig. 23(d) para $f = 0.2$. Se encontró que al tomar en cuenta la rugosidad en las superficies de la inclusión, surgen brechas de banda fotónica en regiones donde no las hay cuando la superficie es lisa. Pueden

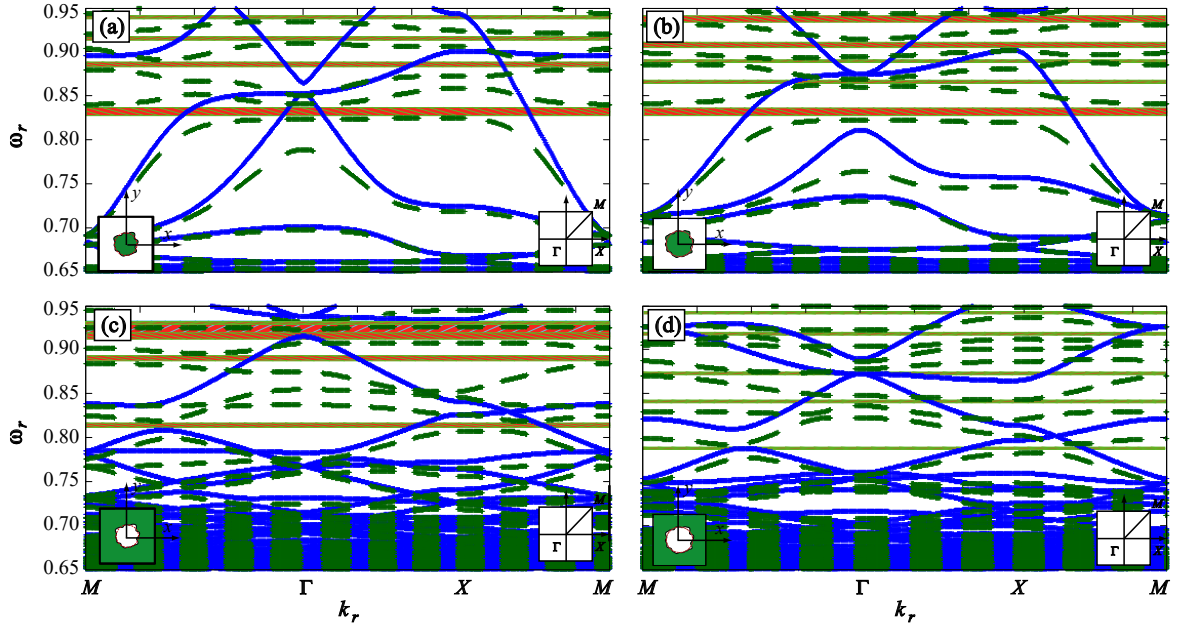


Figura 23. Estructuras de bandas de CFs 2D de red cuadrada con cilindros de LHM dispersivo embebidos en aire ((a) y (b)) y agujeros cilíndricos perforados en una matriz de LHM dispersivo ((c) y (d)) con una fracción de llenado de ((a) y (c)) $f = 0.12$ y ((b) y (d)) $f = 0.2$, bajo polarización TM. Se presentan resultados para superficies lisas (curvas sólidas de color azul) y para una realización de superficies rugosas (curvas discontinuas de color verde) con los mismos parámetros de la longitud de correlación y la desviación estándar de alturas utilizadas para la fig. 21. La sección rugosa se discretizó a intervalos $\Delta s = 0.0158a$ y la sección lisa con $\Delta s = 0.0188a$. El recuadro izquierdo muestra la celda unitaria en el espacio real y el recuadro derecho, la primera zona de Brillouin de la estructura periódica.

verse, por ejemplo, en la fig. 23(a) para los intervalos de frecuencias normalizadas $\omega_r \in [0.82, 0.84]$, $[0.87, 0.89]$, $[0.90, 0.92]$, $[0.93, 0.94]$ y en la fig. 23(c) para $\omega_r \in [0.80, 0.81]$ y $[0.88, 0.90]$. Este mismo comportamiento lo podemos apreciar en las figs. 23(b) y 23(d). También es interesante notar que, en algunos casos, en la región de frecuencias donde una brecha de banda asociada al CF 2D con superficie lisa aparece, se generan brechas más anchas alrededor de las mismas regiones debido a la rugosidad de la superficie. Esto se puede observar en la fig. 23(c) donde aparecen dos nuevas brechas de banda angostas en los intervalos de frecuencia $\omega_r \in [0.90, 0.91]$ y $[0.92, 0.93]$, justo donde el CF 2D con superficie lisa presenta una brecha de banda en el intervalo de frecuencias

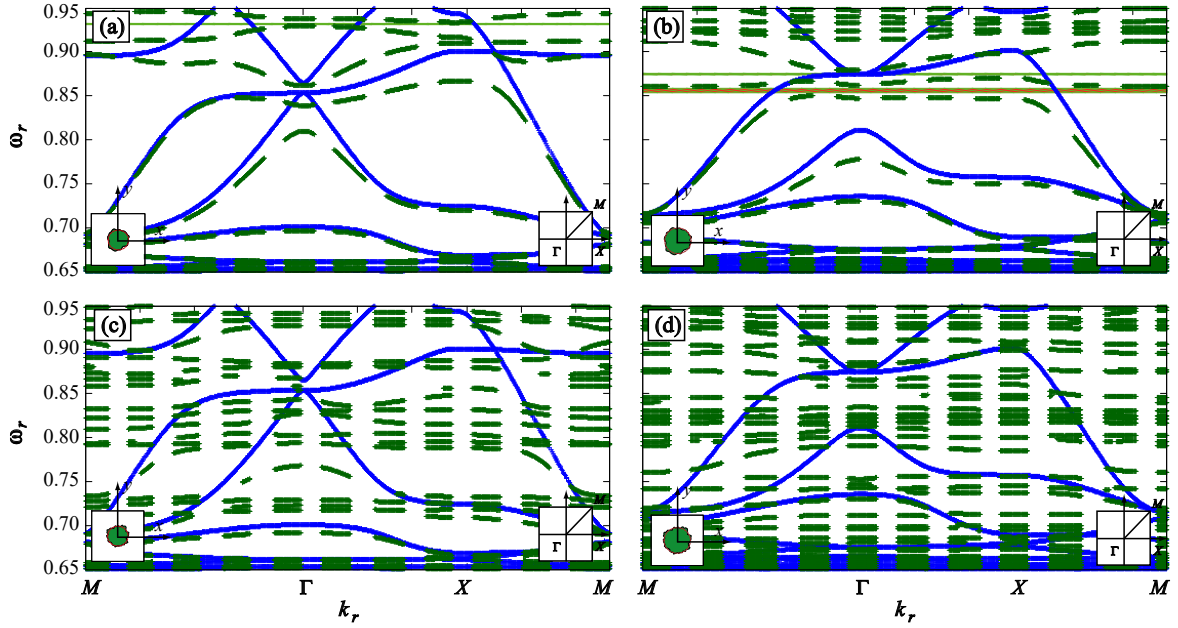


Figura 24. Estructuras de bandas obtenidas con diferentes realizaciones de un proceso aleatorio Gaussiano ((a) y (b)) y Lorentziano ((c) y (d)) de un CF 2D de red cuadrada con cilindros de LHM dispersivo embebidos en aire con una fracción de llenado de ((a) y (c)) $f = 0.12$ y ((b) y (d)) $f = 0.2$, bajo polarización TM. Se presentan resultados para superficies lisas (curvas sólidas de color azul) y para la realización de superficies rugosas (curvas discontinuas de color verde) cuyos parámetros de la longitud de correlación, la desviación estándar de las alturas y el muestreo de la sección rugosa son los mismos que los de la fig. 23. El recuadro izquierdo muestra la celda unitaria en el espacio real y el recuadro derecho la primera zona de Brillouin de la estructura periódica.

$$\omega_r \in [0.91, 0.93].$$

Es importante señalar que al cambiar la forma del perfil rugoso por medio de otro valor de la semilla generadora, se modifica el efecto de la rugosidad en las paredes de inclusión. En las figs. 24(a) y 24(b), se muestran las estructuras de bandas fotónicas obtenidas bajo polarización TM con diferentes realizaciones de un proceso aleatorio de correlación Gaussiana para el caso de cilindros de LHM embebidos en aire. Los valores de las fracciones de llenado son los mismos que los de las figs. 23(a) y 23(b), respectivamente. Los resultados numéricos muestran que si se considera una nueva realización, la nueva estructura de bandas cambia ligeramente y se presenta el mismo

comportamiento descrito en las figs. 23(a) y 23(b); es decir, surgen brechas de banda fotónica en regiones donde no las hay cuando la superficie es lisa.

Otro caso considerado en nuestro trabajo, es cuando el perfil rugoso se modela con una diferente realización de un proceso aleatorio de correlación Lorentziano para el caso de cilindros de LHM embebidos en aire, bajo la polarización TM, con los mismos parámetros de rugosidad y valores de las fracciones de llenado de las figs. 23(a) y 23(b) y cuyos resultados son mostrados en las figs. 24(c) y 24(d). Estos resultados nos muestran un cambio de forma en las estructuras de bandas fotónicas comparadas con las obtenidas con el proceso aleatorio de correlación Gaussiana, por lo que podemos concluir que las estructuras de bandas dependen de la realización particular del perfil de la superficie rugosa.

Bajo la polarización TE, los cálculos obtenidos muestran resultados similares. En las figs. 25 y 26, mostramos las estructuras de bandas fotónicas de CFs 2D obtenidos

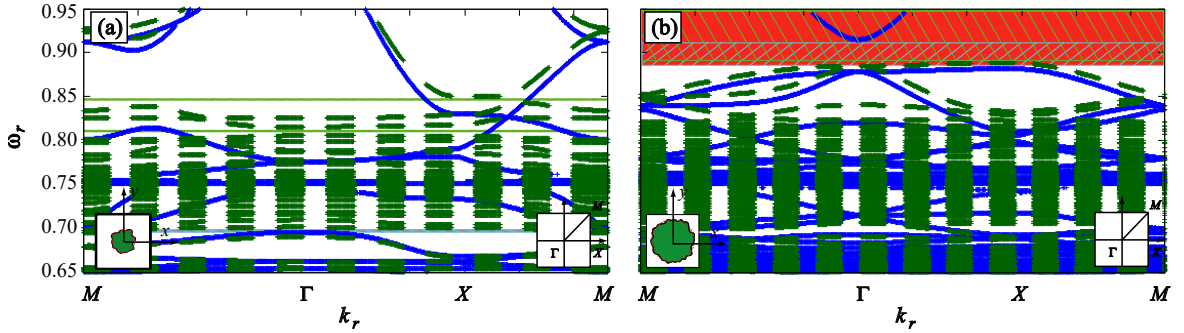


Figura 25. Estructuras de bandas de un CF 2D de red cuadrada con cilindros de LHM dispersivo embebidos en aire con una fracción de llenado de (a) $f = 0.12$ y (b) $f = 0.5$, bajo polarización TE. Se presentan resultados para superficies lisas (curvas sólidas de color azul) y para una realización de superficies rugosas (curvas discontinuas de color verde) con los mismos parámetros de la longitud de correlación y la desviación estándar de alturas utilizadas para la fig. 21. La sección rugosa se muestreó a intervalos $\Delta s = 0.0263a$ y la sección lisa con $\Delta s = 0.0526a$. El recuadro izquierdo muestra la celda unitaria en el espacio real y el recuadro derecho la primera zona de Brillouin de la estructura periódica.

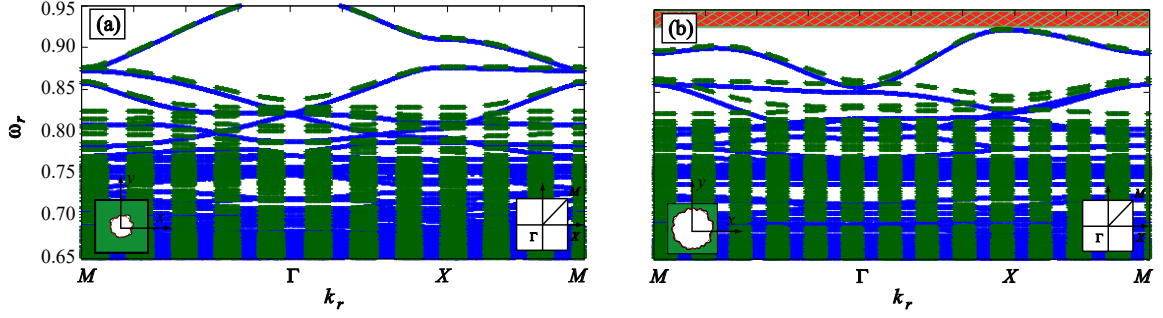


Figura 26. Estructuras de bandas de un CF 2D de red cuadrada con agujeros cilíndricos perforados en una matriz de LHM dispersivo con una fracción de llenado de (a) $f = 0.12$ y (b) $f = 0.5$, bajo polarización TE. Se presentan resultados para superficies lisas (curvas sólidas de color azul) y para una realización de superficies rugosas (curvas discontinuas de color verde) con los mismos parámetros de la longitud de correlación, la desviación estándar de las alturas y la discretización para la sección rugosa que los utilizados para la fig. 25. El recuadro izquierdo muestra la celda unitaria en el espacio real y el recuadro derecho la primera zona de Brillouin de la estructura periódica.

para los mismos arreglos periódicos de la fig. 23. Las estructuras de bandas para el caso de cilindros de LHM embebidos en aire ($\epsilon_1 = 1$) con fracción de llenado $f = 0.12$ ($r_c = 0.1954a$) y $f = 0.5$ ($r_c = 0.3989a$), son mostradas en las figs. 25(a) y 25(b), respectivamente. Para el segundo caso de un arreglo periódico de agujeros cilíndricos perforados ($\epsilon_2 = 1$) en una matriz de LHM dispersivo, las estructuras de bandas obtenidas se muestran en la fig. 26(a) para $f = 0.12$ y fig. 26(b) para $f = 0.5$. De la misma manera, las curvas discontinuas que se muestran corresponden a una realización de la rugosidad, y las curvas continuas corresponden al caso liso.

Podemos observar en las figs. 23-26 que las estructuras de bandas son más sensibles a la rugosidad de la superficie a pequeña escala cuando hay LHMs presentes. Para tener una interpretación física, consideramos que la refracción de la luz por una onda plana incidente en un borde plano que separa el vacío y un LHM puede producir una desviación de un haz de luz angosto mucho mayor que la desviación debida a una interfaz de materiales vacío y dieléctrico (para incidencia oblicua). Debido a este hecho,

el esparcimiento de la luz por las superficies rugosas de los LHMs puede ser mucho más intenso que el debido a las superficies rugosas del material dieléctrico. El fenómeno de esparcimiento de la luz es un obstáculo para transmitir una onda electromagnética a través del cristal fotónico y, por tanto, contribuye a la presencia de brechas de banda. Además, en las figs. 21 y 23-26 se aprecia que sólo se ven afectadas las bandas con frecuencias relativamente grandes. Creemos que la explicación de este hecho es que las altas frecuencias corresponden a pequeñas longitudes de onda y, desde el punto de vista microscópico, estas longitudes de onda pueden “ver” una pequeña estructura de las superficies rugosas. Por lo tanto, el esparcimiento debido a este tipo de estructura es importante, y las bandas se ven afectadas de tal manera que pueden aparecer brechas de banda angostas. Por el contrario, las longitudes de onda grandes no “ven” una estructura pequeña, por lo que las bandas con frecuencias bajas casi no se ven afectadas.

Una implicación técnica importante de estos resultados es que, si somos capaces de fabricar estructuras fotónicas con la misma rugosidad en cada celda unitaria, es probable que observemos estructuras de bandas del tipo que se muestran en las figs. 23-26 representadas por las curvas discontinuas, en lugar del comportamiento del CF 2D perfecto representadas por las curvas sólidas.

IV.4.2. CF 2D finito

En esta subsección aplicamos el MEI aplicado a un CF 2D truncado formado por arreglos de cilindros paralelos infinitamente largos con superficies lisas y rugosas, que contienen medios de LHM o dieléctrico (ver fig. 20(b)). Este sistema fue descrito en la sección IV.3. para obtener la reflectancia y transmitancia del sistema como función del ángulo de incidencia. En estos sistemas se consideraron ondas que se propagan con

vector de onda $\mathbf{k}$ en el plano xy , normal al eje de los cilindros, con polarizaciones tanto TE como TM.

Respuesta óptica de una placa finita (medios dieléctricos)

Los resultados obtenidos de la respuesta óptica mediante el cálculo de la reflectancia y transmitancia como función del ángulo de incidencia para un haz de luz incidente (Onda Gaussiana), con longitud de onda de $1.064 \mu\text{m}$ para una placa finita dieléctrica compuesta de inclusiones cilíndricas de aire limitadas con superficies lisas y rugosas. Las placas formadas por 455 inclusiones (91 inclusiones en dirección del eje x y 5 inclusiones en dirección del eje y), se muestran en las figs. 27(a) y (c) para una fracción de llenado de $f = 0.06$ y en las figs. 27(b) y (d) para $f = 0.22$, para la polarización TE (figs. 27(a) y (b)) y TM (figs. 27(c) y (d)). Para estudiar los efectos de la rugosidad sobre la superficie de la inclusión cilíndrica del sistema finito se consideró un perfil que tiene rugosidad aleatoria obtenido mediante una realización de un proceso aleatorio de correlación Gaussiana, como se hizo para el caso infinito en la subsección previa. En estos sistemas el medio de incidencia y el medio de transmisión, tienen las propiedades ópticas dadas por el índice de refracción $n = 1$ (aire); en cambio, el medio que contiene a las inclusiones tiene las propiedades ópticas dadas por el índice de refracción $n = 3.681$ (silicio). Los parámetros utilizados son: una longitud de las interfaces $L_x = 91 \mu\text{m}$, una distancia entre las interfaces $d = 6 \mu\text{m}$ y un semi-ancho del haz Gaussiano de $g = 3.05 \mu\text{m}$.

Al comparar los resultados de la respuesta óptica mediante el cálculo de la reflectancia y de la transmitancia, como función del ángulo de incidencia de los sistemas formados por la placa finita dieléctrica compuesta de inclusiones cilíndricas de aire de superficies

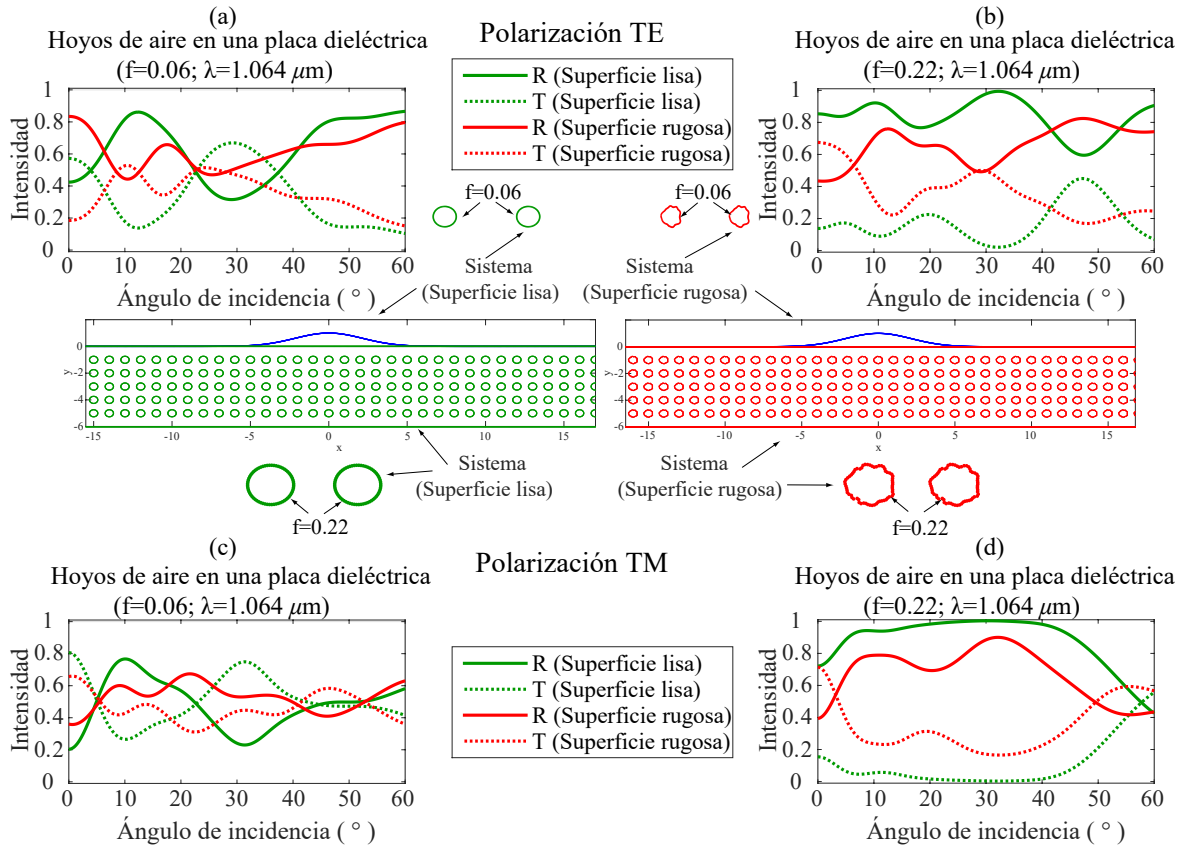


Figura 27. Reflectancia y Transmitancia para una placa finita dieléctrica compuesta de inclusiones cilíndricas de aire de superficies lisas y rugosas con fracciones de llenado de $f = 0.06$ ((a) y (c)) y $f = 0.022$ ((b) y (d)) para las polarizaciones TE ((a) y (b)) y TM ((c) y (d)), mediante el cálculo numérico. Para la realización de la superficie rugosa se usó una longitud de correlación $\delta = 0.05\lambda_0$ y una desviación estándar de las alturas $\sigma = 0.02\lambda_0$ donde hemos elegido el valor de $\lambda_0 = 1 \mu\text{m}$.

lisas y rugosas, llegamos a concluir que la rugosidad aleatoria sobre las superficies de las inclusiones cilíndricas afecta las propiedades reflectivas y transmitivas de la placa finita. Estos resultados son muy importantes, ya que nos indican que este aspecto es importante a tomar en cuenta en el proceso de fabricación de una placa finita.

Respuesta óptica de una placa finita (medios de LHM)

Similarmente como se hizo para la placa dieléctrica, a continuación se muestran los resultados obtenidos de la respuesta óptica para un haz de luz incidente con longitud de onda de $1.33 \mu\text{m}$ para una placa finita de LHM compuesta de inclusiones cilíndricas de aire limitadas por superficies lisas y rugosas. Las placas formadas de 505 inclusiones (101 inclusiones en dirección del eje x y 5 inclusiones en dirección del eje y), se muestran en las figs. 28(a) y (c) para una fracción de llenado de $f = 0.06$ y las figs. 28(b) y (d) para una fracción de llenado de $f = 0.022$.

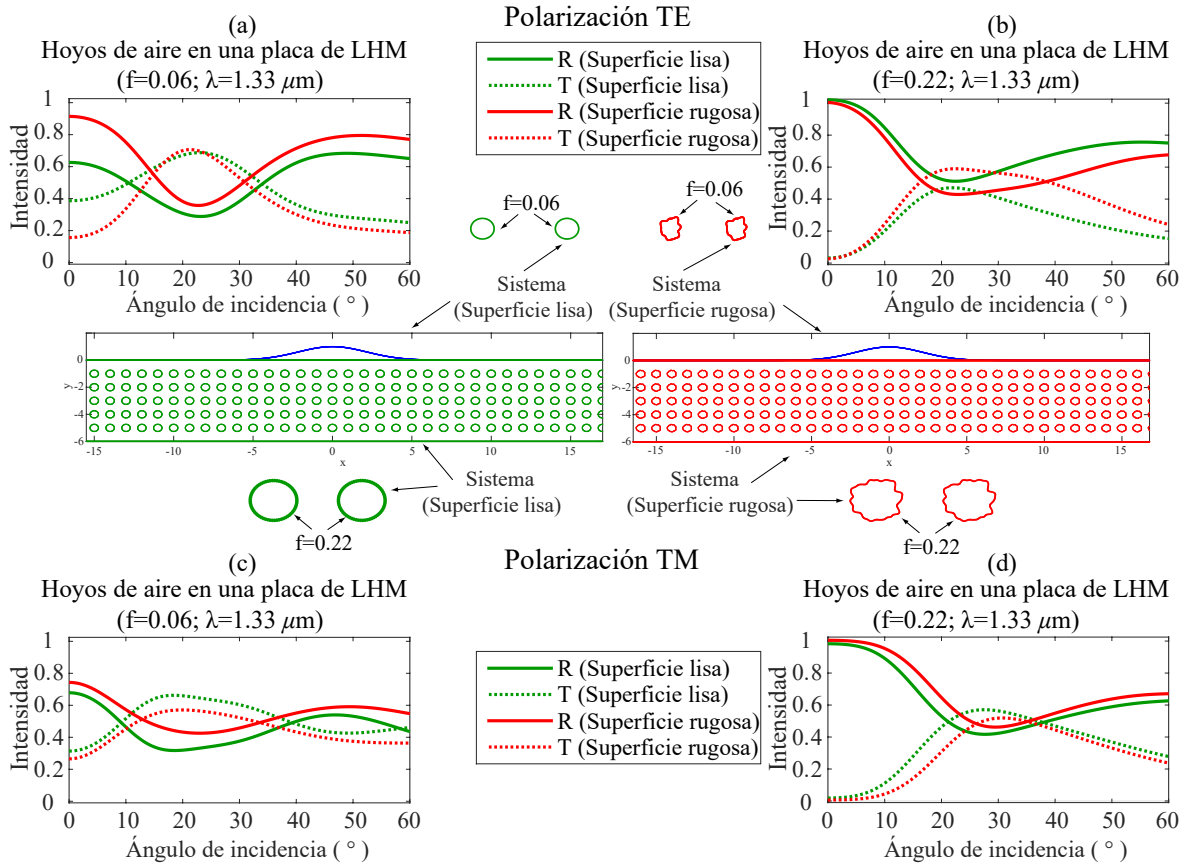


Figura 28. Reflectancia y Transmitancia para una placa finita de LHM compuesta de inclusiones cilíndricas de aire de superficies lisas y rugosas con fracciones de llenado de $f = 0.06$ ((a) y (c)) y $f = 0.022$ ((b) y (d)) para las polarizaciones TE ((a) y (b)) y TM ((c) y (d)). Para la realización de la superficie rugosa se consideraron los mismos parámetros que en la fig. 27.

para $f = 0.22$, para la polarización TE (figs. 28(a) y (b)) y TM (figs. 28(c) y (d)). Para estudiar los efectos de la rugosidad sobre la superficie de la inclusión cilíndrica del sistema finito se consideraron los mismos parámetros que el caso dieléctrico.

Al igual que el caso dieléctrico, en estos sistemas el medio de incidencia y el medio de transmisión, tienen las propiedades ópticas dadas por el índice de refracción $n = 1$ (aire); en cambio, el medio que contiene a las inclusiones tiene las propiedades ópticas dadas por el índice de refracción $n = -1.87$ (obtenido al usar la función dieléctrica ec. (130) y la permeabilidad magnética ec. (131) al usar la frecuencia reducida $\omega_r = 0.75$, correspondiente a la longitud de onda de iluminación $\lambda = 1.33 \mu\text{m}$). Los parámetros utilizados son: una longitud de las interfaces $L_x = 101 \mu\text{m}$, una distancia entre las interfaces $d = 6 \mu\text{m}$ y un semi-ancho del haz Gaussiano de $g = 2.0 \mu\text{m}$.

Al comparar los resultados de la respuesta óptica de los sistemas formados por la placa finita de LHM compuesta de inclusiones cilíndricas de aire de superficies lisas y rugosas, llegamos a concluir que la rugosidad aleatoria sobre las superficies de las inclusiones cilíndricas también afecta las propiedades reflectivas y transmitivas de la placa finita.

Capítulo V

RESPUESTA MACROSCÓPICA: ESQUEMA RECURSIVO DE HAYDOCK

En este capítulo se presenta una teoría y una técnica numérica que utiliza el método recursivo de Haydock para obtener la respuesta dieléctrica macroscópica de un sistema periódico binario. En ella se analizan los casos en que la longitud de onda de la onda electromagnética es más grande que la escala del sistema periódico (caso no retardado) y para cuando ambas son comparables (caso con retardamiento).

V.1. Caso no retardado

Consideramos un sistema periódico de inclusiones nanométricas de forma arbitraria de un medio b incrustadas dentro de un material homogéneo a . Supongamos que cada región $\alpha = a, b$ es lo suficientemente grande para tener una respuesta dieléctrica bien definida ε_α que asumimos local e isotrópica, pero que las partículas y las distancias a sus vecinos próximos son mucho más pequeñas que la longitud de onda libre $\lambda_0 = 2\pi c/\omega$,

con c la velocidad de la luz en el vacío y ω la frecuencia.

La respuesta microscópica está descrita por

$$\varepsilon(\mathbf{r}) = \varepsilon_a - B(\mathbf{r})\varepsilon_{ab}, \quad (132)$$

donde $\varepsilon_{ab} \equiv \varepsilon_a - \varepsilon_b$ y $B(\mathbf{r})$ es la función indicadora para la región b , dada por

$$B(\mathbf{r}) = \begin{cases} 1 & \text{si } \mathbf{r} \in b \\ 0 & \text{si } \mathbf{r} \notin b \end{cases}, \quad (133)$$

la cual asumimos periódica, $B(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = B(\mathbf{r})$, para todo vector $\mathbf{R}$ de una red de Bravais. La ecuación constitutiva $\mathbf{D}(\mathbf{r}) = \varepsilon(\mathbf{r})\mathbf{E}(\mathbf{r})$ puede ser escrita en el espacio recíproco como

$$\mathbf{D}_{\mathbf{G}}(\mathbf{q}) = \sum_{\mathbf{G}'} \varepsilon_{\mathbf{G}\mathbf{G}'} \mathbf{E}_{\mathbf{G}'}(\mathbf{q}), \quad (134)$$

donde $\mathbf{D}(\mathbf{r})$ es el campo de desplazamiento, $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ es el campo eléctrico, $\mathbf{D}_{\mathbf{G}}(\mathbf{q})$ y $\mathbf{E}_{\mathbf{G}}(\mathbf{q})$ son los correspondientes coeficientes de Fourier con vector de onda $\mathbf{q} + \mathbf{G}$, $\mathbf{q}$ es el vector de Bloch conservado, y $\mathbf{G}$ y $\mathbf{G}'$ son vectores de la red recíproca. Aquí, $\varepsilon_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}$ es el coeficiente de Fourier con vector de onda $\mathbf{G} - \mathbf{G}'$ de $\varepsilon(\mathbf{r})$ dado por

$$\varepsilon_{\mathbf{G}\mathbf{G}'} \equiv \varepsilon_{\mathbf{G}-\mathbf{G}'} = \int_{\Omega} \frac{d^3\mathbf{r}}{\Omega} \varepsilon(\mathbf{r}) e^{-i(\mathbf{G}-\mathbf{G}')\cdot\mathbf{r}}, \quad (135)$$

donde Ω denota el volumen de una celda unitaria.

Al sustituir la ec. (132) en la ec. (135) se obtiene

$$\varepsilon_{\mathbf{G}\mathbf{G}'} = \varepsilon_a \delta_{\mathbf{G}\mathbf{G}'} - \varepsilon_{ab} B_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}, \quad (136)$$

con

$$B_{\mathbf{G}\mathbf{G}'} = \int_{\nu} \frac{d^3\mathbf{r}}{\Omega} e^{-i(\mathbf{G}-\mathbf{G}')\cdot\mathbf{r}}, \quad (137)$$

donde ν denota el volumen ocupado por la inclusión.

Podemos expresar la ec. (136) como

$$\varepsilon_{\mathbf{G}\mathbf{G}'} = \varepsilon_{ab}(u\delta_{\mathbf{G}\mathbf{G}'} - B_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}), \quad (138)$$

donde $u = (1 - \varepsilon_b/\varepsilon_a)^{-1}$ es conocida como la variable espectral.

Consideramos ahora un campo externo longitudinal $\mathbf{E}^{\text{ext}}(\mathbf{r}) = -\nabla\phi^{\text{ext}}(\mathbf{r})$ y despreciamos el retardamiento dentro de la pequeña celda unitaria, por lo que podemos suponer que el campo eléctrico total es longitudinal,

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_{\mathbf{G}} \rightarrow \mathbf{E}_{\mathbf{G}}^L &= \sum_{\mathbf{G}'} \hat{P}_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}^L \mathbf{E}_{\mathbf{G}'} \\ &= \sum_{\mathbf{G}'} \hat{\mathbf{G}}\hat{\mathbf{G}}\delta_{\mathbf{G}\mathbf{G}'} \mathbf{E}_{\mathbf{G}'} \\ &= \hat{\mathbf{G}}\hat{\mathbf{G}} \cdot \mathbf{E}_{\mathbf{G}}. \end{aligned} \quad (139)$$

Aquí, dejamos implícita la dependencia en el vector de Bloch $\mathbf{q}$ e introducimos el proyector longitudinal $\hat{P}_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}^L$ tal que al actuar sobre el campo $\mathbf{E}$ produce su proyección longitudinal, dada en el espacio recíproco por la proyección a lo largo del vector de onda $\mathbf{q} + \mathbf{G}$,

$$\begin{aligned} \hat{P}_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}^L &= \frac{\mathbf{q} + \mathbf{G}}{|\mathbf{q} + \mathbf{G}|} \frac{\mathbf{q} + \mathbf{G}}{|\mathbf{q} + \mathbf{G}|} \delta_{\mathbf{G}\mathbf{G}'} \\ &= \hat{\mathbf{G}}\hat{\mathbf{G}}\delta_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}, \end{aligned} \quad (140)$$

donde simplificamos la notación denotando $(\mathbf{q} + \mathbf{G})/|\mathbf{q} + \mathbf{G}|$ por $\hat{\mathbf{G}}$. En el límite de onda larga, $\mathbf{q} \ll \mathbf{G}$ cuando $\mathbf{G} \neq 0$, por lo que aproximamos $\mathbf{q} + \mathbf{G} \approx \mathbf{G}$ y por lo tanto $\hat{\mathbf{G}} \approx \mathbf{G}/|\mathbf{G}|$. Para $\mathbf{G} = 0$ definimos $\hat{\mathbf{0}} \equiv \hat{\mathbf{q}} = \mathbf{q}/|\mathbf{q}|$; debemos definir la dirección en que se propaga la onda de Bloch $\hat{\mathbf{q}}$ para poder definir la dirección longitudinal para $\mathbf{G} = 0$ aún en el límite $|\mathbf{q}| \rightarrow 0$.

Como $\nabla \times \mathbf{E}^{\text{ext}} = \nabla \times \mathbf{D}^L = 0$ y $\nabla \cdot \mathbf{E}^{\text{ext}} = \nabla \cdot \mathbf{D}^L = 4\pi\rho^{\text{ext}}$, podemos identificar $\mathbf{E}^{\text{ext}}$ con $\mathbf{D}^L$, el cual elegimos como onda plana con el vector de onda $\mathbf{q}$ sin fluctuaciones

en la escala de longitud de la celda unitaria, $\mathbf{D}_{\mathbf{G} \neq 0}^L(\mathbf{q}) = 0$. Sustituyendo la ec. (139) en la proyección longitudinal de la ec. (134), obtenemos

$$\begin{aligned}
 \mathbf{D}_{\mathbf{G}}^L &= \sum_{\mathbf{G}'} \hat{P}_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}^L \mathbf{D}_{\mathbf{G}'} \\
 &= \hat{\mathbf{G}}\hat{\mathbf{G}} \cdot \left(\sum_{\mathbf{G}'} \varepsilon_{\mathbf{G}\mathbf{G}'} \mathbf{E}_{\mathbf{G}'}^L \right) \\
 &= \sum_{\mathbf{G}'} \hat{\mathbf{G}}\hat{\mathbf{G}} \cdot \varepsilon_{\mathbf{G}\mathbf{G}'} \sum_{\mathbf{G}''} \hat{P}_{\mathbf{G}'\mathbf{G}''}^L \mathbf{E}_{\mathbf{G}''} \\
 &= \sum_{\mathbf{G}'} \hat{\mathbf{G}} \left(\hat{\mathbf{G}} \cdot \varepsilon_{\mathbf{G}\mathbf{G}'} \hat{\mathbf{G}}' \right) \hat{\mathbf{G}}' \cdot \mathbf{E}_{\mathbf{G}'} \\
 &= \sum_{\mathbf{G}'} (\varepsilon_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}^{LL}) \cdot \mathbf{E}_{\mathbf{G}'}, \tag{141}
 \end{aligned}$$

donde $\varepsilon_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}^{LL}$ corresponde a la *proyección* longitudinal de la respuesta microscópica

$$\varepsilon_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}^{LL} = \hat{\mathbf{G}}\eta_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}\hat{\mathbf{G}}', \tag{142}$$

siendo

$$\eta_{\mathbf{G}\mathbf{G}'} = \hat{\mathbf{G}} \cdot (\varepsilon_{\mathbf{G}\mathbf{G}'} \hat{\mathbf{G}}'), \tag{143}$$

la *componente* longitudinal de la respuesta dieléctrica microscópica.

Por otro lado, dado que el campo eléctrico total es longitudinal, de la ecuación constitutiva $\mathbf{D}^L = \hat{\varepsilon}^{LL} \mathbf{E}^L$ se tiene

$$\mathbf{E}^L = (\hat{\varepsilon}^{LL})^{-1} \mathbf{D}^L. \tag{144}$$

Promediando esta ecuación tenemos

$$\begin{aligned}
 \mathbf{E}_p^L &= \hat{P}_p \mathbf{E}^L \\
 &= \hat{P}_p (\hat{\varepsilon}^{LL})^{-1} \mathbf{D}^L \\
 &= \hat{P}_p (\hat{\varepsilon}^{LL})^{-1} \sum_{\beta} \hat{P}_{\beta} \mathbf{D}^L \\
 &= \sum_{\beta} \hat{P}_p (\hat{\varepsilon}^{LL})^{-1} \hat{P}_{\beta} \hat{P}_{\beta} \mathbf{D}^L \\
 &= \sum_{\beta} (\hat{\varepsilon}^{LL})_{p\beta}^{-1} \mathbf{D}_{\beta}^L, \tag{145}
 \end{aligned}$$

donde $\beta = p, f$. En esta expresión $\hat{P}_p$ y $\hat{P}_f$ son proyectores que extraen el promedio y la parte fluctuante del campo, respectivamente. Como $\mathbf{D}^L$ es el campo externo, entonces no tiene fluctuaciones espaciales inducidas por la textura del sistema; por lo tanto $\mathbf{D}_f^L = 0$ y el campo eléctrico longitudinal promedio es simplemente:

$$\mathbf{E}_p^L = (\hat{\varepsilon}^{LL})_{pp}^{-1} \mathbf{D}_p^L. \quad (146)$$

Los campos de la ec. (146) son campos macroscópicos, por lo cual identificamos la respuesta macroscópica del sistema como

$$(\hat{\varepsilon}_M^{LL})^{-1} = (\hat{\varepsilon}^{LL})_{pp}^{-1}. \quad (147)$$

La ec. (147) se puede interpretar de la siguiente manera: *“el inverso de la proyección longitudinal de la respuesta dieléctrica macroscópica es el promedio del inverso de la parte longitudinal de la respuesta dieléctrica microscópica”*.

En el subespacio de los campos longitudinales, la inversa de la respuesta longitudinal está dada por

$$(\varepsilon_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}^{LL})^{-1} = \hat{\mathbf{G}} \eta_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}^{-1} \hat{\mathbf{G}}', \quad (148)$$

lo cual se puede verificar de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{G}'} (\varepsilon_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}^{LL}) (\varepsilon_{\mathbf{G}'\mathbf{G}''}^{LL})^{-1} &= \sum_{\mathbf{G}'} \left(\hat{\mathbf{G}} \eta_{\mathbf{G}\mathbf{G}'} \hat{\mathbf{G}}' \right) \cdot \left(\hat{\mathbf{G}}' \eta_{\mathbf{G}'\mathbf{G}''}^{-1} \hat{\mathbf{G}}'' \right) \\ &= \sum_{\mathbf{G}'} \hat{\mathbf{G}} \eta_{\mathbf{G}\mathbf{G}'} \eta_{\mathbf{G}'\mathbf{G}''}^{-1} \hat{\mathbf{G}}'' \\ &= \hat{\mathbf{G}} \hat{\mathbf{G}}'' \delta_{\mathbf{G}\mathbf{G}''} \\ &= \hat{\mathbf{G}} \hat{\mathbf{G}} \delta_{\mathbf{G}\mathbf{G}''} \\ &= \hat{P}_{\mathbf{G}\mathbf{G}''}^L \\ &= \mathbb{1}_{\mathbf{G}\mathbf{G}''}, \end{aligned} \quad (149)$$

donde hemos identificado al operador de proyección longitudinal $\hat{P}_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}^L$ con la identidad ($\mathbb{1}_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}$) en el subespacio de campos longitudinales.

El proyector promedio es aquel que remueve del campo todas aquellas componentes con vector recíproco diferente del vector nulo, dado en el espacio recíproco por

$$\hat{P}_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}^p = \delta_{\mathbf{G}\mathbf{0}}\delta_{\mathbf{G}'\mathbf{0}}. \quad (150)$$

Al aplicarlo a la inversa de la respuesta microscópica longitudinal dada por la ec. (148), se obtiene

$$\left((\hat{\varepsilon}^{LL})_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}^{-1} \right)_{pp} = \delta_{\mathbf{G}\mathbf{0}} \left((\hat{\varepsilon}^{LL})^{-1} \right)_{\mathbf{00}} \delta_{\mathbf{G}'\mathbf{0}}. \quad (151)$$

En la ec. (151), la notación $\left((\hat{\varepsilon}^{LL})^{-1} \right)_{\mathbf{00}}$ nos indica que primero invertimos $\hat{\varepsilon}^{LL}$ y luego tomamos la componente $\mathbf{00}$.

Al relacionar la ec. (151) con la ec. (147) y usar la ec. (148), podemos escribir la respuesta macroscópica longitudinal del sistema en la forma

$$\begin{aligned} (\varepsilon_M^{LL})^{-1} &= \left((\varepsilon^{LL})^{-1} \right)_{\mathbf{00}} \\ &= \hat{\mathbf{q}} (\eta^{-1})_{\mathbf{00}} \hat{\mathbf{q}} \\ &= \hat{\mathbf{q}} \xi \hat{\mathbf{q}}, \end{aligned} \quad (152)$$

donde $\xi = (\eta^{-1})_{\mathbf{00}}$ es la componente $\mathbf{00}$ de la inversa de $\eta_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}$. Debemos enfatizar que ξ en la ec. (152) depende en general de la dirección de $\hat{\mathbf{q}}$. Calculando $(\hat{\varepsilon}_M^{LL})^{-1} = \hat{\mathbf{q}} (\hat{\mathbf{q}} \cdot \hat{\varepsilon}_M \cdot \hat{\mathbf{q}})^{-1} \hat{\mathbf{q}}$ para varias direcciones de propagación $\hat{\mathbf{q}}$, podemos obtener todas las componentes del tensor dieléctrico macroscópico $\hat{\varepsilon}_M$ en el límite de longitud de onda larga.

V.1.1. Método recursivo de Haydock

Al sustituir la ec. (138) en la ec. (143) obtenemos

$$\eta_{\mathbf{G}\mathbf{G}'} = \varepsilon_{ab}(u\delta_{\mathbf{G}\mathbf{G}'} - B_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}^{LL}), \quad (153)$$

donde $B_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}^{LL} = \hat{\mathbf{G}} \cdot (B_{\mathbf{G}\mathbf{G}'} \hat{\mathbf{G}}')$ es la componente longitudinal de la función indicadora, representada en el espacio recíproco por la transformada de Fourier espacial $B_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}$ de la función indicadora $\mathbf{B}(\mathbf{r})$ con vector de onda $\mathbf{G} - \mathbf{G}'$. Al invertir la componente longitudinal de la respuesta microscópica dada por la ec. (153) se obtiene

$$\eta_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}^{-1} = \frac{1}{\varepsilon_{ab}}(u\delta_{\mathbf{G}\mathbf{G}'} - B_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}^{LL})^{-1} = \frac{1}{\varepsilon_{ab}}\mathcal{G}_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}, \quad (154)$$

donde $\mathcal{G}_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}(u)$ corresponde a un operador de Green $\hat{\mathcal{G}}$ correspondiente a un hamiltoniano $\hat{\mathcal{H}}$ con elementos de matriz,

$$\hat{\mathcal{H}}_{\mathbf{G}\mathbf{G}'} \equiv B_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}^{LL} = \hat{\mathbf{G}} \cdot (B_{\mathbf{G}\mathbf{G}'} \hat{\mathbf{G}}'), \quad (155)$$

y la variable espectral $u(\omega) \equiv (1 - \varepsilon_b(\omega)/\varepsilon_a(\omega))^{-1}$ juega un papel análogo al de la energía en mecánica cuántica.

De las ecs. (152) y (154) obtenemos $\xi = \mathcal{G}_{\mathbf{0}\mathbf{0}}/\varepsilon_{ab} = \langle \mathbf{0} | \hat{\mathcal{G}}(u) | \mathbf{0} \rangle / \varepsilon_{ab}$, donde $|\mathbf{0}\rangle$ es un *ket* que representa el estado correspondiente a una onda plana con vector de onda $\mathbf{q}$. En general denotamos el estado correspondiente a una onda plana con vector de onda $\mathbf{q} + \mathbf{G}$ como $|\mathbf{G}\rangle$. Esto permite el uso del esquema recursivo de Haydock (Haydock *et al.*, 1972, 1975) para obtener la función de Green proyectada y por lo tanto, la respuesta macroscópica. En el método de Haydock, se comienza con un estado $|0\rangle = |\mathbf{0}\rangle$ normalizado, al cual se le aplica el operador $\hat{\mathcal{H}}$ para obtener un nuevo estado,

$$|\tilde{1}\rangle \equiv \hat{\mathcal{H}} |0\rangle = b_1 |1\rangle + a_0 |0\rangle, \quad (156)$$

donde escribimos el estado auxiliar $|\tilde{1}\rangle$ como una combinación lineal del estado inicial $|0\rangle$ y de un estado nuevo $|1\rangle$ al cual se le exige que sea normalizado y ortogonal a $|0\rangle$. Al multiplicar la ec. (156) por los *bras* $\langle 0|$ y $\langle \tilde{1}|$ y al usar la condición de ortonormalidad obtenemos los coeficientes de Haydock a_0 y b_1 . Estos coeficientes son reales ya que $\hat{\mathcal{H}}$ es hermitiano. De esta manera, a partir de los coeficientes a_0 y b_1 podemos determinar el nuevo estado $|1\rangle$. Al iterar un procedimiento similar al anterior y en cada paso construir un estado nuevo a partir de los anteriores, obtenemos

$$|\tilde{2}\rangle \equiv \hat{\mathcal{H}} |1\rangle = b_2 |2\rangle + a_1 |1\rangle + b_1 |0\rangle, \quad (157)$$

$$|\tilde{3}\rangle \equiv \hat{\mathcal{H}} |2\rangle = b_3 |3\rangle + a_2 |2\rangle + b_2 |1\rangle, \quad (158)$$

$$|\tilde{4}\rangle \equiv \hat{\mathcal{H}} |3\rangle = b_4 |4\rangle + a_3 |3\rangle + b_3 |2\rangle, \quad (159)$$

$\vdots$

$$|\tilde{n}\rangle \equiv \hat{\mathcal{H}} |n-1\rangle = b_n |n\rangle + a_{n-1} |n-1\rangle + b_{n-1} |n-2\rangle, \quad (160)$$

donde obtenemos los coeficientes de Haydock a_n y b_n , a partir de la condición de ortonormalidad $\langle n|m\rangle = \delta_{nm}$, donde $|m\rangle$ es cualquiera de los estados construidos, lo que da como resultado $a_{n-1} = \langle n-1|\tilde{n}\rangle = \langle n-1|\hat{\mathcal{H}}|n-1\rangle$ y $b_n^2 = \langle \tilde{n}|\tilde{n}\rangle - a_{n-1}^2 - b_{n-1}^2$. En la ec. (160) definimos $|-1\rangle = 0$ y $b_0 = 0$.

Para emplear el esquema de Haydock al cálculo de la respuesta macroscópica, podemos identificar al hamiltoniano como

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{\mathbf{G}} \sum_{\mathbf{G}'} |\mathbf{G}\rangle B_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}^{LL} \langle \mathbf{G}'|, \quad (161)$$

donde el *ket* $|\mathbf{G}\rangle$ representa un estado de onda plana con vector de onda $\mathbf{q} + \mathbf{G}$ y $B_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}^{LL}$ corresponde al elemento de matriz del operador $\hat{\mathcal{H}}$. Aplicando este hamiltoniano a un

estado $|n\rangle$ obtenemos

$$\begin{aligned}\hat{\mathcal{H}}|n\rangle &= \sum_{\mathbf{G}} |\mathbf{G}\rangle \hat{\mathbf{G}} \cdot \left(\sum_{\mathbf{G}'} B_{\mathbf{G}\mathbf{G}'} \Phi_n(\mathbf{G}') \right) \\ &= \sum_{\mathbf{G}} |\mathbf{G}\rangle \hat{\mathbf{G}} \cdot (\Psi_n(\mathbf{G})),\end{aligned}\tag{162}$$

donde hemos definido la función de onda vectorial longitudinal $\Phi_n(\mathbf{G}') = \hat{\mathbf{G}}' \langle \mathbf{G}' | n \rangle$ correspondiente a una onda plana asociada al estado $|n\rangle$, evaluada en el espacio recíproco. El término $\Psi_n(\mathbf{G}) = \sum_{\mathbf{G}'} B_{\mathbf{G}\mathbf{G}'} \Phi_n(\mathbf{G}')$ es la transformada de Fourier inversa de $\Psi_n(\mathbf{r}) = B(\mathbf{r}) \Phi_n(\mathbf{r})$, donde $\Phi_n(\mathbf{r})$ se obtiene de una transformada de Fourier rápida con coeficientes $\Phi_n(\mathbf{G}')$.

Ahora, proyectando el resultado de la ec. (162) sobre el estado $|\mathbf{G}\rangle$ obtenemos

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{G} | \hat{\mathcal{H}} | n \rangle &= \sum_{\mathbf{G}'} \delta_{\mathbf{G}\mathbf{G}'} \hat{\mathbf{G}}' \cdot (\Psi_n(\mathbf{G}')) \\ &= \hat{\mathbf{G}} \cdot (\Psi_n(\mathbf{G})).\end{aligned}\tag{163}$$

Dado que $\langle \mathbf{G} | \hat{\mathcal{H}} | n \rangle = \langle \mathbf{G} | \widetilde{n+1} \rangle \equiv \phi_{n+1}(\mathbf{G})$ entonces la ec. (163) se puede reescribir como

$$\phi_{n+1}(\mathbf{G}) = \hat{\mathbf{G}} \cdot (\Psi_n(\mathbf{G})).\tag{164}$$

De las ecs. (162) y (164) obtenemos

$$\begin{aligned}\hat{\mathcal{H}}|n\rangle &= \sum_{\mathbf{G}} |\mathbf{G}\rangle \hat{\mathbf{G}} \cdot (\Psi_n(\mathbf{G})) \\ &= \sum_{\mathbf{G}} |\mathbf{G}\rangle \phi_{n+1}(\mathbf{G}).\end{aligned}\tag{165}$$

Ahora, dado que $a_n = \langle n | \widetilde{n+1} \rangle = \langle n | \hat{\mathcal{H}} | n \rangle$, entonces, al usar la ec. (165) se obtiene

$$\begin{aligned}
a_n &= \sum_{\mathbf{G}} \langle n | \mathbf{G} \rangle \phi_{\widetilde{n+1}}(\mathbf{G}) \\
&= \sum_{\mathbf{G}} (\langle \mathbf{G} | n \rangle)^* \phi_{\widetilde{n+1}}(\mathbf{G}) \\
&= \sum_{\mathbf{G}} \phi_n^*(\mathbf{G}) \phi_{\widetilde{n+1}}(\mathbf{G}).
\end{aligned} \tag{166}$$

Haciendo uso de este resultado podemos obtener fácilmente $\langle \widetilde{n+1} | \widetilde{n+1} \rangle = \sum_{\mathbf{G}} |\phi_{\widetilde{n+1}}(\mathbf{G})|^2$, el cual lo podemos usar para calcular $b_{n+1}^2 = \langle \widetilde{n+1} | \widetilde{n+1} \rangle - a_n^2 - b_n^2$. Finalmente de la ec. (160) se obtiene

$$\begin{aligned}
\langle \mathbf{G} | n+1 \rangle &= \frac{\langle \mathbf{G} | \widetilde{n+1} \rangle - a_n \langle \mathbf{G} | n \rangle - b_n \langle \mathbf{G} | n-1 \rangle}{b_{n+1}}, \\
\phi_{n+1}(\mathbf{G}) &= \frac{\phi_{\widetilde{n+1}}(\mathbf{G}) - a_n \phi_n(\mathbf{G}) - b_n \phi_{n-1}(\mathbf{G})}{b_{n+1}}.
\end{aligned} \tag{167}$$

El desarrollo recursivo se inicia definiendo un estado inicial $|0\rangle$ correspondiente a una onda plana con vector de onda $\mathbf{q}$. Este estado lo podemos escribir como $|0\rangle = |p\rangle$, donde el *ket* $|p\rangle$ corresponde al estado promedio caracterizado por su vector de onda $\mathbf{q}$ y su frecuencia ω , el cual está normalizado ($\langle p | p \rangle = 1$). El estado $|p\rangle$ lo podemos expresar en la forma

$$\begin{aligned}
|p\rangle &= \sum_{\mathbf{G}'} |\mathbf{G}'\rangle \langle \mathbf{G}' | p \rangle \\
&= \sum_{\mathbf{G}'} |\mathbf{G}'\rangle \langle \mathbf{G}' | 0 \rangle \\
&= \sum_{\mathbf{G}'} |\mathbf{G}'\rangle \phi_0(\mathbf{G}').
\end{aligned} \tag{168}$$

Proyectando el resultado sobre el estado $|\mathbf{G}\rangle$ obtenemos

$$\begin{aligned}
\langle \mathbf{G} | p \rangle &= \sum_{\mathbf{G}'} \langle \mathbf{G} | \mathbf{G}' \rangle \phi_0(\mathbf{G}') \\
&= \phi_0(\mathbf{G}),
\end{aligned} \tag{169}$$

de lo cual se obtiene

$$\phi_0(\mathbf{G}) = \delta_{\mathbf{G}0}. \quad (170)$$

De esta manera, a partir de este estado inicial, podemos obtener todos los coeficientes de Haydock y todas las funciones $\phi_n(\mathbf{G})$.

En la base $\{|n\rangle\}$, el hamiltoniano está representado por una matriz tridiagonal simétrica con elementos diagonales principales $\{a_n\}$ y elementos subdiagonales y supra-diagonales $\{b_n\}$ dada por

$$\hat{\mathcal{H}} \rightarrow \begin{pmatrix} a_0 & b_1 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ b_1 & a_1 & b_2 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & b_2 & a_2 & b_3 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & b_3 & a_3 & b_4 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & b_4 & \ddots & \ddots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots \end{pmatrix}. \quad (171)$$

Entonces, podemos escribir $\hat{\mathcal{G}}^{-1} = u - \hat{\mathcal{H}}$ recursivamente en bloques como

$$\mathcal{G}_n^{-1} = \begin{pmatrix} \mathcal{A}_n & \mathcal{B}_{n+1} \\ \mathcal{B}_{n+1}^T & \mathcal{G}_{n+1}^{-1} \end{pmatrix}, \quad (172)$$

con $\mathcal{A}_n = (u - a_n)$, $\mathcal{B}_{n+1} = (-b_{n+1}, 0, 0, \cdots)$ y donde $\hat{\mathcal{G}} \equiv \hat{\mathcal{G}}_0$.

Ahora, escribimos $\mathcal{G}_n$ en bloques como

$$\mathcal{G}_n = \begin{pmatrix} \mathcal{R}_n & \mathcal{P}_{n+1} \\ \mathcal{P}_{n+1}^T & \mathcal{L}_{n+1}^{-1} \end{pmatrix}, \quad (173)$$

siendo

$$\begin{aligned} \mathcal{R}_n &= \frac{1}{\mathcal{A}_n - \mathcal{B}_{n+1} \mathcal{G}_{n+1}^{-1} \mathcal{B}_{n+1}^T} \\ &= \frac{1}{\mathcal{A}_n - b_{n+1}^2 \mathcal{R}_{n+1}}, \end{aligned} \quad (174)$$

obtenido al invertir la ec. (172). Iterando la ec. (174) obtenemos $\mathcal{G}_{00}(u) = \mathcal{R}_0$ dado recursivamente a través de la fracción continua,

$$\xi = \frac{\mathcal{R}_0}{\varepsilon_{ab}} = \frac{u}{\varepsilon_a} \frac{1}{u - a_0 - \frac{b_1^2}{u - a_1 - \frac{b_2^2}{u - a_2 - \frac{b_3^2}{u - a_3 - \frac{b_4^2}{\ddots}}}}}, \quad (175)$$

que puede evaluarse de manera muy eficiente para obtener ξ , la cual corresponde a la componente **00** de la inversa de $\eta_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}$. Así de esta se obtiene la respuesta macroscópica.

Observe que los coeficientes de Haydock dependen sólo de la geometría a través de $B_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}^{LL}$. La dependencia de la composición y la frecuencia está completamente codificada en la variable espectral de valor complejo u .

V.2. Caso con retardamiento

En este caso se obtiene la respuesta dieléctrica macroscópica de sistemas periódicos binarios eliminando la suposición de onda larga. Es decir, permitiendo que la longitud de onda de la onda electromagnética sea comparable con la escala de tamaño característico del sistema periódico.

Consideramos las ecuaciones de Maxwell para un sistema estructurado formado de

materiales no magnéticos y campos monocromáticos,

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = 4\pi\rho^{\text{ext}}, \quad (176)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0, \quad (177)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = \frac{i\omega}{c}\mathbf{B}, \quad (178)$$

$$\nabla \times \mathbf{B} = \frac{4\pi}{c}\mathbf{J}^{\text{ext}} - \frac{i\omega}{c}\mathbf{D}, \quad (179)$$

donde $\mathbf{E}$ es el campo eléctrico, $\mathbf{D}$ es el desplazamiento eléctrico, $\mathbf{B}$ el campo magnético, ρ^{ext} y $\mathbf{J}^{\text{ext}}$ son las densidades de carga y corrientes externas, respectivamente, ω es la frecuencia y c la velocidad de la luz en el vacío.

Aplicando el rotacional a la ec. (178) y sustituyendo la ec. (179) junto con la ecuación constitutiva $\mathbf{D} = \hat{\varepsilon}\mathbf{E}$, se obtiene

$$\nabla \times (\nabla \times \mathbf{E}) = q^2 \left(\frac{i4\pi}{\omega} \mathbf{J}^{\text{ext}} + \hat{\varepsilon} \mathbf{E} \right), \quad (180)$$

donde $q = \omega/c$ es el número de onda de una onda de frecuencia ω que se propaga libremente en el vacío. $\hat{\varepsilon}$ es la función dieléctrica que toma un valor característico para cada uno de los materiales que conforman al sistema binario. Designamos a $\hat{\varepsilon}$ como la respuesta microscópica y la representamos como un operador lineal. Notamos que como $\mathbf{J}^{\text{ext}}$ es una corriente eléctrica externa, no está asociada a la corriente de conducción, de polarización o de magnetización del sistema.

Descomponiendo el campo eléctrico en sus partes longitudinal y transversal del lado izquierdo de la ec. (180), se tiene

$$\begin{aligned} \nabla \times (\nabla \times \mathbf{E}) &= \nabla \times (\nabla \times \mathbf{E}^L + \nabla \times \mathbf{E}^T) \\ &= \nabla(\nabla \cdot \mathbf{E}^T) - \nabla^2 \mathbf{E}^T \\ &= -\nabla^2 \hat{P}_T \mathbf{E}, \end{aligned} \quad (181)$$

donde hemos usado que el rotacional de un campo longitudinal y la divergencia de un campo transversal son nulos. Además, introducimos el proyector transversal $\hat{P}_T = \hat{1} - \hat{P}_L$, tal que al actuar sobre un campo vectorial cualquiera $\mathbf{F}$ obtenemos su proyección transversal $\mathbf{F}_T = \hat{P}_T \mathbf{F}$. Tomando este resultado, podemos escribir la ec. (180) como

$$\hat{\mathcal{W}} \mathbf{E} = -\frac{i4\pi}{\omega} \mathbf{J}^{\text{ext}}, \quad (182)$$

donde

$$\hat{\mathcal{W}} = \hat{\varepsilon} + \frac{1}{q^2} \nabla^2 \hat{P}_T, \quad (183)$$

es el operador de onda microscópico.

Despejando el campo eléctrico de la ec. (182) se obtiene

$$\mathbf{E} = -\frac{i4\pi}{\omega} \hat{\mathcal{W}}^{-1} \mathbf{J}^{\text{ext}}. \quad (184)$$

Al promediar $\mathbf{E}$ obtenemos

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_p &= \hat{P}_p \mathbf{E} \\ &= -\frac{i4\pi}{\omega} \hat{P}_p (\hat{\mathcal{W}})^{-1} \sum_{\beta} \hat{P}_{\beta} \mathbf{J}^{\text{ext}} \\ &= -\frac{i4\pi}{\omega} \sum_{\beta} \hat{P}_p (\hat{\mathcal{W}})^{-1} \hat{P}_{\beta} \hat{P}_{\beta} \mathbf{J}^{\text{ext}} \\ &= -\frac{i4\pi}{\omega} \sum_{\beta} (\hat{\mathcal{W}})_{p\beta}^{-1} \mathbf{J}_{\beta}^{\text{ext}}, \end{aligned} \quad (185)$$

donde $\beta = p, f$. Como $\mathbf{J}^{\text{ext}}$ es una fuente externa, entonces no tiene fluctuaciones espaciales inducidas por la textura del sistema $\mathbf{J}_f^{\text{ext}} = \hat{P}_f \mathbf{J}^{\text{ext}} = 0$ y es igual a su promedio espacial $\mathbf{J}^{\text{ext}} = \mathbf{J}_p^{\text{ext}} = \hat{P}_p \mathbf{J}^{\text{ext}}$. Por lo tanto, el campo eléctrico promedio es simplemente

$$\mathbf{E}_p = -\frac{i4\pi}{\omega} (\hat{\mathcal{W}})_{pp}^{-1} \mathbf{J}^{\text{ext}}. \quad (186)$$

Los campos de la ec. (186) son campos macroscópicos, por lo cual identificamos la inversa del operador de onda macroscópico,

$$(\hat{\mathcal{W}}_M)^{-1} = (\hat{\mathcal{W}})_{pp}^{-1} = \hat{P}_p \hat{\mathcal{W}}^{-1} \hat{P}_p. \quad (187)$$

Podemos expresar este resultado diciendo que el inverso del operador de onda macroscópico es el promedio del inverso del operador de onda microscópico. De esta manera, podemos expresar el operador de onda macroscópico en términos de un operador dieléctrico macroscópico

$$\hat{\mathcal{W}}_M = \hat{\varepsilon}_M + \frac{1}{q^2} \nabla^2 \hat{P}_T, \quad (188)$$

de donde podemos despejar fácilmente $\hat{\varepsilon}_M$.

Consideramos ahora un sistema periódico binario fabricado de dos materiales isotrópicos a y b , con permitividades $\varepsilon_a(\omega)$ y $\varepsilon_b(\omega)$ respectivamente, las cuales en general son funciones complejas de la frecuencia ω . Podemos expresar la respuesta microscópica del sistema por la ec. (132) como

$$\hat{\varepsilon} = \frac{\varepsilon_a(\omega)}{u(\omega)} \left(u(\omega) - \hat{B} \right), \quad (189)$$

donde $u(\omega)$ es la variable espectral y $\hat{B}$ es el operador correspondiente a multiplicar por la función indicadora $B(\mathbf{r})$ en la representación de la posición. De esta manera, podemos reescribir el operador de onda microscópico dado por la ec. (183) como

$$\hat{\mathcal{W}} = \frac{\varepsilon_a(\omega)}{u(\omega)} \left(u(\omega) \hat{g}^{-1} - \hat{B} \right), \quad (190)$$

donde definimos al operador

$$\hat{g}^{-1} = \hat{P}_L + \left(\frac{q^2 \varepsilon_a(\omega) + \nabla^2}{q^2 \varepsilon_a(\omega)} \right) \hat{P}_T, \quad (191)$$

y por tanto

$$\hat{g} = \hat{P}_L + q^2 \varepsilon_a(\omega) (q^2 \varepsilon_a(\omega) + \nabla^2)^{-1} \hat{P}_T. \quad (192)$$

Podemos reescribir la ec. (190) como

$$\hat{\mathcal{W}} = \frac{\varepsilon_a(\omega)}{u(\omega)} \left(u(\omega) - \hat{B}\hat{g} \right) \hat{g}^{-1}, \quad (193)$$

de donde podemos escribir al inverso del operador de onda microscópico como

$$\hat{\mathcal{W}}^{-1} = \frac{u(\omega)}{\varepsilon_a(\omega)} \hat{g} \left(u(\omega) - \hat{B}\hat{g} \right)^{-1}. \quad (194)$$

Al usar este resultado y la ec. (187), obtenemos

$$\begin{aligned} (\hat{\mathcal{W}}_M)^{-1} &= (\hat{\mathcal{W}})_{pp}^{-1} = \hat{P}_p \hat{\mathcal{W}}^{-1} \hat{P}_p \\ &= \frac{u(\omega)}{\varepsilon_a(\omega)} \hat{P}_p \hat{P}_p \hat{g} \left(u(\omega) - \hat{B}\hat{g} \right)^{-1} \hat{P}_p \\ &= \frac{u(\omega)}{\varepsilon_a(\omega)} \hat{P}_p \hat{g} \hat{P}_p \hat{P}_p \left(u(\omega) - \hat{B}\hat{g} \right)^{-1} \hat{P}_p \\ &= \frac{u(\omega)}{\varepsilon_a(\omega)} \hat{g}_{pp} \left(u(\omega) - \hat{B}\hat{g} \right)_{pp}^{-1}, \end{aligned} \quad (195)$$

donde hemos usado la propiedad de que el operador promedio es idempotente (el promedio del promedio es el promedio) y que el operador $\hat{g}$ conmuta con el operador promedio (ya que $\hat{g}$ no mezcla distintos vectores de onda).

Nótese que el término $\left(u(\omega) - \hat{B}\hat{g} \right)_{pp}^{-1}$ de la ec. (195) contiene una expresión análoga a un operador de Green

$$\hat{\mathcal{G}} = \left(\varepsilon - \hat{\mathcal{H}} \right)^{-1}, \quad (196)$$

como en un problema de mecánica cuántica, donde identificamos la energía compleja ε con la variable espectral $u(\omega)$ y al hamiltoniano con el producto $\hat{B}\hat{g}$. Este no sería un operador hermitiano si usáramos la definición usual de producto escalar entre dos estados $(\phi|\psi) \equiv \langle \phi|\psi \rangle$, pero se vuelve hermitiano si empleamos un producto escalar bajo la métrica $\hat{g}$ de la forma $(\phi|\psi) \equiv \langle \phi|\hat{g}|\psi \rangle$,

$$\begin{aligned} (\phi|\hat{B}\hat{g}|\psi) &= \langle \phi|\hat{g}\hat{B}\hat{g}|\psi \rangle = \left\langle \phi \left| \hat{g}\hat{B}\hat{g}\psi \right. \right\rangle = \left\langle \hat{g}\hat{B}\hat{g}\psi \left| \phi \right. \right\rangle^* = \langle \psi | \left(\hat{g}\hat{B}\hat{g} \right)^\dagger | \phi \rangle^* \\ &= \langle \psi | \hat{g}^\dagger \hat{B}^\dagger \hat{g}^\dagger | \phi \rangle^* = \langle \psi | \hat{g}\hat{B}\hat{g} | \phi \rangle^* = (\psi|\hat{B}\hat{g}|\phi)^*. \end{aligned} \quad (197)$$

Notamos que en el desarrollo anterior hemos usado que el operador $\hat{g}$ es hermitiano, lo cual se cumple cuando la función dieléctrica del material homogéneo a , ε_a , toma valores reales, con parte imaginaria nula.

La analogía del operador de onda macroscópico con la función de Green de problemas de mecánica cuántica, nos permite obtener la respuesta macroscópica generalizando el método presentado en la sección previa. En particular, recurrimos a la recursión del método de Haydock, el cual comienza con el *ket* $|0\rangle$ que representa el estado inicial correspondiente a una onda plana con vector de onda $\mathbf{q}$ y cierta polarización $\mathbf{e}$. Además está normalizado respecto a la métrica $\hat{g}$; es decir, $\langle 0|\hat{g}|0\rangle = g_0$, con $g_0 = \pm 1$. Notamos que el operador $\hat{g}$ no es positivo definido, por lo cual el *cuadrado* de un estado podría ser una cantidad negativa. Por ello, introducimos los coeficientes g_n .

Al aplicar el operador $\hat{B}\hat{g}$ sobre el estado $|0\rangle$ se obtiene un nuevo estado

$$|\tilde{1}\rangle \equiv \hat{B}\hat{g}|0\rangle = b_1|1\rangle + a_0|0\rangle, \quad (198)$$

el cual se expresa como una combinación lineal del estado inicial $|0\rangle$ y de un estado nuevo $|1\rangle$ al cual se le exige que sea normalizado y ortogonal a $|0\rangle$. Al multiplicar la ec. (198) por la métrica $\hat{g}$ y por los *bras* $\langle 0|$ y $\langle \tilde{1}|$ y al usar la condición de ortonormalidad bajo la métrica $\hat{g}$, $\langle n|\hat{g}|m\rangle = g_n\delta_{n,m}$ con $g_n = \pm 1$, obtenemos los coeficientes de Haydock a_0 y b_1 . Notamos de nuevo que $\hat{g}$ no es un operador positivo definido. Estos son

$$\begin{aligned} a_0 &= \frac{\langle 0|\hat{g}\hat{B}\hat{g}|0\rangle}{g_0} \\ &= g_0 \langle 0|\hat{g}\hat{B}\hat{g}|0\rangle, \end{aligned} \quad (199)$$

y

$$\begin{aligned} |b_1|^2 &= \frac{\langle \tilde{1}|\hat{g}\hat{B}\hat{g}|\tilde{1}\rangle - g_0a_0}{g_1} \\ &= g_1 \left(\langle \tilde{1}|\hat{g}\hat{B}\hat{g}|\tilde{1}\rangle - g_0a_0 \right), \end{aligned} \quad (200)$$

donde escogemos el signo de g_1 tal que permita obtener b_1^2 positivo y de éste obtener b_1 real y positivo. Nótese que hemos usado la notación $1/g_n = g_n$ ya que se cumple que $g_n^2 = 1$.

De esta manera, a partir de los coeficientes a_0 y b_1 podemos determinar el nuevo estado $|1\rangle$. Al iterar un procedimiento similar al anterior y en cada paso construir un estado nuevo a partir de los anteriores, se obtiene

$$|\tilde{2}\rangle \equiv \hat{B}\hat{g}|1\rangle = b_2|2\rangle + a_1|1\rangle + g_1g_0b_1|0\rangle, \quad (201)$$

$$|\tilde{3}\rangle \equiv \hat{B}\hat{g}|2\rangle = b_3|3\rangle + a_2|2\rangle + g_2g_1b_2|1\rangle, \quad (202)$$

$$|\tilde{4}\rangle \equiv \hat{B}\hat{g}|3\rangle = b_4|4\rangle + a_3|3\rangle + g_3g_2b_3|2\rangle, \quad (203)$$

$\vdots$

$$|\widetilde{n+1}\rangle \equiv \hat{B}\hat{g}|n\rangle = b_{n+1}|n+1\rangle + a_n|n\rangle + g_ng_{n-1}b_n|n-1\rangle, \quad (204)$$

donde obtenemos los coeficientes de Haydock a_n y b_n a partir de la condición de ortonormalidad $\langle n|\hat{g}|m\rangle = g_n\delta_{n,m}$. El *ket* $|m\rangle$ es cualquiera de los estados construidos y $g_n = \pm 1$; entonces, $a_n = g_n \langle n|\hat{g}\hat{B}\hat{g}|n\rangle$ y $|b_{n+1}|^2 = g_{n+1} \left(\langle \widetilde{n+1}|\hat{g}|\widetilde{n+1}\rangle - a_n^2g_n - b_n^2g_{n-1} \right)$. En la ec. (204) establecemos $|-1\rangle = 0$.

Para emplear el esquema de Haydock al cálculo de la respuesta macroscópica podemos identificar al operador $\hat{B}\hat{g}$ (hermitiano bajo la métrica $\hat{g}$) como

$$\hat{B}\hat{g} = \sum_{\mathbf{G}} \sum_{\mathbf{G}'} \sum_i \sum_j |\mathbf{G}i\rangle B_{\mathbf{G}\mathbf{G}'} g_{\mathbf{G}'\mathbf{G}'}^{ij} \langle \mathbf{G}'j|, \quad (205)$$

donde $|\mathbf{G}i\rangle$ corresponde a una onda plana con vector de onda $\mathbf{q} + \mathbf{G}$ polarizada en la i -ésima dirección cartesiana y $B_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}$ y $g_{\mathbf{G}'\mathbf{G}'}^{ij}$ son los elementos de matriz de los operadores $\hat{B}$ y $\hat{g}$ respectivamente. Los estados $|\mathbf{G}i\rangle$ están normalizados bajo la métrica ordinaria.

De la ec. (205) obtenemos las componentes del operador $\hat{g}$ con índices cartesianos $i, j = x, y, z$ correspondientes a los vectores recíprocos $\mathbf{G}$ y $\mathbf{G}'$,

$$g_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}^{ij} = \frac{q^2 \varepsilon_a(\omega) \delta_{ij} - (q_i + G_i)(q_j + G_j)}{q^2 \varepsilon_a(\omega) - |\mathbf{q} + \mathbf{G}|^2} \delta_{\mathbf{G}\mathbf{G}'} . \quad (206)$$

Esta expresión se obtiene al usar la representación en el espacio recíproco de los operadores $\hat{P}_L$, $\hat{P}_T$ y ∇^2 dados por

$$\hat{P}_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}^L = \frac{\mathbf{q} + \mathbf{G}}{|\mathbf{q} + \mathbf{G}|} \frac{\mathbf{q} + \mathbf{G}}{|\mathbf{q} + \mathbf{G}|} \delta_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}, \quad (207)$$

$$\hat{P}_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}^T = \left(\mathbb{1} - \frac{\mathbf{q} + \mathbf{G}}{|\mathbf{q} + \mathbf{G}|} \frac{\mathbf{q} + \mathbf{G}}{|\mathbf{q} + \mathbf{G}|} \right) \delta_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}, \quad (208)$$

$$\nabla_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}^2 = -|\mathbf{q} + \mathbf{G}|^2 \delta_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}, \quad (209)$$

y al ser sustituidos en la ec. (192).

Al aplicar el operador $\hat{B}\hat{g}$ a un estado $|n\rangle$ normalizado bajo la métrica $\hat{g}$, obtenemos

$$\begin{aligned} \hat{B}\hat{g}|n\rangle &= \sum_{\mathbf{G}} \sum_i |\mathbf{G}i\rangle \left(\sum_{\mathbf{G}'} B_{\mathbf{G}\mathbf{G}'} \Phi_n^i(\mathbf{G}') \right) \\ &= \sum_{\mathbf{G}} \sum_i |\mathbf{G}i\rangle \Psi_n^i(\mathbf{G}), \end{aligned} \quad (210)$$

siendo

$$\Phi_n^i(\mathbf{G}') \equiv \langle \mathbf{G}'i | \hat{g} | n \rangle = \sum_j g_{\mathbf{G}'\mathbf{G}'}^{ij} \langle \mathbf{G}'j | n \rangle . \quad (211)$$

El término $\Psi_n^i(\mathbf{G}) = \sum_{\mathbf{G}'} B_{\mathbf{G}\mathbf{G}'} \Phi_n^i(\mathbf{G}')$ es la transformada de Fourier inversa de $\Psi_n^i(\mathbf{r}) = B(\mathbf{r}) \Phi_n^i(\mathbf{r})$, donde $\Phi_n^i(\mathbf{r})$ se obtiene de una transformada de Fourier rápida con coeficientes $\Phi_n^i(\mathbf{G}')$.

Ahora, proyectando el resultado de la ec. (210) sobre el estado $|\mathbf{G}i\rangle$ obtenemos

$$\langle \mathbf{G}i | \hat{B}\hat{g} | n \rangle = \Psi_n^i(\mathbf{G}). \quad (212)$$

Dado que $\langle \mathbf{G}i | \hat{B}\hat{g} | n \rangle = \langle \mathbf{G}i | \widetilde{n+1} \rangle \equiv \phi_{n+1}^i(\mathbf{G})$, entonces

$$\phi_{n+1}^i(\mathbf{G}) = \Psi_n^i(\mathbf{G}), \quad (213)$$

por lo que de las ecs. (210) y (213) obtenemos

$$\hat{B}\hat{g} | n \rangle = \sum_{\mathbf{G}} \sum_i |\mathbf{G}i\rangle \phi_{n+1}^i(\mathbf{G}). \quad (214)$$

Ahora, dado que $a_n = g_n \langle n | \hat{g} | \widetilde{n+1} \rangle = g_n \langle n | \hat{g}\hat{B}\hat{g} | n \rangle$, al usar la ec. (214) se obtiene

$$a_n = g_n \sum_{\mathbf{G}} \sum_i \sum_j \phi_n^{j*}(\mathbf{G}) (g_{\mathbf{G}\mathbf{G}}^{ij})^* \phi_{n+1}^i(\mathbf{G}). \quad (215)$$

Usando estos resultados podemos calcular $\langle \widetilde{n+1} | \hat{g} | \widetilde{n+1} \rangle$, obteniendo

$$\langle \widetilde{n+1} | \hat{g} | \widetilde{n+1} \rangle = \sum_{\mathbf{G}} \sum_i \sum_j \phi_{n+1}^{i*}(\mathbf{G}) g_{\mathbf{G}\mathbf{G}}^{ij} \phi_{n+1}^j(\mathbf{G}), \quad (216)$$

lo cual podemos usar para calcular $|b_{n+1}|^2 = g_{n+1} \left(\langle \widetilde{n+1} | \hat{g} | \widetilde{n+1} \rangle - a_n^2 g_n - b_n^2 g_{n-1} \right)$.

Finalmente, de la ec. (204) se obtiene

$$\phi_{n+1}^i(\mathbf{G}) = \frac{\phi_{n+1}^i(\mathbf{G}) - a_n \phi_n^i(\mathbf{G}) - b_n g_n g_{n-1} \phi_{n-1}^i(\mathbf{G})}{b_{n+1}}. \quad (217)$$

El desarrollo recursivo se inicia definiendo un estado inicial $|0\rangle$, correspondiente a una onda plana con vector de onda $\mathbf{q}$ y cierta polarización $\mathbf{e}$, el cual está normalizado respecto a la métrica $\hat{g}$ ($\langle 0 | \hat{g} | 0 \rangle = g_0 = \pm 1$). Escribimos este estado como

$$|0\rangle = b_0^{-1} |p\rangle = b_0^{-1} |\omega, \mathbf{q}; \mathbf{e}\rangle, \quad (218)$$

donde el *ket* $|p\rangle$ corresponde al estado *promedio* que representa una onda plana caracterizada por su vector de onda $\mathbf{q}$, su frecuencia ω y su polarización $\mathbf{e}$, normalizado bajo

la métrica ordinaria $\langle p|p\rangle = 1$. Se puede escoger b_0 como un número real positivo tal que $b_0^2 = \langle p|\hat{g}|p\rangle g_0$. Podemos expresar al estado $|p\rangle$ en la forma

$$\begin{aligned} |p\rangle &= \sum_{\mathbf{G}'} \sum_j |\mathbf{G}'j\rangle \langle \mathbf{G}'j|p\rangle \\ &= b_0 \sum_{\mathbf{G}'} \sum_j |\mathbf{G}'j\rangle \langle \mathbf{G}'j|0\rangle \\ &= b_0 \sum_{\mathbf{G}'} \sum_j |\mathbf{G}'j\rangle \phi_0^j(\mathbf{G}'). \end{aligned} \quad (219)$$

Proyectando el resultado de la ec. (219) sobre el estado $|\mathbf{G}i\rangle$, obtenemos

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{G}i|p\rangle &= b_0 \sum_{\mathbf{G}'} \sum_j \langle \mathbf{G}i|\mathbf{G}'j\rangle \phi_0^j(\mathbf{G}') \\ &= b_0 \langle \mathbf{G}i|\mathbf{G}i\rangle \phi_0^i(\mathbf{G}) \\ &= b_0 \phi_0^i(\mathbf{G}), \end{aligned} \quad (220)$$

de lo cual se llega a

$$\phi_0^i(\mathbf{G}) = \frac{1}{b_0} \delta_{\mathbf{G}\mathbf{0}} e_i, \quad (221)$$

donde e_i denota la i -ésima componente del vector de polarización. De esta manera, a partir de este estado inicial, podemos obtener todos los coeficientes de Haydock y todas las funciones $\phi_n^i(\mathbf{G})$.

El operador $\hat{B}\hat{g}$ se representa en la base $\{|n\rangle\}$ por la matriz tridiagonal

$$\hat{B}\hat{g} \rightarrow \begin{pmatrix} a_0 & g_0 g_1 b_1 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ b_1 & a_1 & g_1 g_2 b_2 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & b_2 & a_2 & g_2 g_3 b_3 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & b_3 & a_3 & g_3 g_4 b_4 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & b_4 & \ddots & \ddots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots \end{pmatrix}. \quad (222)$$

Para obtener el inverso del operador de onda macroscópico, consideramos la ec. (194), la cual al definir al operador $\hat{\mathcal{G}} = \left(u(\omega) - \hat{B}\hat{g}\right)^{-1}$ y al promediar $\hat{\mathcal{W}}^{-1}$ obtenemos

$$\begin{aligned} (\hat{\mathcal{W}}_M)^{-1} &= \frac{u(\omega)}{\varepsilon_a(\omega)} \langle p | \hat{g} \hat{\mathcal{G}} | p \rangle \\ &= \frac{u(\omega)}{\varepsilon_a(\omega)} b_0^2 \langle 0 | \hat{g} \hat{\mathcal{G}} | 0 \rangle, \end{aligned} \quad (223)$$

donde hemos usado $|p\rangle = b_0 |0\rangle$, el cual es el estado promedio con $\langle p | p \rangle = 1$ y $|0\rangle$ es el estado inicial con $\langle 0 | \hat{g} | 0 \rangle = g_0$.

Ahora, consideremos un operador cualquiera $\hat{\mathcal{O}}$ actuando sobre un vector cualquiera $|\phi\rangle = \sum_m |m\rangle \phi_m$ y dando como resultado un vector $|\psi\rangle = \sum_r |r\rangle \psi_r = \hat{\mathcal{O}} |\phi\rangle$. Aquí, se está sumando sobre vectores de una base ortonormal con métrica no positiva definida $\hat{g}$; es decir, $\langle q | \hat{g} | r \rangle = g_q \delta_{qr}$. Entonces, multiplicando $|\psi\rangle$ por $\langle n | \hat{g}$, se obtiene

$$\langle n | \hat{g} | \psi \rangle = \sum_r \langle n | \hat{g} | r \rangle \psi_r = g_n \psi_n, \quad (224)$$

y por otro lado

$$\langle n | \hat{g} | \psi \rangle = \sum_m \langle n | \hat{g} \hat{\mathcal{O}} | m \rangle \phi_m. \quad (225)$$

De las ecs. (224) y (225) despejamos ψ_n y obtenemos

$$\psi_n = \sum_m \frac{1}{g_n} \langle n | \hat{g} \hat{\mathcal{O}} | m \rangle \phi_m. \quad (226)$$

La ec. (226) la podemos escribir como una ecuación matricial de la forma

$$\psi_n = \sum_m O_{nm} \phi_m, \quad (227)$$

donde identificamos los elementos de matriz por

$$O_{nm} = \frac{1}{g_n} \langle n | \hat{g} \hat{\mathcal{O}} | m \rangle. \quad (228)$$

Al usar el resultado de la ec. (228), podemos identificar $\mathcal{G}_{00} = \langle 0 | \hat{g} \hat{\mathcal{G}} | 0 \rangle / g_0$ en la ec. (223) y obtener

$$\begin{aligned} \mathcal{W}_M^{-1} &= \frac{b_0^2}{g_0} \frac{u(\omega)}{\varepsilon_a(\omega)} \mathcal{G}_{00} \\ &= g_0 b_0^2 \frac{u(\omega)}{\varepsilon_a(\omega)} \mathcal{G}_{00}, \end{aligned} \quad (229)$$

donde hemos usado que $1/g_0 = g_0$, por lo que da igual ponerlo en el denominador o en el numerador. El elemento de matriz $\mathcal{G}_{00}$ está dado por la fracción continua de Haydock; es decir, éste se obtiene al invertir la matriz asociada al operador $\hat{\mathcal{G}}^{-1} = u(\omega) - \hat{B}\hat{g}$, por lo que al proceder como en el caso no retardado, el elemento $\mathcal{G}_{00}$ se puede obtener recursivamente de la forma:

$$\mathcal{G}_{00} = \frac{1}{u(\omega) - a_0 - \frac{g_0 g_1 b_1^2}{u(\omega) - a_1 - \frac{g_1 g_2 b_2^2}{u(\omega) - a_2 - \frac{g_2 g_3 b_3^2}{u(\omega) - a_3 - \frac{g_3 g_4 b_4^2}{\ddots}}}}}. \quad (230)$$

De esta manera, de acuerdo a la ec. (229) la respuesta macroscópica del sistema está dada en términos del promedio, que identificamos como el elemento 00, de la inversa de esta matriz; es decir,

$$\begin{aligned} (\hat{\mathcal{W}}_M)^{-1} &= (\hat{\mathcal{W}})_{pp}^{-1} \\ &= \left((\hat{\mathcal{W}})^{-1} \right)_{00}, \end{aligned} \quad (231)$$

donde el elemento $((\hat{\mathcal{W}})^{-1})_{00}$ denota el elemento 00 de la matriz inversa asociada al promedio del operador de onda microscópico. Así obteniendo la proyección del operador de onda macroscópico inverso sobre el estado promedio $|p\rangle$ caracterizado por su vector

de onda $\mathbf{q}$, su frecuencia ω y su polarización $\mathbf{e}$,

$$\begin{aligned} \mathbf{e} \cdot (\hat{\mathcal{W}}_M)^{-1} \cdot \mathbf{e} &= \sum_i \sum_j e^i (\hat{\mathcal{W}}_M)_{ij}^{-1} e^j \\ &= \frac{u(\omega)}{\varepsilon_a(\omega)} \frac{g_0 b_0^2}{u(\omega) - a_0 - \frac{g_0 g_1 b_1^2}{u(\omega) - a_1 - \frac{g_1 g_2 b_2^2}{u(\omega) - a_2 - \frac{g_2 g_3 b_3^2}{u(\omega) - a_3 - \frac{g_3 g_4 b_4^2}{\ddots}}}}}. \end{aligned} \quad (232)$$

Para cada valor de $\mathbf{q}$ y ω , el operador de onda macroscópico inverso es un tensor con componentes cartesianas $(\hat{\mathcal{W}}_M)_{ij}^{-1}$. En la ec. (232) no se obtienen todas las componentes de este tensor, sino únicamente su proyección sobre la dirección de polarización $\mathbf{e}$ del estado elegido como inicial. El tensor completo puede obtenerse repitiendo el cálculo para un número suficiente de vectores de polarización $\mathbf{e}$ independientes.

Al invertir este tensor y despejar $\hat{\varepsilon}_M$ de la ec. (188), se obtiene

$$\hat{\varepsilon}_M(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{q^2} (|\mathbf{q}|^2 \mathbb{1} - \mathbf{q}\mathbf{q}) + \hat{\mathcal{W}}_M(\mathbf{q}, \omega). \quad (233)$$

Podemos expresar las componentes del tensor $\hat{\varepsilon}_M$ (con componentes cartesianas $i, j = x, y, z$) de la forma siguiente

$$(\varepsilon_M(\mathbf{q}, \omega))_{ij} = \frac{1}{q^2} (|\mathbf{q}|^2 \delta_{ij} - q_i q_j) + \mathcal{W}_M(\mathbf{q}, \omega)_{ij}. \quad (234)$$

V.3. Resultados

En las siguientes subsecciones se presentan los resultados obtenidos al calcular la respuesta dieléctrica macroscópica de sistemas 2D formados de redes cuadradas y de redes hexagonales de cilindros paralelos. Los cuales están formados por materiales dieléctricos

o metálicos embebidos en un medio dieléctrico al aplicar los métodos correspondientes a los casos no retardado y con retardamiento descritos en las secciones anteriores. Para el caso no retardado, la respuesta macroscópica obtenida para los sistemas formados de redes cuadradas, se utilizó para obtener la reflectancia del sistema para distintas fracciones de llenado y para inclusiones con superficies lisa y rugosa. Mientras que al considerar retardamiento en nuestros sistemas, obtuvimos las estructuras de bandas fotónicas de estos sistemas.

V.3.1. Caso no retardado

Como ejemplo de aplicación de la teoría desarrollada en la sección anterior para el caso no retardado, consideramos 4 sistemas binarios como se muestran en la fig. 29, los

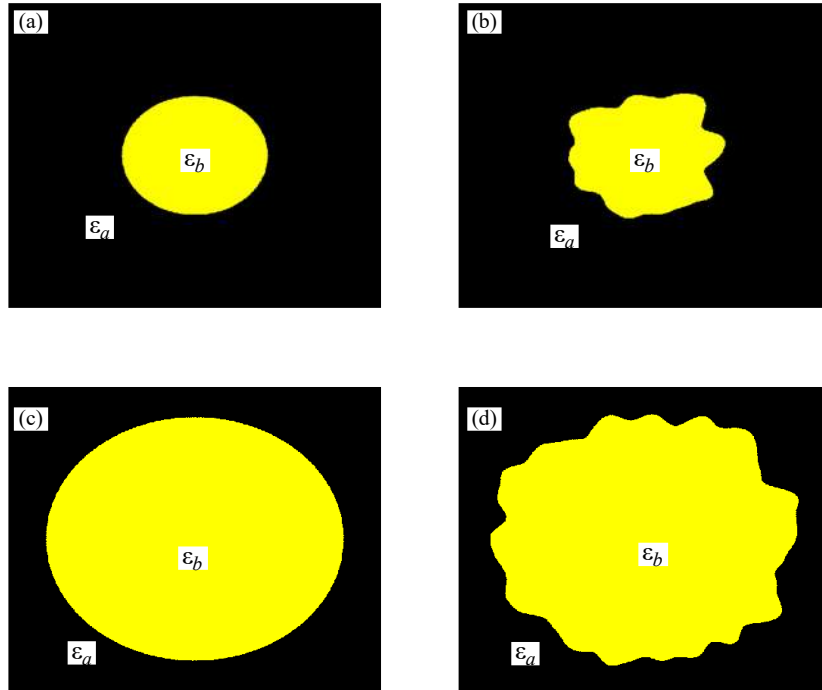


Figura 29. Celdas unitarias de sistemas binarios formados por una red cuadrada de inclusiones cilíndricas de superficies lisa ((a) y (c)) y rugosa ((b) y (d)) con parámetros $\delta = 0.052a$ y $\sigma = 0.02a$ (ver texto), con constantes dieléctricas ε_a y ε_b y con fracciones de llenado $f = 0.12$ ((a) y (b)) y $f = 0.5$ ((c) y (d)).

cuales están formados por una celda unitaria cuadrada con inclusiones cilíndricas de superficies lisa (figs. 29(a) y (c)) y rugosa (figs. 29(b) y (d)) con constantes dieléctricas ε_a y ε_b y fracciones de llenado de ((a) y (b)) $f = 0.12$ y ((c) y (d)) $f = 0.5$. En nuestros cálculos elegimos el valor del parámetro de red de $a = 1$.

Para modelar la rugosidad sobre la superficie de la inclusión, se consideró un perfil de superficie aleatoria sobre la inclusión cilíndrica, igual que el perfil empleado en el capítulo IV en las secciones IV.4.1. y IV.4.2. Este perfil está definido por una realización de un proceso aleatorio de correlación Gaussiana que obedece una función de densidad de probabilidad exponencial negativa (Maradudin *et al.*, 1990). Para modelar la superficie, se consideró un perfil que tiene rugosidad aleatoria con una longitud de correlación $\delta = 0.052a$ y una desviación estándar de las alturas $\sigma = 0.02a$, para los diferentes valores de la fracción de llenado f .

En las tablas I y II se muestran los resultados obtenidos al calcular la respuesta macroscópica (ε_M) para el caso no retardado de los sistemas binarios mostrados en las figs. 29((a) y (b)) y ((c) y (d)), respectivamente, con constantes dieléctricas $\varepsilon_a = 1$ y distintos valores de ε_b . El lado izquierdo corresponde a la superficie lisa y el derecho a la superficie rugosa. Podemos observar que los resultados correspondientes al caso liso difieren poco de los correspondientes al caso rugoso, por lo que podemos esperar que las respuestas ópticas asociadas a estos sistemas sean muy parecidas. Es decir, para esta combinación de materiales dieléctricos, los defectos asociados a un sistema fabricado con una inclusión cilíndrica no afectaría sus propiedades ópticas.

Observamos también que mientras menor es la fracción de llenado considerada, se obtiene un valor menor de la función dieléctrica macroscópica, correspondiente a una velocidad de propagación mayor para la onda electromagnética. Para comprobar esto,

Valores de las funciones dieléctricas					
ε_a	ε_b	ε_M	ε_a	ε_b	ε_M
1.000	2.250	1.096	1.000	2.250	1.105
1.000	2.989	1.127	1.000	2.989	1.140
1.000	3.728	1.148	1.000	3.728	1.165
1.000	4.467	1.164	1.000	4.467	1.183
1.000	5.206	1.176	1.000	5.206	1.198
1.000	5.944	1.186	1.000	5.944	1.210
1.000	6.683	1.194	1.000	6.683	1.220
1.000	7.422	1.201	1.000	7.422	1.228
1.000	8.161	1.206	1.000	8.161	1.235
1.000	8.900	1.211	1.000	8.900	1.241

Tabla I. Respuesta macroscópica (ε_M) de los sistemas binarios mostrados en las figs. 29(a) (panel izquierdo) y (b) (panel derecho), para el caso no retardado con $f = 0.12$.

Valores de las funciones dieléctricas					
ε_a	ε_b	ε_M	ε_a	ε_b	ε_M
1.000	2.250	1.475	1.000	2.250	1.493
1.000	2.989	1.664	1.000	2.989	1.694
1.000	3.728	1.812	1.000	3.728	1.855
1.000	4.467	1.932	1.000	4.467	1.986
1.000	5.206	2.031	1.000	5.206	2.096
1.000	5.944	2.114	1.000	5.944	2.189
1.000	6.683	2.185	1.000	6.683	2.268
1.000	7.422	2.245	1.000	7.422	2.337
1.000	8.161	2.298	1.000	8.161	2.398
1.000	8.900	2.345	1.000	8.900	2.452

Tabla II. Respuesta macroscópica (ε_M) de los sistemas binarios mostrados en las figs. 29(c) (panel izquierdo) y (d) (panel derecho), para el caso no retardado con $f = 0.5$.

calculamos la reflectancia de una película de ancho $d = 1000 \mu\text{m}$ conformada como en las figs. 29((a)-(d)) eligiendo las constantes dieléctricas $\varepsilon_a = 1$ y $\varepsilon_b = 8.9$ correspondientes a partículas de dióxido de aluminio Al_2O_3 en vacío (Ramos-Mendieta and Halevi, 1996), y usando los valores de ε_M mostrados en las tablas I y II. Para calcular la reflectancia de estos sistemas se usó la fórmula estándar para la amplitud de reflexión de una película delgada (Born and Wolf, 1999). Como la respuesta macroscópica longitudinal calculada va a lo largo de la dirección x de la red cuadrada de cilindros dieléctricos descrita arriba ($\epsilon_{ML}(\omega) \equiv \epsilon_{xx}^M(\omega, \mathbf{k} \rightarrow 0\hat{\mathbf{x}})$ para un vector de onda $\mathbf{k} \rightarrow 0$) podemos usar la fórmula estándar para la amplitud de reflexión de una película delgada al definir los planos de incidencia para las polarizaciones TE y TM como se muestra en la fig. 30.

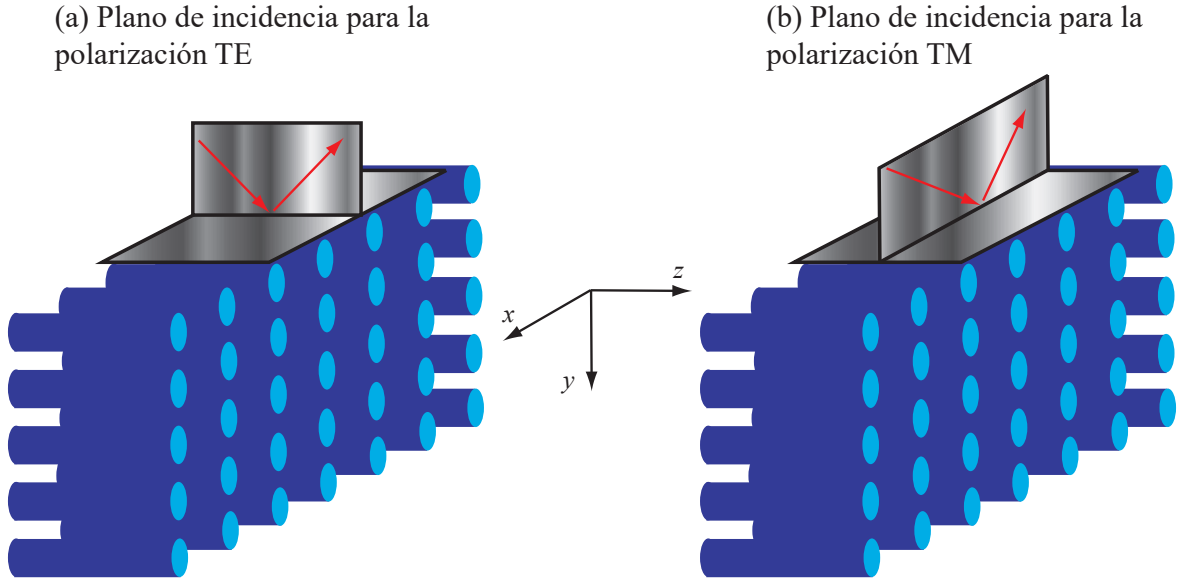


Figura 30. Planos de incidencia para calcular la reflectancia del arreglo periódico de inclusiones cilíndricas de superficies lisa (figs. 29(a) y (c)) y rugosa (figs. 29(b) y (d)) usando los valores de ε_M mostrados en las tablas I y II para las polarizaciones TE y TM.

La fig. 31 muestra los espectros de reflectancia como función del ángulo de incidencia θ_i y de la longitud de onda λ para los rangos de 0° a 90° y $1.6 \mu\text{m}$ a $5 \mu\text{m}$, respectivamente, correspondientes a los sistemas de las figs. 29(a) y (b) para las in-

clusiones cilíndricas de superficies lisa (figs. 31(a) y (b)) y rugosa (figs. 31(c) y (d)) para la polarización TE (lado izquierdo) y TM (derecha) al considerar los planos de incidencia como se muestra en la fig. 30.

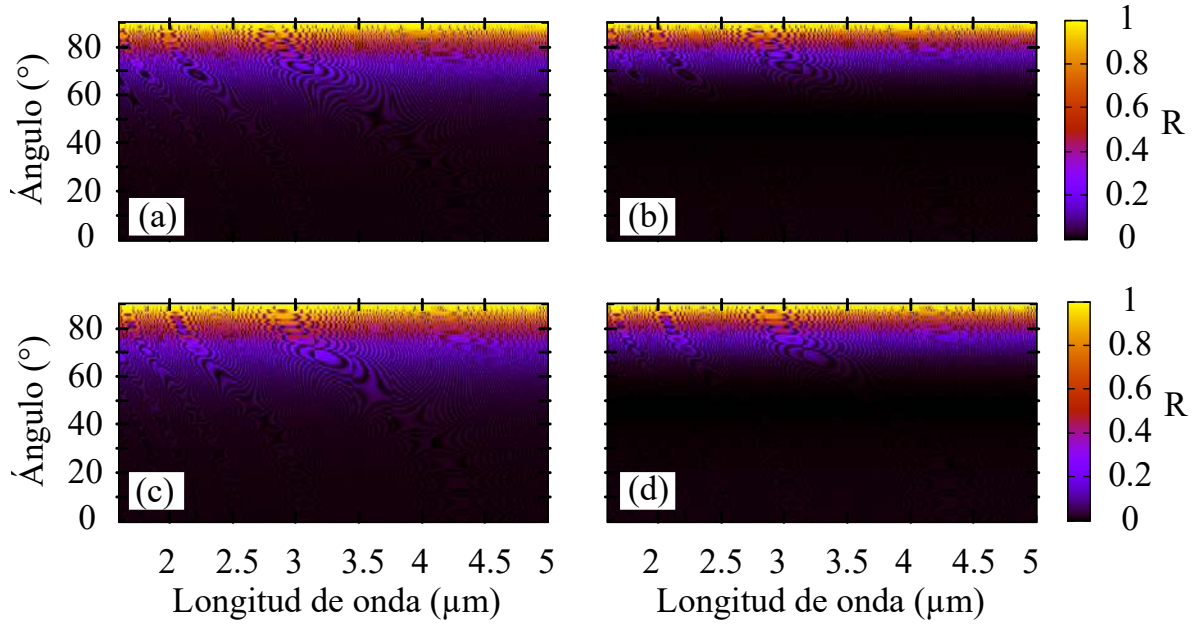


Figura 31. Espectros de reflectancia $R(\theta_i, \lambda)$ como función del ángulo de incidencia θ_i y de la longitud de onda λ correspondientes a los sistemas binarios de las figs. 29(a) y (b) con las inclusiones cilíndricas de superficies lisa ((a) y (b)) y rugosa ((c) y (d)) para las polarizaciones TE ((a) y (c)) y TM ((b) y (d)).

Observamos que la reflectancia es muy baja para ángulos de incidencia menores a 80° , para los cuales la mayor parte de la luz se transmite. Mientras que para ángulos mayores, la reflectancia aumenta considerablemente. También se puede observar que los espectros de reflectancia de los sistemas formados por las inclusiones cilíndricas de superficies lisa y rugosa, presentan propiedades ópticas similares.

Similarmente, en la fig. 32 se muestra los espectros de reflectancia como función del ángulo de incidencia θ_i y de la longitud de onda λ como en la fig. 31 correspondientes a los sistemas de las figs. 29(c) y (d).

La reflectancia es cualitativamente similar a la mostrada por la fig. 31, aunque con

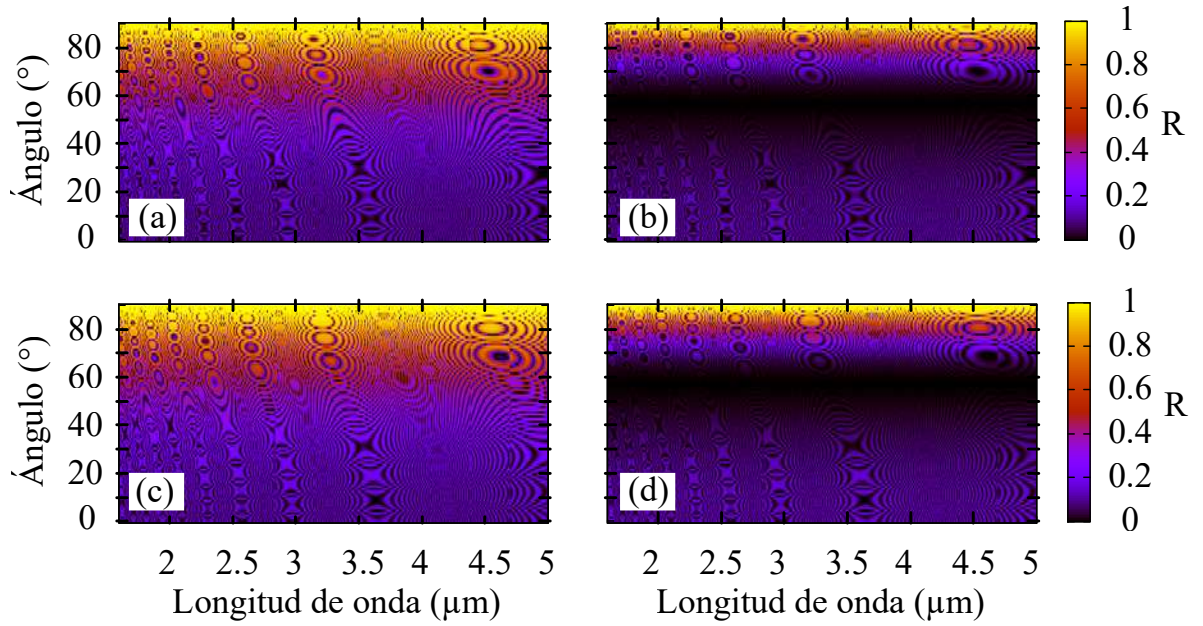


Figura 32. Espectros de reflectancia como en la fig. 31 pero correspondientes a las figs. 29(c) y (d), con las inclusiones cilíndricas de superficies lisa ((a) y (b)) y rugosa ((c) y (d)) para las polarizaciones TE ((a) y (c)) y TM ((b) y (d)).

valores ligeramente mayores. Para polarización TM observamos un mínimo correspondiente al ángulo de Brewster y la reflectancia aumenta considerablemente para ángulos rasantes.

V.3.2. Caso con retardamiento

En esta subsección se muestran los resultados obtenidos de las estructuras de bandas fotónicas para un CF 2D infinito formado de arreglos periódicos cuadrados de cilindros paralelos infinitamente largos compuestos de dieléctricos con superficies lisa y rugosa. También estudiamos una red hexagonal de cilindros metálicos con superficie lisa. Para ello, usamos una implementación computacional eficiente (Mochán *et al.*, 2016) del enfoque numérico presentado en la teoría desarrollada para el caso con retardamiento. Los modos propios electromagnéticos de los sistemas están dados por los polos de la

función electromagnética de Green $\mathcal{G}$ y de las singularidades del operador de onda macroscópico, como se explicará más adelante. La función de Green está definida como el inverso del operador de onda correspondiente a los casos de TE y TM. Para el caso de medios dieléctricos se agregó un término disipativo muy pequeño a la constante dieléctrica de las inclusiones para poder obtener los modos normales del sistema a partir de un análisis de la parte imaginaria de la función de Green calculada. Estas estructuras de bandas son comparadas con las obtenidas al usar el MEI descrito en el capítulo IV.

Las funciones de dispersión que definen los modos electromagnéticos y que se presentan a continuación fueron tomadas de los trabajos de Pérez-Huerta *et al.* (2013); Pérez-Huerta (2014). Consideramos ondas que se propagan con vector de onda $\mathbf{k}$ en el plano xy , normal al eje de los cilindros, como se muestra en la fig. 33, considerando

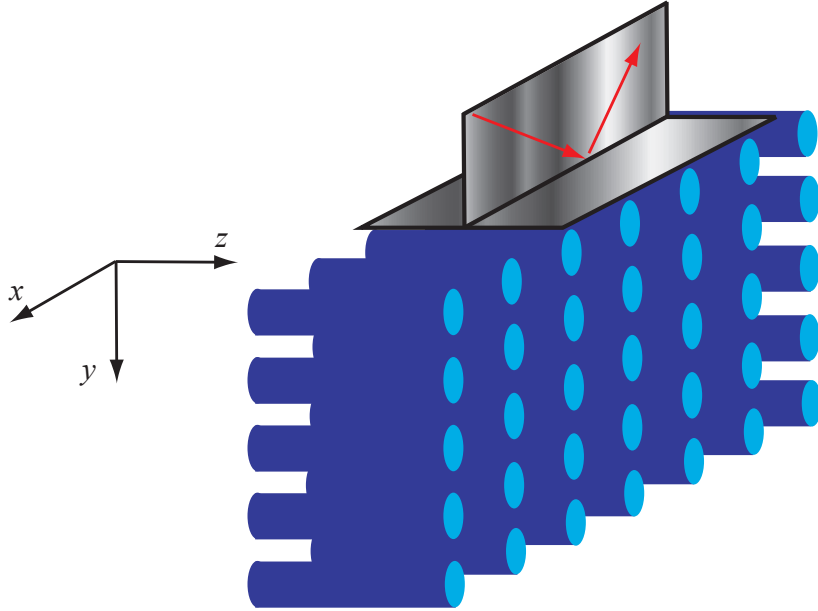


Figura 33. Plano de incidencia para la iluminación de un arreglo periódico de inclusiones cilíndricas, cuyas ondas se propagan con vector de onda $\mathbf{k}$ en el plano xy , normal al eje de los cilindros, considerando los casos donde el campo eléctrico o magnético apunta a lo largo del eje de los cilindros, correspondientes a la polarización TE o TM, respectivamente.

los casos donde el campo eléctrico o magnético apunta a lo largo del eje de los cilindros, correspondientes a la polarización TE o TM, respectivamente. Para el caso TE, los modos electromagnéticos son transversales y su relación de dispersión $\omega = \omega(\mathbf{k})$ se obtienen de la ecuación de onda macroscópica (Bell *et al.*, 1984):

$$\varepsilon_{MT}(\omega, \mathbf{k}) = \frac{k^2}{q^2}, \quad (235)$$

donde $\varepsilon_{MT}(\omega, \mathbf{k})$ es la respuesta dieléctrica a lo largo del eje de los cilindros, en dirección del eje z . Para la polarización TM se analizan varios casos, dependiendo si el vector de onda $\mathbf{k}$ se halla o no a lo largo de líneas de alta simetría. Si el sistema es invariante frente a reflexiones en dichas líneas, el campo eléctrico macroscópico a lo largo de $\mathbf{k}$ no se acopla con el campo macroscópico en direcciones perpendiculares a $\mathbf{k}$. Esto permite identificar una función respuesta macroscópica longitudinal y otra transversal. Las relaciones de dispersión $\omega = \omega(\mathbf{k})$ de los modos transversales quedan descritas por la ec. (235), donde ahora debemos identificar $\varepsilon_{MT}(\omega, \mathbf{k})$ con la componente transversal de la respuesta macroscópica en el plano. Las ondas longitudinales cumplen la relación de dispersión

$$\varepsilon_{ML}(\omega, \mathbf{k}) = 0, \quad (236)$$

donde $\varepsilon_{ML}(\omega, \mathbf{k})$ es la componente longitudinal de la respuesta macroscópica. Para otros vectores de onda, no es posible separar modos longitudinales de modos trasversales, ya que la polarización de los modos propios es mixta: con una componente longitudinal y otra transversal, y la relación de dispersión se obtiene de las singularidades del operador de onda macroscópico,

$$\det [\mathcal{W}_M(\omega, \mathbf{k})] = 0. \quad (237)$$

Usando las relaciones de dispersión mencionadas anteriormente, calculamos la función de Green y de ésta calculamos los modos electromagnéticos que forman las estructuras

de bandas para los casos TE y TM. Las estructuras calculadas se muestran en términos de la frecuencia reducida $\omega_r = \omega a / 2\pi c$ y del vector de onda reducido $k_r = ka / 2\pi$ dentro de la primera zona de Brillouin y fuera de la primera zona de Brillouin, obtenido mediante la translación de $\mathbf{k}$ por un vector recíproco $(2\pi/a)\hat{\mathbf{y}}$ a lo largo de la dirección y . Aquí c es la velocidad de la luz en el vacío y a es el parámetro de red, que para nuestros cálculos elegimos el valor de $a = 1$.

El perfil de la superficie rugosa se obtiene, como en la subsección previa, mediante una realización de un proceso aleatorio de correlación Gaussiana que obedece a una función de densidad de probabilidad exponencial negativa (Maradudin *et al.*, 1990). Los parámetros empleados son una longitud de correlación de $\delta = 0.052a$ y una desviación estándar de alturas de $\sigma = 0.02a$.

Estructuras de bandas de redes cuadradas de dieléctricos

En la fig. 34 presentamos las estructuras de bandas de una red cuadrada de cilindros paralelos infinitamente largos formados de un dieléctrico con respuesta $\epsilon_b = 8.9$ con superficies lisa y rugosa embebidas en aire ($\epsilon_a = 1$) con fracción de llenado de $f = 0.12$, correspondiente a un radio de inclusión $r_c = 0.1954a$ para polarización TE, obtenidas con el método recursivo de Haydock ((a) y (c)) y el MEI ((b) y (d)). Con el primer método se utilizó una cuadrícula 2D de 505×505 para discretizar las celdas unitarias y se realizó el cálculo recursivo utilizando 200 coeficientes de Haydock. El número de frecuencias (ω_r) y vectores de onda (k_r) considerados en los cálculos fueron de 181 y 193, respectivamente. Para este caso se agregó un término disipativo muy pequeño $0.01i$ a la constante dieléctrica $\epsilon_b = 8.9$ para definir los modos normales del sistema estructurado a partir de la parte imaginaria de la función de Green calculada. Con el

segundo método se utilizaron intervalos de muestreo de $\Delta s = 0.0222a$ para las secciones lisas y rugosas, considerando 1205 frecuencias y el mismo número de vectores de onda en estos cálculos.

Como podemos observar en la fig. 34 hay muy buena concordancia en los resultados al utilizar los diferentes métodos numéricos. Tanto para el caso liso como para el caso rugoso, las bandas obtenidas por ambos métodos muestran los mismos modos, tienen las mismas formas y una comparación detallada muestra los mismos valores numéricos. Además, se presenta la misma brecha fotónica (franja roja) alrededor de la frecuencia reducida $\omega_r = 0.35$. Al comparar los casos lisos con los rugosos observamos que la rugosidad no produce cambios significativos, como lo habíamos mostrado en el capítulo IV.

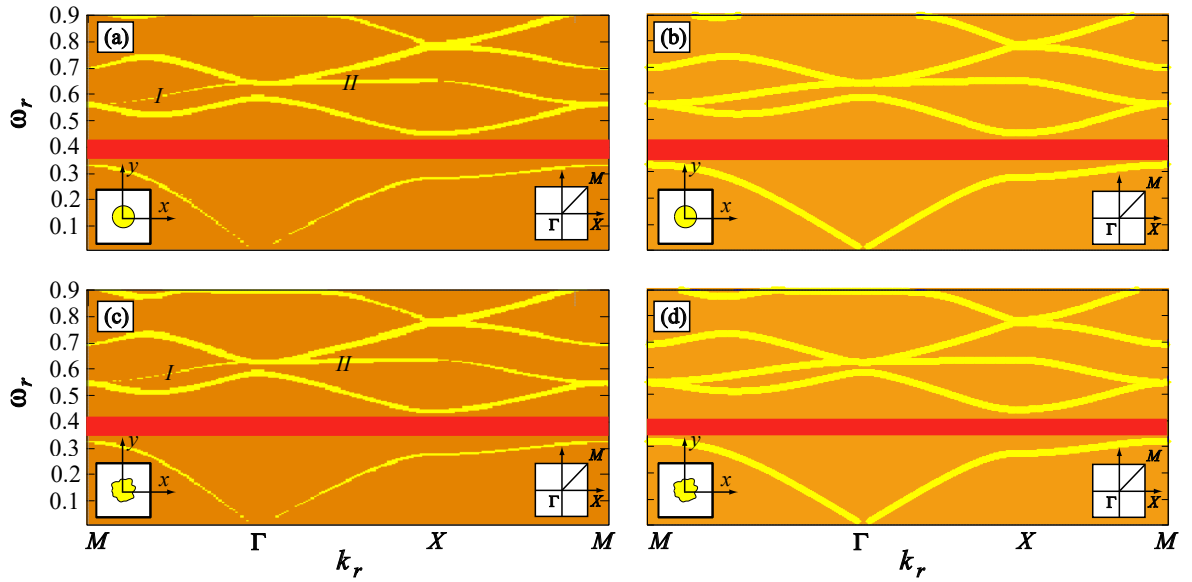


Figura 34. Estructuras de bandas fotónicas de una red cuadrada de cilindros dieléctricos con respuesta $\epsilon_b = 8.9$ y fracción de llenado de $f = 0.12$ en aire ($\epsilon_a = 1$) para polarización TE, obtenidas con el método recursivo de Haydock ((a) y (c)) y el MEI ((b) y (d)). El recuadro izquierdo muestra la celda unitaria en el espacio real y el recuadro derecho la primera zona de Brillouin de la estructura periódica.

En las figs. 34(a) y (c) los modos denotados como *I* y *II* correspondientes a los vectores de onda que se encuentran en la trayectoria $M \rightarrow \Gamma$ y $\Gamma \rightarrow X$, respectivamente, se calcularon al considerar los vectores de onda fuera de la primera zona de Brillouin, obtenidos mediante la traslación de $\mathbf{k}$ por un vector recíproco $(2\pi/a)\hat{\mathbf{y}}$ a lo largo de la dirección y ; es decir, $\mathbf{k}' = \mathbf{k} + (2\pi/a)\hat{\mathbf{y}}$. Esto se puede hacer dentro de nuestro formalismo ya que el vector de onda $\mathbf{k}$ no está necesariamente restringido a la primera zona de Brillouin. Esto nos permite calcular la respuesta dieléctrica macroscópica para vectores de onda fuera de la primera zona de Brillouin y obtener los modos propios en el esquema extendido, obteniendo de esta manera los modos que podrían faltar por no acoplarse a líneas de alta simetría en el espacio recíproco.

En la fig. 35 presentamos los cálculos de las estructuras de bandas para los mismos sistemas y los mismos parámetros de la fig. 34 pero para polarización TM, obtenidas con el método recursivo de Haydock ((a) y (c)) y el MEI ((b) y (d)). Podemos observar

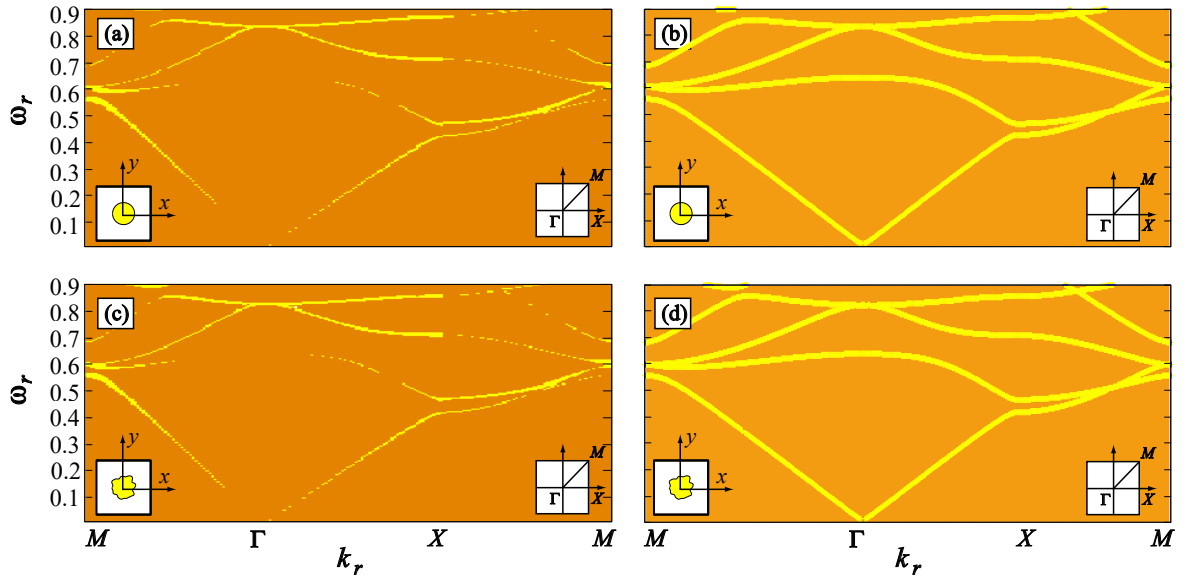


Figura 35. Estructuras de bandas fotónicas de una red cuadrada de cilindros dieléctricos como en la fig. 34, para polarización TM.

en la fig. 35 muy buena concordancia en los resultados al utilizar los diferentes métodos

numéricos. También podemos observar que el efecto de la rugosidad no presenta cambios significativos en las estructuras de bandas como lo habíamos mostrado en el capítulo IV.

Las estructuras de bandas obtenidas con el método recursivo de Haydock pueden mejorarse al considerarse un número mayor de vectores y de frecuencias, como es el caso de las estructuras de bandas obtenidas con el MEI.

Estructuras de bandas de redes hexagonales de metales

El método recursivo de Haydock también nos permite obtener la respuesta macroscópica de arreglos periódicos que incluyan metales en su composición, así como tratar distintas redes. En esta subsección ilustramos esto calculando la respuesta de una red hexagonal de cilindros metálicos paralelos con una respuesta dispersiva y disipativa ($\epsilon_b(\omega)$) embebidos en un medio dieléctrico (ϵ_a). Para ello, empleamos un sistema de coordenadas no ortogonales, como se muestra en la fig. 36, generado por los vectores primitivos

$$\mathbf{a}_1 = a(1, 0), \quad \mathbf{a}_2 = a \left(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2} \right), \quad (238)$$

donde a denota el parámetro de red. La fracción de llenado de los cilindros metálicos está dada por $f = (2\pi/\sqrt{3})r_c^2/a^2$ donde r_c es el radio de la inclusión cilíndrica. Como respuesta dieléctrica para los cilindros metálicos empleamos una función tipo Drude (Jackson, 1998; Bell *et al.*, 1984)

$$\epsilon_b(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\gamma)}, \quad (239)$$

donde ω_p es la frecuencia del plasmón de bulto y $1/\gamma$ es el tiempo medio de colisión entre los portadores de carga.

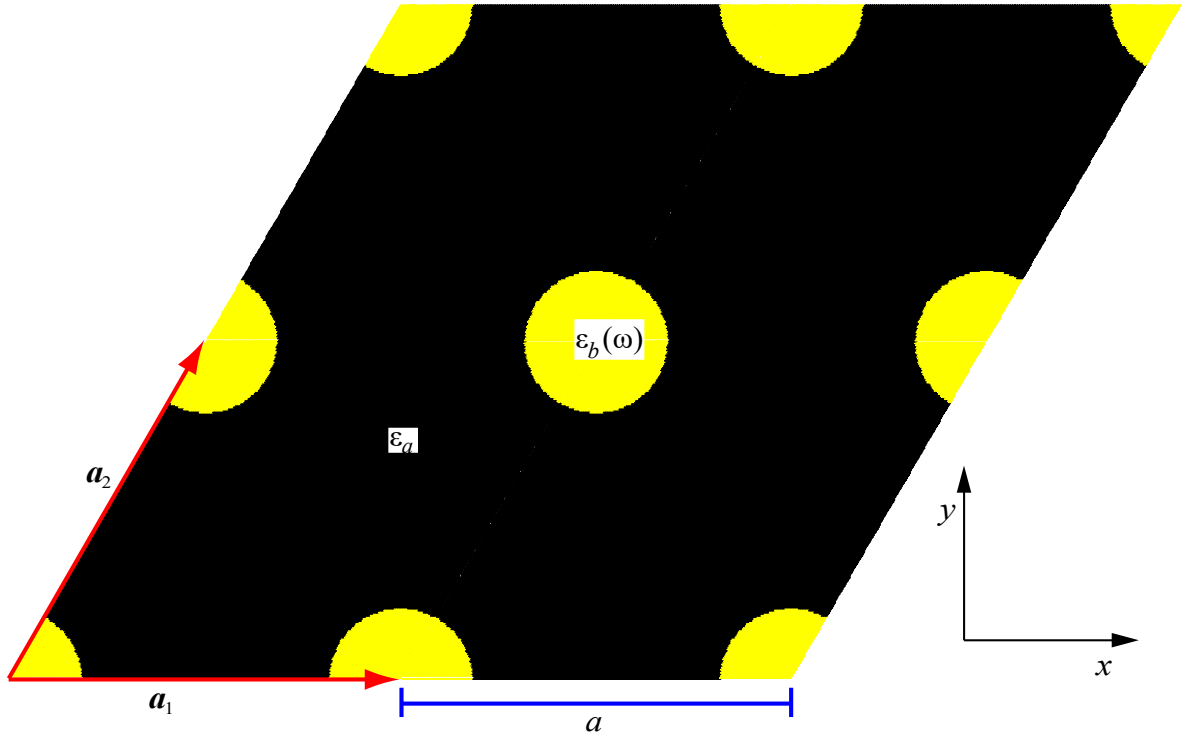


Figura 36. Red hexagonal de cilindros conductores con parámetro de red a , formado por los vectores primitivos $\mathbf{a}_1$ y $\mathbf{a}_2$.

Para asegurarnos que los cálculos obtenidos al tratar este sistema son correctos, podemos hacer una comparación entre los resultados del método de Haydock para el caso no retardado con los resultados obtenidos al usar la fórmula 2D de Maxwell-Garnett (MG) (Datta *et al.*, 1993). La cual nos permite calcular la respuesta dieléctrica de medios efectivos,

$$\epsilon_M = \frac{\epsilon_b(1 + f) + \epsilon_a(1 - f)}{\epsilon_b(1 - f) + \epsilon_a(1 + f)} \epsilon_a, \quad (240)$$

donde ϵ_M es la respuesta macroscópica, ϵ_b y ϵ_a son las respuestas de los cilindros y del medio que los contiene, respectivamente y f es la fracción de llenado de los cilindros.

El método de MG está basado en considerar únicamente una interacción dipolar no retardada entre las inclusiones, por lo cual esperamos coincida con el cálculo numérico no retardado para fracciones de llenado pequeñas.

En la fig. 37 mostramos la respuesta macroscópica longitudinal $\epsilon_{ML}(\omega) \equiv \lim_{k \rightarrow 0} \epsilon_{xx}^M(\omega, k\hat{x})$ para un vector de onda $\mathbf{k} \rightarrow 0$ a lo largo de la dirección x en la red hexagonal de cilindros metálicos descrita arriba, con una fracción de llenado de $f = 0.12$ correspondiente a un radio de inclusión $r_c = 0.182a$. Se muestran resultados de las teorías

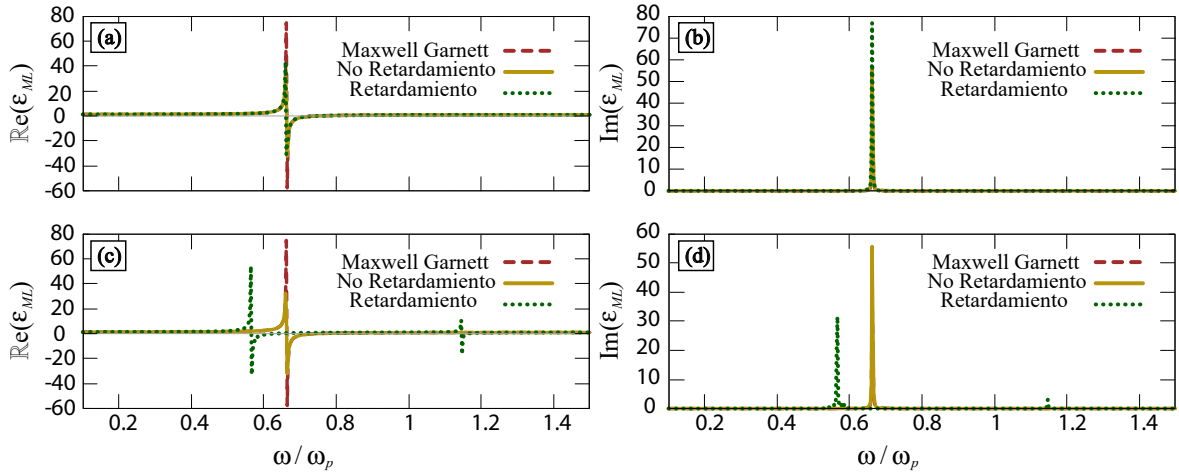


Figura 37. Parte real ((a) y (c)) e imaginaria ((b) y (d)) de la función dieléctrica macroscópica longitudinal $\epsilon_{ML}(\omega, k \rightarrow 0\hat{x})$ de un sistema 2D formado por una red hexagonal de cilindros conductores con parámetro de red a para los casos ((a) y (b)) $a/\lambda_p = 0.1$ y ((c) y (d)) $a/\lambda_p = 1$. Se muestra el resultado del cálculo no retardado, del cálculo retardado y de la fórmula de MG.

desarrolladas en las secciones V.1. y V.2. correspondientes a los casos no retardado y con retardamiento, respectivamente. Para obtener estos resultados se realizó el cálculo recursivo utilizando 400 coeficientes de Haydock al utilizar una malla 2D de 801×801 para discretizar la celda unitaria, así como 601 frecuencias ω/ω_p . También se calculó la respuesta dieléctrica del sistema al usar la fórmula de MG dada por la ec. (240) para el mismo número de frecuencias. En nuestros cálculos elegimos un valor de la disipación de $\gamma = 0.001\omega_p$, un parámetro de red de $a = 1$ y los valores de $\lambda_p = 10a$ (figs. 37((a) y (b))) y $\lambda_p = a$ (figs. 37((b) y (c))), donde λ_p es la longitud de onda de una onda libre cuya frecuencia es la frecuencia de plasma del metal ($\lambda_p = 2\pi c/\omega_p$) y ésta es una escala de distancia.

En la fig. 37 podemos observar que el cálculo de la respuesta macroscópica obtenido para el caso no retardado, tiene el mismo comportamiento con el resultado obtenido con MG, como lo esperábamos. Más aún, el cálculo con retardamiento mostrado en las figs. 37((a) y (b)) coincide con el caso no retardado y MG; ya que en este caso el parámetro de red $a = 0.1\lambda_p$ es despreciable comparado con la longitud de onda. En este caso la respuesta dieléctrica obtenida presenta un único polo de origen dipolar cuya posición ω está dada por (Pitarke *et al.*, 2007)

$$\omega = \sqrt{\frac{1-f}{2}}\omega_p, \quad (241)$$

que para nuestro sistema con $f = 0.12$ corresponde a $\omega \approx 0.66\omega_p$. Sin embargo, para el valor de $a = \lambda_p$, la respuesta macroscópica obtenida para el caso con retardamiento presenta un corrimiento del polo hacia el rojo en la frecuencia $\omega \approx 0.57\omega_p$ y además, aparece otro polo en la frecuencia $\omega \approx 1.15\omega_p$, como podemos observar en las figs. 37((c) y (d)). Este nuevo polo tiene su origen en las resonancias multipolares de los cilindros y se acoplan al campo externo debido a las interacciones entre cilindros vecinos. El cálculo con retardamiento permite el acoplamiento directo entre el campo macroscópico y las oscilaciones multipolares; además de mover la posición de los polos hacia el rojo, como se dijo anteriormente. Vale la pena mencionar que para nuestro sistema (considerando una fracción de llenado pequeña), el cálculo no retardado presenta un único polo de origen dipolar. Sin embargo para fracciones de llenado grandes, pero con un parámetro de red pequeño, también se obtienen nuevos polos de carácter multipolar, que no predice la teoría MG, como se muestran en el trabajo Pérez-Huerta (2014).

Los resultados anteriores nos muestran que la teoría desarrollada para el caso con retardamiento nos permite confiar en la respuesta macroscópica aún para redes no cartesianas: como la red hexagonal, y para materiales dispersivos y disipativos, lo cual

nos da confianza para estudiar el esquema de bandas para estos sistemas.

Como prueba de esto, obtendremos la estructura de bandas para el mismo sistema tratado en la fig. 37, considerando ondas que se propagan con vector de onda $\mathbf{k}$ en el plano xy , normal al eje de los cilindros para la polarización TE. Para este caso los modos electromagnéticos son transversales y su relación de dispersión $\omega = \omega(\mathbf{k})$ se obtienen de la ec. (235). Es decir las estructuras de bandas están formadas por la intersección de la curva $(k/q)^2$ con $\epsilon_{MT}(\omega, \mathbf{k})$. Otra manera de obtener estos modos es analizar los polos de la función electromagnética de Green $\mathcal{G}$, los cuales obtenemos al analizar la parte imaginaria de esta función, como se muestra a continuación.

En la fig. 38 (panel izquierdo) mostramos las funciones dieléctricas macroscópicas transversales $\epsilon_{MT}(\omega, \mathbf{k}) = \epsilon_{ZZ}^M(\omega, \mathbf{k})$ para algunos vectores $\mathbf{k}_\alpha$ correspondientes a los puntos medios entre los vértices de la trayectoria $\Gamma = (0, 0, 0) \rightarrow K = (2\pi/a, 0, 0) \rightarrow M = (2\pi/a, 2\sqrt{3}\pi/3a, 0) \rightarrow \Gamma = (0, 0, 0)$ en la primera zona de Brillouin, $\mathbf{k}_\Delta = (\pi/a, 0, 0)$, $\mathbf{k}_Z = (2\pi/a, \sqrt{3}\pi/3a, 0)$ y $\mathbf{k}_\Sigma = (\pi/a, \sqrt{3}\pi/3a, 0)$. Estas figuras muestran los polos de $\epsilon_{MT}(\omega, \mathbf{k}_\alpha)$ con $\alpha = \Delta, Z$ y Σ , los cuales se relacionan con las reflexiones múltiples coherentes en las interfaces entre los medios a y b que forman el sistema mostrado en la fig. 36. En las mismas figuras se muestra la hipérbola cuadrada $(k_\alpha/q)^2$ con $q = (\omega/\omega_p)(2\pi/\lambda_p)$ cuyas intersecciones con las curvas $\epsilon_{MT}(\omega, \mathbf{k}_\alpha)$ corresponden a los modos trasversales con eigenfrecuencias $\omega_\beta(\mathbf{k}_\alpha)$ donde el índice β numera las intersecciones.

En la fig. 38 (panel derecho) se muestran las partes imaginarias de las funciones de Green proyectadas fuera del plano para los mismos vectores del panel izquierdo. Como podemos notar, éstas muestran los picos para las frecuencias donde hay intersecciones en las figuras del panel izquierdo. Por lo que al analizar la parte imaginaria de las funciones

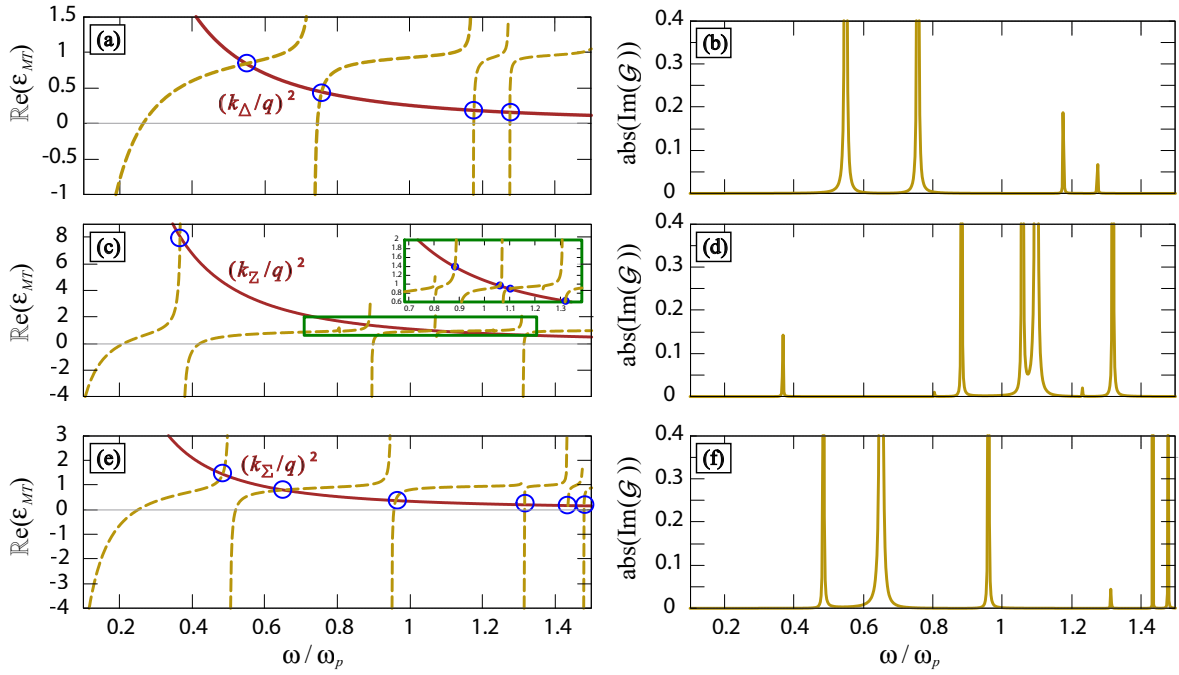


Figura 38. ((a), (c) y (e)) Funciones dieléctricas macroscópicas (guiones cortos de color amarillo) $\epsilon_{MT}(\omega, \mathbf{k}_\alpha)$ en la dirección fuera del plano del sistema mostrado en la fig. 36 para vectores de onda $\mathbf{k}_\alpha$ con $\alpha = \Delta, Z$ y Σ en la primera zona de Brillouin. Las hipérbolas cuadradas $(k_\alpha/q)^2$ (líneas sólidas de color rojo) intersectan a las funciones $\epsilon_{MT}(\omega, \mathbf{k}_\alpha)$ en las eigenfrecuencias $\omega_\beta(\mathbf{k}_\alpha)$ (círculos de color azul) donde β numera las intersecciones. ((b), (d) y (f)) parte imaginaria de la función de Green proyectada fuera del plano para los mismos vectores del panel izquierdo.

de Green proyectadas para distintos vectores $\mathbf{k}$ en la trayectoria $M \rightarrow \Gamma \rightarrow K \rightarrow M$ correspondiente a la primera zona de Brillouin, podemos obtener la estructura de bandas para nuestro sistema, como se muestra en la fig. 39. Si comparamos los modos de la estructura con las intersecciones mostradas en la fig. 38 (panel izquierdo) para los vectores de onda $\mathbf{k}_\alpha$, $\alpha = \Sigma, \Delta$ y Z , denotadas por los puntos de color azul, podemos observar que hay una buena concordancia. También podemos observar que la estructura presenta una brecha fotónica para frecuencias menores a $\omega/\omega_p = 0.2$.

Los modos de la estructura de bandas de la fig. 39 que no se definen en la trayectoria $M \rightarrow \Gamma$ y $\Gamma \rightarrow K$ pueden ser calculados al considerar los vectores de onda fuera de la primera zona de Brillouin, obtenidos mediante la traslación de $\mathbf{k}$ por un vector recíproco

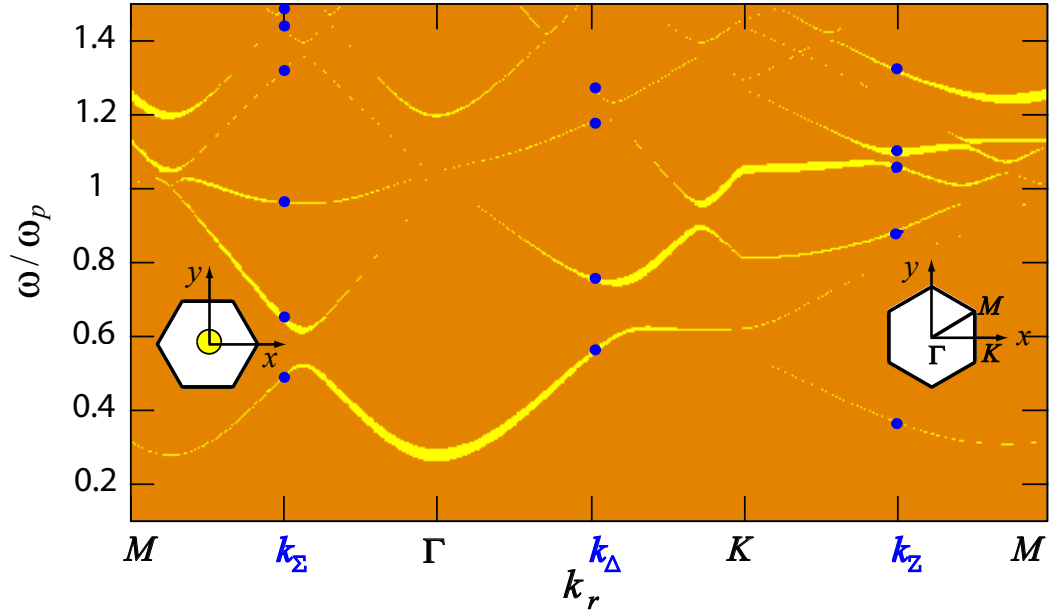


Figura 39. Estructura de bandas de un CF 2D formado por una red hexagonal de cilindros conductores con respuesta $\epsilon_b(\omega)$ (ec. (239)) embebidos en aire ($\epsilon_a = 1$) con parámetro de red $a = \lambda_p$ y con fracción de llenado $f = 0.12$ para polarización TE. Los puntos de color azul corresponden a las intersecciones mostradas en las figs. 38 (panel izquierdo) para los vectores de onda $\mathbf{k}_\alpha$ con $\alpha = \Sigma, \Delta$ y Z . El recuadro izquierdo muestra la celda unitaria en el espacio real y el recuadro derecho la primera zona de Brillouin de la estructura periódica.

$(2\pi\sqrt{3}/a)\hat{\mathbf{y}}$ a lo largo de la dirección y ; es decir, $\mathbf{k}' = \mathbf{k} + (2\pi\sqrt{3}/a)\hat{\mathbf{y}}$ como se hizo para el caso de la red cuadrada (figs. 34(a) y (c)). Mientras que los modos en la trayectoria $K \rightarrow M$ los podemos mejorar al considerar una discretización más fina tanto de vectores como de frecuencias.

Capítulo VI

CONCLUSIONES

En este capítulo, se presentan las conclusiones más notables de este proyecto doctoral, destacándose lo que se proyecta como trabajo futuro. Refiriéndonos a los resultados obtenidos, podemos enunciar las siguientes ideas clave:

El capítulo III presenta un estudio teórico-numérico-experimental de la propagación de ondas electromagnéticas en sistemas cuyas propiedades son moduladas a lo largo de una dimensión. Se introdujeron métodos para el diseño y optimización de estructuras multicapas de silicio poroso (SP) formadas a partir de repeticiones periódicas de una celda unitaria compuesta por dos capas alternadas. Las cuales pueden ser estructuras periódicas o aperiódicas trinadas (*chirped*) cuyo espesor de pares sucesivos de capas aumenta gradualmente. Se empleó el método convencional de la matriz de transferencia, se estudiaron sus limitaciones y se desarrollaron los métodos de la matriz de transferencia extendida o completa y el de expansión de ondas de Bloch. Estos métodos se aplicaron al diseño y análisis del espectro de reflectancia de un espejo omnidireccional de amplio espectro.

Primero, se desarrolló el *Método de la Matriz de Transferencia* convencional para obtener el espectro de reflectancia de estructuras dieléctricas de SP, alternando películas de alta y baja porosidad relativa. Para determinar el índice de refracción correspondiente al SP, se usó la teoría de Bruggeman para dos medios, lo que permitió modelar las propiedades dieléctricas del SP, considerándolo como una mezcla de dos medios: aire y silicio. La programación numérica involucró el uso del lenguaje computacional Perl y su extensión mediante el módulo PDL (Perl Data Language) para almacenar y manipular rápidamente, grandes arreglos de datos en N -dimensiones. Sin embargo, en sistemas grandes, la presencia de absorción juega un papel importante y vuelve inestable este método usual de diseño, de forma tal que los resultados son poco confiables. Por ende, concluimos que el enfoque de matriz de transferencia habitual para el cálculo de las propiedades ópticas de sistemas multicapas grandes puede fallar, bajo estas condiciones.

No obstante, la estabilidad numérica se puede lograr utilizando 2 métodos alternativos: utilizando una matriz de transferencia extendida o completa, para resolver los campos en todas las superficies simultáneamente (*Método de la Matriz Extendida*) y utilizando un método basado en la excitación de modos tipo Bloch mediante la extensión a un sistema artificialmente repetido. Desarrollamos y aplicamos estos métodos al cálculo del espectro de reflectancia de un espejo omnidireccional de amplio espectro, que consta de una estructura multicapas grande *chirped* hecha de SP. Ambos demostraron ser precisos y estables. El primero, nos permitió un análisis del campo dentro de todas las capas; mientras que el segundo, mucho más eficiente computacionalmente, permitió la optimización de los parámetros para la función modeladora. La matriz extendida es considerablemente más lenta que la expansión en los modos de Bloch, pero arroja más información y permite un análisis de la dependencia de los campos como función de la profundidad. Este método lo aplicamos al estudio de la profundidad de penetración

y su dependencia en la longitud de onda y del ángulo de incidencia, lo que a su vez nos permitió reemplazar las estructuras originales por otras más delgadas. Las cuales mostraron las propiedades ópticas deseadas dentro de una amplia gama de longitudes de onda y ángulos de incidencia. Por otro lado, la expansión en modos tipo Bloch permite cálculos rápidos, estables y precisos, proporcionando así, un método ideal para el diseño y optimización de grandes estructuras multicapas que podrían estar hechas de repeticiones completamente aperiódicas de pares de capas, como en nuestro ejemplo tipo *chirped*.

Usando nuestro método de modos de Bloch, diseñamos dos tipos de estructuras multicapas tipo *chirped*: modelando el ancho de las sucesivas capas mediante expresiones analíticas con parámetros a determinar y por apilamiento de espejos tipo Bragg. En el primer caso, se fabricó una estructura multicapas grande, compuesta por 101 pares de capas de SP con porosidades alternadas de $p_1 = 41\%$ y $p_2 = 76\%$ respectivamente, sobre un sustrato de Si optimizando los parámetros del perfil de anchuras mediante el paquete MINUIT. La estructura fabricada tuvo un espesor de $32\ \mu\text{m}$ y presentó una banda omnidireccional de alta reflectividad con un ancho de banda grande, en el rango de longitudes de onda de 600 a 1300 nm aproximadamente. En cuanto al apilamiento de espejos, se fabricó una estructura con un espesor de $48.9\ \mu\text{m}$ compuesta de 91 pares de capas de SP con porosidades alternadas de $p_1 = 51\%$ y $p_2 = 76\%$ sobre un sustrato de Si y con una banda omnidireccional de alta reflectividad con un ancho de banda en el rango de longitudes de onda de 800 a 2500 nm.

La comparación de los espectros de reflectancia calculados numéricamente con los resultados experimentales mostró una buena concordancia. Ésta podría mejorarse aún más considerando efectos como la rugosidad interfacial y la modificación de la respuesta

del Si dentro de las paredes de los poros confinados. Efectos que pueden incorporarse fácilmente a nuestro formalismo. Por lo tanto, llegamos a la conclusión de que nuestro enfoque es útil para el cálculo, diseño y análisis de las propiedades ópticas de sistemas multicapas muy grandes.

En el capítulo IV se aplicó la técnica numérica del Método de la Ecuación Integral (MEI) para calcular las estructuras de bandas fotónicas y la respuesta electromagnética para un cristal fotónico (CF) 2D formado por una red cuadrada de cilindros paralelos infinitamente largos de un material dieléctrico o de un metamaterial izquierdo dispersivo, con superficies tanto lisas como rugosas. En estos sistemas se consideraron ondas que se propagan con vector de onda $\mathbf{k}$ en el plano xy , normal al eje de los cilindros, con polarizaciones tanto TE como TM. Se obtuvo la respuesta óptica de sistemas formados por una placa finita de un material dieléctrico o de un metamaterial izquierdo dispersivo, compuesta de inclusiones cilíndricas de aire de superficies lisas y rugosas mediante la reflectancia y la transmitancia como función del ángulo de incidencia. Los cálculos fueron repetidos para varias fracciones de llenado.

En cuanto a la estructura de bandas de los sistemas puramente dieléctricos, encontramos que la presencia de una rugosidad relativamente pequeña en comparación con la longitud de onda tiene un efecto pequeño para ambas polarizaciones. Sin embargo, para CFs hechos de un metamaterial izquierdo dispersivo, las estructuras de bandas se ven fuertemente afectadas ya que la rugosidad induce nuevas brechas fotónicas. Además, en algunos casos, un intervalo de banda cambia de frecuencia, volviéndose más estrecho o generando nuevos intervalos de banda estrechos en la misma región espectral. Estos resultados implican un problema técnico relacionado con la fabricación práctica de CFs 2D. Por tanto, concluimos que es muy importante tener en cuenta la rugosidad

de las superficies que estarán presentes en los sistemas reales para obtener una mejor concordancia entre la teoría y la medida para aplicaciones tecnológicas.

Referente al cálculo de la respuesta óptica de los sistemas finitos mediante el cálculo de la reflectancia y de la transmitancia, como función del ángulo de incidencia de los sistemas formados por la placa finita de un material dieléctrico o de un metamaterial izquierdo dispersivo. La cual está compuesta de inclusiones cilíndricas de aire de superficies lisas y rugosas, concluimos que la rugosidad aleatoria sobre las superficies de las inclusiones cilíndricas afecta las propiedades reflectivas y transmitivas de la placa finita. Estos resultados nos indican que este aspecto es importante a tomar en cuenta en el proceso de fabricación de una placa finita.

En el capítulo V, se presentó un enfoque teórico basado en la recursividad de Haydock y cuya implementación computacional se encuentra en el paquete *Photonic* (Mochán *et al.*, 2016), para obtener la respuesta dieléctrica macroscópica de estructuras fotónicas en 2D y 3D formadas de un sistema periódico binario. En este sistema la red puede estar definida por coordenadas ortogonales o no ortogonales, con geometrías arbitrarias y para cualquier pareja de materiales que lo conformen. Se analizaron los casos no retardado y con retardamiento. El primero, válido cuando la longitud de onda del campo electromagnético es más grande que la escala característica del sistema periódico y el segundo, cuando ambos parámetros son de órdenes de magnitud comparables.

Aplicamos estos métodos para obtener la respuesta dieléctrica macroscópica de sistemas 2D formados por redes cuadradas y por redes hexagonales de cilindros paralelos, formados por materiales dieléctricos o metálicos embebidos en un medio dieléctrico. Para el caso sin retardamiento se hizo una comparación de la respuesta dieléctrica macroscópica con la obtenida al usar la fórmula 2D de Maxwell-Garnett (MG) (Datta

et al., 1993) obteniéndose muy buena concordancia para bajas fracciones de llenado, como era esperado, lo cual muestra que nuestro método es confiable. Para el caso de una red cuadrada se utilizó esta respuesta macroscópica para obtener la reflectancia del sistema para distintas fracciones de llenado y para inclusiones con superficies lisas y rugosas. Al comparar las respuestas ópticas de estos sistemas obtuvimos que la rugosidad no afecta significativamente las propiedades ópticas de estos sistemas, por lo que podemos concluir que estos sistemas son robustos frente a imperfecciones.

Al considerar retardamiento en nuestros sistemas, variando la frecuencia y el vector de onda de forma independiente y analizando los polos de la función de Green macroscópica obtenida por nuestro método numérico, obtuvimos la relación de dispersión de sus modos normales y estudiamos las estructuras de bandas fotónicas. Para el caso de una red cuadrada se hizo una comparación de los resultados con los obtenidos mediante el MEI (capítulo IV) obteniendo muy buena concordancia. Estos resultados también mostraron que el efecto de la rugosidad no induce cambios significativos en las estructuras de bandas de los diferentes sistemas. Esto nos dio confianza para extender los resultados a otras redes con otro tipo de componentes, como fue el cálculo de la estructura de bandas para una red hexagonal de cilindros metálicos.

Con estos resultados demostramos que nuestro enfoque macroscópico basado en la recursividad de Haydock y su implementación en el paquete *Photonic* es un procedimiento eficiente para obtener las propiedades ópticas de estructuras fotónicas ya sea en 2D o 3D formadas de un sistema periódico binario, donde la red puede estar formada por coordenadas ortogonales o no ortogonales, con geometrías arbitrarias y para cualquier pareja de materiales que lo conformen.

VI.1. Trabajo futuro

Puede ser interesante obtener para los sistemas descritos en este trabajo, una respuesta dieléctrica local y una permeabilidad magnética no local a partir de la respuesta macroscópica no local obtenida numéricamente, como se hizo en el trabajo de Juárez-Reyes and Mochán (2018) y usarla para calcular la reflectancia de nuestros sistemas. Para esto, a partir de la respuesta dieléctrica no local se analiza su expansión para vectores de onda pequeños. En particular, a partir de la segunda derivada de la permitividad respecto al vector de onda y a través una expresión aproximada se puede identificar la permeabilidad magnética del sistema.

Referencias

- Alexopoulos, A. (2010). Effective-medium theory of surfaces and metasurfaces containing two-dimensional binary inclusions. *Physical Review E*, **81**: 046607.
- Alu, A. and Engheta, N. (2003). Distributed-circuit-element description of guided-wave structures and cavities involving double-negative or single-negative media. En M. W. McCall and G. Dewar, editores, *Complex Mediums IV: Beyond Linear Isotropic Dielectrics*, Vol. 5218, páginas 145–155. International Society for Optics and Photonics, SPIE.
- Alu, A. and Engheta, N. (2004). Guided modes in a waveguide filled with a pair of single-negative (SNG), double-negative (DNG), and/or double-positive (DPS) layers. *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques*, **52**(1): 199–210.
- Alva-Medrano, H., Pérez-Aguilar, H., Mendoza-Suárez, A., and Villa-Villa, F. (2019). Surface modes in photonic crystal waveguides coated with a layer of dispersive left-handed material. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, **105**: 196–201.
- 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**: 79–87.
- Arfken, G. B., Weber, H. J., and Harris, F. E. (2012). *Mathematical Methods for Physicists, Seventh Edition: A Comprehensive Guide*. Academic Press, séptima edición. Págs. 1205.
- Aristizabal, V. H., Vélez, F. J., and Torres, P. (2006). Analysis of photonic crystal fibers: Scalar solution and polarization correction. *Optics Express*, **14**(24): 11848–11854.
- Ariza-Flores, A. D. (2013). *Espejos omnidireccionales basados en multicapas de silicio poroso para la región visible*. Tesis de Doctorado, Facultad de Ciencias de la UAEM. Págs. 89.
- Ariza-Flores, A. D., Gaggero-Sager, L. M., and Agarwal, V. (2011a). Effect of interface gradient on the optical properties of multilayered porous silicon photonic structures. *Journal of Physics D: Applied Physics*, **44**(15): 155102.
- Ariza-Flores, A. D., Gaggero-Sager, L. M., and Agarwal, V. (2012). White metal-like omnidirectional mirror from porous silicon dielectric multilayers. *Applied Physics Letters*, **101**(3): 031119.

- Ariza-Flores, D., Gaggero-Sager, L. M., and Agarwal, V. (2011b). Omnidirectional photonic bandgap in dielectric mirrors: a comparative study. *Journal of Physics D: Applied Physics*, **45**(1): 015102.
- Ariza-Flores, D., Pérez-Huerta, J., Kumar, Y., Encinas, A., and Agarwal, V. (2014). Design and optimization of antireflecting coatings from nanostructured porous silicon dielectric multilayers. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, **123**: 144–149.
- Asoh, H., Arai, F., and Ono, S. (2009). Effect of noble metal catalyst species on the morphology of macroporous silicon formed by metal-assisted chemical etching. *Electrochimica Acta*, **54**(22): 5142–5148.
- Baba, T. (s.f.). Photonic Crystals—an Introduction. *online*: https://www.jsps.go.jp/file/storage/general/j-bilat/fos-ja/data/jishi_06/abst08.pdf, Yokohama National University.
- Balderas-Valadez, R. F., Estévez-Espinoza, J. O., Salazar-Kuri, U., Pacholski, C., Mochán, W. L., and Agarwal, V. (2018). Fabrication of ordered tubular porous silicon structures by colloidal lithography and metal assisted chemical etching: SERS performance of 2D porous silicon structures. *Applied Surface Science*, **462**: 783–790.
- Barriuso, A. G., Monzón, J. J., Sánchez-Soto, L. L., and Felipe, A. (2005). Comparing omnidirectional reflection from periodic and quasiperiodic one-dimensional photonic crystals. *Optics Express*, **13**(11): 3913–3920.
- Beale, M. I. J., Benjamin, J. D., Uren, M. J., Chew, N. G., and Cullins, A. G. (1985). An experimental and theoretical study of the formation and microstructure of porous silicon. *Journal of Crystal Growth*, **73**(3): 622–636.
- Behzad, K., Mat Yunus, W. M., Talib, Z. A., Zakaria, A., Bahrami, A., and Shahriari, E. (2012). Effect of etching time on optical and thermal properties of p-type porous silicon prepared by electrical anodisation method. *Advances in Optical Technologies*, **2012**: 1–9.
- Bell, J. S., Kearsley, M. J., Pitaevskii, L. P., Landau, L. D., Lifshitz, E. M., and Sykes, J. B. (1984). *Electrodynamics of Continuous Media (course of theoretical physics)*, Vol. 8. Pergamon, segunda edición. Págs. 474.
- Bergman, D. J. and Dunn, K.-J. (1992). Bulk effective dielectric constant of a composite with a periodic microgeometry. *Physical Review B*, **45**(23): 13262–13271.
- Bergman, D. J. and Stroud, D. (1992). *Physical Properties of Macroscopically Inhomogeneous Media*, Vol. 46 de *Solid State Physics*. Academic Press. Series editor: Henry Ehrenreich and David Turnbull.
- Birks, T. A., Knight, J. C., and Russell, P. S. J. (1997). Endlessly single-mode photonic crystal fiber. *Optics Letters*, **22**(13): 961–963.

- Boarino, L., Imbraguglio, D., Enrico, E., De Leo, N., Celegato, F., Tiberto, P., Pugno, N., and Amato, G. (2011). Fabrication of ordered silicon nanopillars and nanowires by self-assembly and metal-assisted etching. *Physica status solidi (a)*, **208**(6): 1412–1416.
- Born, M. and Wolf, E. (1999). *Principles of Optics: electromagnetic theory of propagation, interference and diffraction of light*. Cambridge University Press, séptima edición. Págs. 988.
- Bria, D., Djafari-Rouhani, B., Akjouj, A., Dobrzynski, L., Vigneron, J. P., El Boudouti, E. H., and Nougauoui, A. (2004). Band structure and omnidirectional photonic band gap in lamellar structures with left-handed materials. *Physical Review E*, **69**(6): 066613.
- Bruggeman, D. A. G. (1935). Berechnung verschiedener physikalischer Konstanten von heterogenen Substanzen. I. Dielektrizitätskonstanten und Leitfähigkeiten der Mischkörper aus isotropen Substanzen. *Annalen der Physik*, **416**(7): 636–664.
- Bruyant, A., Léroncel, G., Reece, P. J., and Gal, M. (2003). All-silicon omnidirectional mirrors based on one-dimensional photonic crystals. *Applied Physics Letters*, **82**(19): 3227–3229.
- Bykov, V. P. (1972). Spontaneous emission in a periodic structure. *Soviet Journal of Experimental and Theoretical Physics*, **35**: 269.
- Cadien, K. C., Reshotko, M. R., Block, B. A., Bowen, A. M., Kencke, D. L., and Davids, P. (2005). Challenges for on-chip optical interconnects. En J. A. Kubby and G. E. Jabbour, editores, *Optoelectronic Integration on Silicon II*, Vol. 5730, páginas 133–143. International Society for Optics and Photonics, SPIE.
- Caloz, C., Chang, C.-C., and Itoh, T. (2001). Full-wave verification of the fundamental properties of left-handed materials in waveguide configurations. *Journal of Applied Physics*, **90**(11): 5483–5486.
- Canham, L. T. (1990). Silicon quantum wire array fabrication by electrochemical and chemical dissolution of wafers. *Applied Physics Letters*, **57**(10): 1046–1048.
- Cao, Y., Hou, Z., and Liu, Y. (2004). Finite difference time domain method for band-structure calculations of two-dimensional phononic crystals. *Solid State Communications*, **132**(8): 539–543.
- Castillo-Gallardo, V., Puente-Díaz, L., Lozano-Trejo, E., Pérez-Aguilar, H., and Mendoza-Suárez, A. (2019a). Effects of the Roughness in the Optical Response of a 2DPC That Have Dielectric or Dispersive LHM Cylindrical Inclusions: The Triangular Lattice. En A. Martínez-García, I. Bhattacharya, Y. Otani, and R. Tutsch, editores, *Progress in Optomechatronic Technologies*, páginas 37–44, Singapore. Springer Singapore. ISBN 978-981-32-9632-9.

- Castillo-Gallardo, V., Puente-Díaz, L., Pérez-Aguilar, H., Mendoza-Suárez, A., and Agarwal, V. (2019b). Modeling of the optical response of two-dimensional hexagonal periodicity photonic structures with cylindrical inclusions with randomly rough surfaces that include dispersive LHM. *Journal of Physics: Conference Series*, **1221**(1): 012015.
- Castillo-Gallardo, V., Puente-Díaz, L. E., Pérez-Aguilar, H., Mendoza-Suárez, A., and Villa-Villa, F. (2019c). Band structure of two-dimensional photonic crystals that include dispersive left-handed materials with rough surfaces in their lattice. *Journal of the Optical Society of America B*, **36**(4): 829–836.
- Castillo-Gallardo, V., Puente-Díaz, L.-E., Ariza-Flores, D., Pérez-Aguilar, H., Mochán, W. L., and Agarwal, V. (2021). Optimization of wide-band quasi-omnidirectional 1-D photonic structures. *Optical Materials*, **117**: 111202.
- Centeno-Jiménez, T. P. (2014). *Estructuras de bandas de cristales fotónicos en 2D con superficies rugosas usando un método integral*. Tesis de Licenciatura, Facultad de Ciencias Físico Matemáticas de la UMSNH. Págs. 100.
- Chang, S.-W., Chuang, V. P., Boles, S. T., Ross, C. A., and Thompson, C. V. (2009). Densely Packed Arrays of Ultra-High-Aspect-Ratio Silicon Nanowires Fabricated using Block-Copolymer Lithography and Metal-Assisted Etching. *Advanced Functional Materials*, **19**(15): 2495–2500.
- Cortés, E., Mochán, L., Mendoza, B. S., and Ortiz, G. P. (2010). Optical properties of nanostructured metamaterials. *Physica status solidi (b)*, **247**(8): 2102–2107.
- Datta, S., Chan, C. T., Ho, K. M., and Soukoulis, C. M. (1993). Effective dielectric constant of periodic composite structures. *Physical Review B*, **48**(20): 14936–14943.
- Derickson, D. (1998). *Fiber optics, test and measurements*. Hewlett-Packard professional books. Prentice Hall PTR, primera edición. Págs. 642.
- Edwards, D. F. (1997). - silicon (si)*. En E. D. Palik, editor, *Handbook of Optical Constants of Solids*, páginas 547 – 569. Academic Press, Burlington. ISBN 978-0-12-544415-6.
- Escorcia, J. and Agarwal, V. (2007). Effect of duty cycle and frequency on the morphology of porous silicon formed by alternating square pulse anodic etching. *Physica status solidi c*, **4**(6): 2039–2043.
- Estevez, J. O., Arriaga, J., Méndez Blas, A., and Agarwal, V. (2008). Omnidirectional photonic bandgaps in porous silicon based mirrors with a Gaussian profile refractive index. *Applied Physics Letters*, **93**(19): 191915.
- Estevez, J. O., Arriaga, J., Méndez Blas, A., and Agarwal, V. (2009). Enlargement of omnidirectional photonic bandgap in porous silicon dielectric mirrors with a Gaussian profile refractive index. *Applied Physics Letters*, **94**(6): 061914.

- Fink, Y., Winn, J. N., Fan, S., Chen, C., Michel, J., J. D., and Thomas, E. L. (1998). A Dielectric Omnidirectional Reflector. *Science*, **282**(5394): 1679–1682.
- Föll, H., Christophersen, M., Carstensen, J., and Hasse, G. (2002). Formation and application of porous silicon. *Materials Science and Engineering: R: Reports*, **39**(4): 93–141.
- Guan, H., Han, P., Yang, Y., Li, Y., Zhang, X., and Zhang, W. (2011). Omni-directional mirror for visible light based on one-dimensional photonic crystal. *Chinese Optics Letters*, **9**(7): 071603–071603.
- Halir, R., Bock, P. J., Cheben, P., Ortega-Moñux, A., Alonso-Ramos, C., Schmid, J. H., Lapointe, J., Xu, D. X., Wangüemert-Pérez, J. G., Molina-Fernández, I., and Janz, S. (2015). Waveguide sub-wavelength structures: a review of principles and applications. *Laser & Photonics Reviews*, **9**(1): 25–49.
- Haydock, R., Heine, V., and Kelly, M. J. (1972). Electronic structure based on the local atomic environment for tight-binding bands. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, **5**(20): 2845.
- Haydock, R., Heine, V., and Kelly, M. J. (1975). Electronic structure based on the local atomic environment for tight-binding bands. ii. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, **8**(16): 2591.
- Hestenes, M. R. and Stiefel, E. (1952). Methods of conjugate gradients for solving linear systems. *Journal of research of the National Bureau of Standards*, **49**(6): 409–436.
- Houck, A. A., Brock, J. B., and Chuang, I. L. (2003). Experimental observations of a left-handed material that obeys Snell’s law. *Physical Review Letters*, **90**: 137401.
- Huang, Z., Geyer, N., Werner, P., de Boor, J., and Gösele, U. (2011). Metal-Assisted Chemical Etching of Silicon: A Review. *Advanced Materials*, **23**(2): 285–308.
- Jackson, J. D. (1998). *Classical Electrodynamics*. Wiley, tercera edición. Págs. 834.
- James, F. and Winkler, M. (2004). *Minuit user’s guide*, Vol. 23. CERN, Geneva, segunda edición. Págs. 276.
- Jena, S., Tokas, R., Sarkar, P., Misal, J., Maidul Haque, S., Rao, K., Thakur, S., and Sahoo, N. (2016). Omnidirectional photonic band gap in magnetron sputtered TiO₂/SiO₂ one dimensional photonic crystal. *Thin Solid Films*, **599**: 138–144.
- Joannopoulos, J. D., Johnson, S. G., Winn, J. N., and Meade, R. D. (2008). *Photonic crystals: Molding the flow of light*. Princeton University Press, segunda edición. Págs. 305.
- John, S. (1987). Strong localization of photons in certain disordered dielectric superlattices. *Physical Review Letters*, **58**: 2486–2489.

- Juárez-Reyes, L. and Mochán, W. L. (2018). Magnetic Response of Metamaterials. *Physica status solidi (b)*, **255**(4): 1700495.
- Juárez-Reyes, L., Mendoza, B. S., and Mochán, W. L. (2020). Mie Scattering in the Macroscopic Response and the Photonic Bands of Metamaterials. *Physica status solidi (b)*, **257**(5): 1900557.
- Kershaw, D. S. (1978). The incomplete cholesky conjugate gradient method for the iterative solution of systems of linear equations. *Journal of Computational Physics*, **26**(1): 43–65.
- Kiyotoshi, Y. (2006). *Electromagnetic Theory and Applications for Photonic Crystals*. Optical science and engineering 102. Taylor & Francis. Págs. 457.
- Knight, J., Arriaga, J., Birks, T., Ortigosa-Blanch, A., Wadsworth, W., and Russell, P. (2000). Anomalous dispersion in photonic crystal fiber. *IEEE Photonics Technology Letters*, **12**(7): 807–809.
- Knight, J. C., Birks, T. A., Atkin, D. M., and Russell, P. S. J. (1996). Pure silica single-mode fibre with hexagonal photonic crystal cladding. En *Optical Fiber Communication Conference*, página PD3. Optica Publishing Group.
- Kochergin, V. and Föll, H. (2009). *Porous Semiconductors: Optical Properties and Applications*. Engineering Materials and Processes. Springer-Verlag London, primera edición. Págs. 210.
- Korvink, J. G. and Greiner, A. (2002). *Semiconductors for micro and nanotechnology: an introduction for engineers*. Wiley-VCH, primera edición. Págs. 341.
- Krauss, T. F. and De La Rue, R. M. (1999). Photonic crystals in the optical regime — past, present and future. *Progress in Quantum Electronics*, **23**(2): 51–96.
- Lagarias, J. C., Reeds, J. A., Wright, M. H., and Wright, P. E. (1998). Convergence Properties of the Nelder–Mead Simplex Method in Low Dimensions. *SIAM Journal on Optimization*, **9**(1): 112–147.
- Landauer, R. (1952). The Electrical Resistance of Binary Metallic Mixtures. *Journal of Applied Physics*, **23**(7): 779–784.
- Lehmann, G. and Spatschek, K. H. (2016). Transient Plasma Photonic Crystals for High-Power Lasers. *Physical Review Letters*, **116**: 225002.
- Lehmann, V. and Gösele, U. (1991). Porous silicon formation: A quantum wire effect. *Applied Physics Letters*, **58**(8): 856–858.
- Lekner, J. (2000). Omnidirectional reflection by multilayer dielectric mirrors. *Journal of Optics A: Pure and Applied Optics*, **2**(5): 349–352.

- Li, J., Huang, W., and Han, Y. (2006). Tunable photonic crystals by mixed liquids. *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*, **279**(1): 213–217.
- Li, X. (2012). Metal assisted chemical etching for high aspect ratio nanostructures: A review of characteristics and applications in photovoltaics. *Current Opinion in Solid State and Materials Science*, **16**(2): 71–81. Photonic Nanostructure Materials, Processing and Characterization.
- Li, X. and Bohn, P. W. (2000). Metal-assisted chemical etching in HF/H₂O₂ produces porous silicon. *Applied Physics Letters*, **77**(16): 2572–2574.
- Lin, W., Wang, G. P., and Zhang, S. (2005). Design and fabrication of omnidirectional reflectors in the visible range. *Journal of Modern Optics*, **52**(8): 1155–1160.
- Looyenga, H. (1965). Dielectric constants of heterogeneous mixtures. *Physica*, **31**(3): 401–406.
- Lozano-Trejo, E. (2017). *Estudio numérico de la respuesta óptica en guías de ondas de cristal fotónico usando programación en paralelo con los protocolos de MPI y CUDA*. Tesis de Licenciatura, Facultad de Ciencias Físico Matemáticas de la UMSNH. Págs. 80.
- Lu, D. and Liu, Z. (2012). Hyperlenses and metalenses for far-field super-resolution imaging. *Nature Communications*, **3**: 1205.
- Maradudin, A. A., Michel, T., McGurn, A. R., and Méndez, E. R. (1990). Enhanced backscattering of light from a random grating. *Annals of Physics*, **203**(2): 255–307.
- Medina-Magallón, J. E., Pérez-Aguilar, H., Zhevandrov-Bolshakova, P., and Mendoza-Suárez, A. (2019). Excitation of surface plasmon polaritons in photonic crystal waveguides that involve dispersive metamaterial. *Journal of Physics: Conference Series*, **1221**(1): 012010.
- Megens, M., Wijnhoven, J. E. G. J., Lagendijk, A., and Vos, W. L. (1999). Light sources inside photonic crystals. *Journal of the Optical Society of America B*, **16**(9): 1403–1408.
- Mendoza, B. S. and Mochán, W. L. (2016). Tailored optical polarization in nanostructured metamaterials. *Physical Review B*, **94**: 195137.
- Mendoza-Suárez, A. and Méndez, E. R. (1997). Light scattering by a reentrant fractal surface. *Applied Optics*, **36**(15): 3521–3531.
- Mendoza-Suárez, A. and Pérez-Aguilar, H. (2016). Numerical integral methods to study plasmonic modes in a photonic crystal waveguide with circular inclusions that involve a metamaterial. *Photonics and Nanostructures - Fundamentals and Applications*, **21**: 1–12.

- Mendoza-Suárez, A., Espinosa-Luna, R., Cruz-Mandujano, J., and Espinosa-Luna, J. (2001). Numerical technique to calculate modes in waveguides of arbitrarily cross-sectional shape. *Journal of the Optical Society of America A*, **18**(4): 961–965.
- Mendoza-Suárez, A., Ruíz-Corona, U., and Espinosa-Luna, R. (2004). Effects of wall random roughness on TE and TM modes in a hollow conducting waveguide. *Optics Communications*, **238**(4): 291–299.
- 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. *Journal of the Optical Society of America 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. *Journal of the Optical Society of America B*, **24**(12): 3091–3098.
- Mendoza-Suárez, A., Pérez-Aguilar, H., and Villa-Villa, F. (2011). Optical response of a perfect conductor waveguide that behaves as photonic crystal. *Progress In Electromagnetics Research*, **121**: 433–452.
- Missoni, L. L., Ortiz, G. P., Martínez-Ricci, M. L., Toranzos, V. J., and Mochán, W. L. (2020). Rough 1D photonic crystals: A transfer matrix approach. *Optical Materials*, **109**: 110012.
- Mochán, L. W., Ortiz, P. G., and Mendoza, B. S. (2010). Efficient homogenization procedure for the calculation of optical properties of 3D nanostructured composites. *Optics Express*, **18**(21): 22119–22127.
- Mochán, W. L. and Barrera, R. G. (1985). Electromagnetic response of systems with spatial fluctuations. I. General formalism. *Physical Review B*, **32**: 4984–4988.
- Mochán, W. L. and del Castillo-Mussot, M. (1988). Optics of multilayered conducting systems: Normal modes of periodic superlattices. *Physical Review B*, **37**: 6763–6771.
- Mochán, W. L., del Castillo-Mussot, M., and Barrera, R. G. (1987). Effect of plasma waves on the optical properties of metal-insulator superlattices. *Physical Review B*, **35**: 1088–1098.
- Mochán, W. L., P. Ortiz, G., Mendoza, B. S., and Pérez-Huerta, J. S. (2016). *Photonic-A perl package for calculations on metamaterials and photonic structures*. Comprehensive Perl Archive Network (CPAN), <https://metacpan.org/pod/Photonic>.
- Nelder, J. A. and Mead, R. (1965). A Simplex Method for Function Minimization. *The Computer Journal*, **7**(4): 308–313.

- Olschowka, M. and Neumaier, A. (1996). A new pivoting strategy for gaussian elimination. *Linear Algebra and its Applications*, **240**: 131–151.
- Pap, A. E., Kordás, K., Vähäkangas, J., Uusimäki, A., Leppävuori, S., Pilon, L., and Szatmári, S. (2006). Optical properties of porous silicon. part iii: Comparison of experimental and theoretical results. *Optical Materials*, **28**(5): 506–513.
- Parazzoli, C. G., Greigor, R. B., Li, K., Koltenbah, B. E. C., and Tanielian, M. (2003). Experimental verification and simulation of negative index of refraction using Snell’s law. *Physical Review Letters*, **90**: 107401.
- Park, Y., Roh, Y.-G., Cho, C.-O., Jeon, H., Sung, M. G., and Woo, J. C. (2003). GaAs-based near-infrared omnidirectional reflector. *Applied Physics Letters*, **82**(17): 2770–2772.
- Pavesi, L. (1997). Porous silicon dielectric multilayers and microcavities. *La Rivista del Nuovo Cimento*, **20**(10): 1–76.
- Pendry, J. B. (2000). Negative Refraction Makes a Perfect Lens. *Physical Review Letters*, **85**: 3966–3969.
- Pendry, J. B., Holden, A. J., Stewart, W. J., and Youngs, I. (1996). Extremely low frequency plasmons in metallic mesostructures. *Physical Review Letters*, **76**: 4773–4776.
- Pendry, J. B., Holden, A. J., Robbins, D. J., and Stewart, W. J. (1998). Low frequency plasmons in thin-wire structures. *Journal of Physics: Condensed Matter*, **10**(22): 4785–4809.
- Pendry, J. B., Holden, A. J., Robbins, D. J., and Stewart, W. J. (1999). Magnetism from conductors and enhanced nonlinear phenomena. *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques*, **47**(11): 2075–2084.
- Peng, K.-Q., Wang, X., Li, L., Hu, Y., and Lee, S.-T. (2013). Silicon nanowires for advanced energy conversion and storage. *Nano Today*, **8**(1): 75–97.
- Pérez-Aguilar, H. I. (2009). *Propagación y esparcimiento de luz en sistemas con geometrías confinantes*. Tesis de Doctorado, Centro de Investigación Científica y de Educación Superior de Ensenada. Págs. 127.
- Pérez-Alvarez, R. and Garcia-Moliner, F. (2004). *Transfer Matrix, Green Functions and Related Techniques: Tools for the Study of Multilayer Heterostructures*. Ciències experimentals. Castello de la Plana: Publicacions de la Universitat Jaume I. Págs. 285.
- Pérez-Hernández, E. (2015). *Estudio numérico de la propagación de la luz en guías de ondas periódicas y onduladas usando la programación en paralelo*. Tesis de Licenciatura, Facultad de Ciencias Físico Matemáticas de la UMSNH. Págs. 148.

- Pérez-Huerta, J. S. (2014). *La función dieléctrica macroscópica de sistemas estructurados*. Tesis de Doctorado, Instituto de Ciencias Físicas de la UNAM. Págs. 87.
- Pérez-Huerta, J. S., P. Ortiz, G., Mendoza, B. S., and Mochán, W. L. (2013). Macroscopic optical response and photonic bands. *New Journal of Physics*, **15**(4): 043037.
- Pérez-Huerta, J. S., Ariza-Flores, D., Castro-García, R., Mochán, W. L., Ortiz, G. P., and Agarwal, V. (2018). Reflectivity of 1D photonic crystals: A comparison of computational schemes with experimental results. *International Journal of Modern Physics B*, **32**(74): 1850136.
- Pitarke, J. M., García-Vidal, F. J., and Pendry, J. B. (1998). Effective electronic response of a system of metallic cylinders. *Physical Review B*, **57**(24): 15261–15266.
- Pitarke, J. M., Inglesfield, J. E., and Giannakis, N. (2007). Surface-plasmon polaritons in a lattice of metal cylinders. *Physical Review B*, **75**(16): 165415.
- Puente-Díaz, L. E. (2015). *Estructuras de bandas de cristales fotónicos en 2D con superficies rugosas que contienen metamaterial dispersivo*. Tesis de Licenciatura, Facultad de Ciencias Físico Matemáticas de la UMSNH. Págs. 76.
- Puente-Díaz, L. E. (2017). *Respuesta óptica de cristales fotónicos en 2D con superficies rugosas que contienen metamaterial dispersivo*. Tesis de Maestría, Facultad de Ciencias Físico Matemáticas de la UMSNH. Págs. 122.
- Puente-Díaz, L. E., Castillo-Gallardo, V., Pérez-Aguilar, H., and Mendoza-Suárez, A. (2019). Optical properties of two-dimensional square lattices with smooth and randomly rough surfaces that include dispersive left-handed materials. *Journal of Physics: Conference Series*, **1221**(1): 012008.
- Puente-Díaz, L. E., Castillo-Gallardo, V., Ortiz, G. P., Pérez-Huerta, J. S., Pérez-Aguilar, H., Agarwal, V., and Mochán, W. L. (2020). Stable calculation of optical properties of large non-periodic dissipative multilayered systems. *Superlattices and Microstructures*, **145**: 106629.
- Ramos-Mendieta, F. and Halevi, P. (1996). Surface modes in a 2D array of square dielectric cylinders. *Solid State Communications*, **100**(5): 311–314.
- Rayleigh, J. W. S. (1887). XVII. On the maintenance of vibrations by forces of double frequency, and on the propagation of waves through a medium endowed with a periodic structure. *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, **24**(147): 145–159.
- Rayleigh, J. W. S. (1888). XXVI. On the remarkable phenomenon of crystalline reflexion described by Prof. Stokes. *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, **26**(160): 256–265.

- Saad, Y. and Schultz, M. H. (1986). Gmres: A generalized minimal residual algorithm for solving nonsymmetric linear systems. *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing*, **7**(3): 856–869.
- Sakoda, K. (2005). *Optical properties of photonic crystals*. Springer series in optical sciences, v. 80. Springer, segunda edición. Págs. 258.
- Sánchez-López, S. (2016). *Estudio numérico de la programación en paralelo usando el protocolo cuda fortran*. Tesis de Licenciatura, Facultad de Ciencias Físico Matemáticas de la UMSNH. Págs. 101.
- Schinke, C., Christian, P. P., Schmidt, J., Brendel, R., Bothe, K., Vogt, M. R., Kröger, I., Winter, S., Schirmacher, A., Lim, S., Nguyen, H. T., and MacDonald, D. (2015). Uncertainty analysis for the coefficient of band-to-band absorption of crystalline silicon. *AIP Advances*, **5**(6): 067168.
- Shelby, R. A., Smith, D. R., Nemat-Nasser, S. C., and Schultz, S. (2001a). Microwave transmission through a two-dimensional, isotropic, left-handed metamaterial. *Applied Physics Letters*, **78**(4): 489–491.
- Shelby, R. A., Smith, D. R., and Schultz, S. (2001b). Experimental verification of a negative index of refraction. *Science*, **292**(5514): 77–79.
- Smith, D. R. and Kroll, N. (2000). Negative Refractive Index in Left-Handed Materials. *Physical Review Letters*, **85**: 2933–2936.
- Smith, D. R., Padilla, W. J., Vier, D. C., Nemat-Nasser, S. C., and Schultz, S. (2000). Composite medium with simultaneously negative permeability and permittivity. *Physical Review Letters*, **84**: 4184–4187.
- Smith, D. R., Pendry, J. B., and Wiltshire, M. C. K. (2004). Metamaterials and Negative Refractive Index. *Science*, **305**(5685): 788–792.
- Smith, R. L. and Collins, S. D. (1992). Porous silicon formation mechanisms. *Journal of Applied Physics*, **71**(8): R1–R22.
- Soljačić, M., Luo, C., Joannopoulos, J. D., and Fan, S. (2003). Nonlinear photonic crystal microdevices for optical integration. *Optics Letters*, **28**(8): 637–639.
- Staudé, I., McGuinness, C., Frolich, A., Byer, R. L., Colby, E., and Wegener, M. (2012). Waveguides in three-dimensional photonic bandgap materials for particle-accelerator on a chip architecture. *Optics Express*, **20**(2): 5607–5612.
- Stoer, J. and Bulirsch, R. (1993). *Introduction to Numerical Analysis*. Texts in Applied Mathematics 12. Springer New York, tercera edición. Págs. 754.
- Stroud, D. (1975). Generalized effective-medium approach to the conductivity of an inhomogeneous material. *Physical Review B*, **12**: 3368–3373.

- Tao, R., Chen, Z., and Sheng, P. (1990). First-principles Fourier approach for the calculation of the effective dielectric constant of periodic composites. *Physical Review B*, **41**(4): 2417–2420.
- Teo, S. H. G., Liu, A. Q., Yu, M. B., and Singh, J. (2006). Fabrication and demonstration of square lattice two-dimensional rodtype photonic band gap crystal optical intersections. *Photonics and Nanostructures - Fundamentals and Applications*, **4**(2): 103–115.
- Theiß, W. (1997). Optical properties of porous silicon. *Surface Science Reports*, **29**(3): 91–192.
- Theiß, W., Arens-Fischer, R., Arntzen, M., Berger, M., Frohnhoff, S., Hilbrich, S., and Wernke, M. (1994). Probing optical transitions in porous silicon by reflectance spectroscopy in the near infrared, visible and UV. *MRS Proceedings*, **358**: 435.
- Valligatla, S., Chiasera, A., Varas, S., Bazzanella, N., Rao, D. N., Righini, G. C., and Ferrari, M. (2012). High quality factor 1-D Er³⁺-activated dielectric microcavity fabricated by RF-sputtering. *Optics Express*, **20**(19): 21214–21222.
- Veselago, V. G. (1968). The electrodynamics of substances with simultaneously negative values of ϵ and μ . *Soviet Physics Uspekhi*, **10**(4): 509–514.
- Veselago, V. G. and Narimanov, E. E. (2006). The left hand of brightness: past, present and future of negative index materials. *Nature Materials*, **5**: 759–762.
- Wilkinson, J. H. and Reinsch, C. (1971). *Handbook for Automatic Computation: Volume II: Linear Algebra*. Die Grundlehren der mathematischen Wissenschaften 186. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, primera edición. Págs. 449.
- Winn, J. N., Fink, Y., Fan, S., and , J. D. (1998). Omnidirectional reflection from a one-dimensional photonic crystal. *Optics Letters*, **23**(20): 1573–1575.
- Wu, B.-I., Grzegorzczuk, T. M., Zhang, Y., and Kong, J. A. (2003). Guided modes with imaginary transverse wave number in a slab waveguide with negative permittivity and permeability. *Journal of Applied Physics*, **93**(11): 9386–9388.
- Xifré-Pérez, E., Marsal, L. F., Pallarès, J., and Ferré-Borrull, J. (2005). Porous silicon mirrors with enlarged omnidirectional band gap. *Journal of Applied Physics*, **97**(6): 064503.
- Xifré-Pérez, E., Marsal, L. F., Ferré-Borrull, J., and Pallarès, J. (2009). Low refractive index contrast porous silicon omnidirectional reflectors. *Applied Physics B*, **95**(1): 169–172.
- Yablonovitch, E. (1987). Inhibited spontaneous emission in solid-state physics and electronics. *Physical Review Letters*, **58**(72): 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.
- Yeh, P. (2005). *Optical Waves in Layered Media*. Wiley-Interscience, New Jersey, segunda edición. Págs. 415.
- Yen, T. J., Padilla, W. J., Fang, N., Vier, D. C., Smith, D. R., Pendry, J. B., Basov, D. N., and Zhang, X. (2004). Terahertz Magnetic Response from Artificial Materials. *Science*, **303**(5663): 1494–1496.
- Yu, S. P., Hood, J. D., Muniz, J. A., Martin, M. J., Norte, R., Hung, C. L., Meenehan, S. M., Cohen, J. D., Painter, O., and Kimble, H. J. (2014). Nanowire photonic crystal waveguides for single-atom trapping and strong light-matter interactions. *Applied Physics Letters*, **104**(60): 111103.
- Zhang, X. G. (2003). Morphology and Formation Mechanisms of Porous Silicon. *Journal of The Electrochemical Society*, **151**(1): C69.