



**UNIVERSIDAD MICHOACANA DE SAN NICOLÁS DE HIDALGO**

**FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICO MATEMÁTICAS**

“Mat. Luis Manuel Rivera Gutiérrez”

---

**ESTUDIO TEÓRICO Y EXPERIMENTAL DE ESTRUCTURAS**

**FOTÓNICAS UNI- Y BI- DIMENSIONALES**

---

**TESIS**

Para obtener el grado de

**DOCTOR EN CIENCIAS EN INGENIERÍA FÍSICA**

PRESENTA:

**VICTOR CASTILLO GALLARDO**

**ASESOR DE TESIS:**

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

**CO-ASESOR DE TESIS:**

Doctora en Ciencias  
**VIVECHANA AGARWAL**

Morelia, Michoacán, Marzo de 2021

## RESUMEN

Se han utilizado diferentes criterios para diseñar la reflectividad omnidireccional en diferentes rangos y regiones de los espectros electromagnéticos con el fin de sintetizar un reflector omnidireccional multicapa totalmente dieléctrico. Debido a la facilidad de fabricación y al proceso económicamente más viable, el interés en aplicar las propiedades ópticas de nanoestructuras de silicio poroso (SP) multicapa en dispositivos ópticos ha aumentado notablemente en las últimas décadas. Además del desarrollo de diferentes procesos de síntesis de SP, se han propuesto varias técnicas para calcular las propiedades ópticas de estructuras de SP. El SP se ha considerado un material muy versátil no solo debido a la variedad de estructuras fotónicas unidimensionales que se pueden fabricar, sino también debido a sus aplicaciones como sensores. Incluso las estructuras fotónicas bidimensionales, por ejemplo, membranas porosas o microestructuras como pilares, se han sintetizado a partir de SP. En los últimos años también se han propuesto estructuras tridimensionales basadas en SP.

En el presente trabajo se presenta el estudio teórico y experimental de las propiedades ópticas reflectivas de algunas estructuras fotónicas de SP unidimensional. Durante el estudio teórico, la reflectancia de las estructuras se maximiza utilizando *minuit* (software de optimización). Las estructuras se diseñan mediante dos técnicas: estructuras tipo chirped y espejos de Bragg apilados. Las estructuras de tipo chirped son espejos dispersivos de tipo Bragg con una variación espacial de la longitud de onda de diseño ( $\lambda_0$ ); esto sugiere que la variación espacial está modulada por alguna función. La reflectancia de las estructuras se calcula en dos rangos del espectro electromagnético: la primera región de 350 a 1400 nm y la segunda de 400 a 3000 nm en el rango angular de  $0^\circ$  a  $90^\circ$ . En la última técnica, las estructuras se forman apilando espejos de Bragg sintonizados con diferentes  $\lambda_0$ . En este caso, el  $\lambda_0$  del  $j$ -ésimo espejo es menor que el del siguiente. Para cada espejo se obtiene la banda de propagación prohibida de cada espejo y se consigue la superposición óptima de dos bandas consecutivas que maximizan la reflectancia de la estructura. Los cálculos de reflectancia se obtienen para luz no polarizada. Además, la aproximación de medios efectiva de Bruggeman se ha utilizado para calcular el índice de refracción de las capas de SP. Posteriormente, se sintetizan las estructuras fotónicas con la máxima reflectancia y el menor espesor físico. La síntesis electroquímica de estructuras multicapa con parámetros óptimos se lleva a cabo en obleas de silicio cristalino tipo  $p$ . La medición de las propiedades ópticas va seguida de la comparación de los espectros de reflectancia con los espectros calculados en diferentes ángulos de incidencia. En otras palabras, se diseñaron, sintetizaron y caracterizaron algunas estructuras omnidireccionales optimizadas con menos de 100 pares de capas. Dos de ellos tienen un ancho de banda omnidireccional de alrededor de 1800 nm, ubicado en la región del infrarrojo cercano.

Además, se presenta el análisis teórico y experimental de estructuras fotónicas chirped (SP) totalmente oxidadas. El análisis se realizó de 250 a 1400 nm, en el rango angular de  $0^\circ$  a  $90^\circ$ . En este caso, se sintetizaron y caracterizaron dos estructuras cuasi-omnidireccionales. La primera estructura refleja ( $R > 90\%$ ) de 385 a 1140 nm, en un rango espectral de  $0^\circ$  a  $45^\circ$ ; mientras que el segundo refleja de 430 a 1260 nm.

Por otro lado, la estructura de bandas en cristales fotónicos 2D compuestos por dieléctricos o que incluyen un metamaterial dispersivo con inclusiones cilíndricas que presentan superficies rugosas se calcula mediante el método de ecuación integral. Se encontró que para los cristales fotónicos puramente dieléctricos con una rugosidad relativamente pequeña (en comparación con la longitud de onda), las estructuras de las bandas no muestran cambios en comparación con las asociadas con los cristales fotónicos que tienen superficies lisas. Sin embargo, cuando se incluye un material dispersivo izquierdo en la red, las estructuras de las bandas se ven fuertemente afectadas bajo las polarizaciones TE y TM a medida que emergen nuevos espacios de bandas de fotones. Además, los espacios de banda que aparecen en el caso de superficies lisas cambian de posición, haciéndose más estrechos o generando más espacios de banda en la misma región.

**Palabras clave:** Silicio poroso, espejo de Bragg, estructura fotónica omnidireccional, estructura de banda fotónica, Método de la Matriz de Transferencia y de la Ecuación Integral, reflectancia y transmitancia optimizadas.

## ABSTRACT

Different criterion have been used for designing omnidirectional reflectivity over different ranges and regions of the electromagnetic spectra in order to synthesize all-dielectric multilayered omnidirectional reflector. Due to the ease of fabrication and economically more viable process, an interest in applying the optical properties of multilayered porous silicon nanostructures in optical devices has increased notably in recent decades. In addition, apart from the development of different porous silicon synthesis processes, several techniques have been proposed for calculating the optical properties of porous silicon structures. Porous silicon has been considered a very versatile material not only due to variety of one-dimensional photonic structures that can be fabricated but also due to their applications as sensors. Even two-dimensional photonic structures, for example porous membranes or pillar like Microstructures have been synthesized from porous silicon. In recent years, three-dimensional structures based on porous silicon have also been proposed.

In the present work, theoretical and experimental study of the reflective optical properties for some one-dimensional porous silicon photonic structures has been presented. During the theoretical study, the reflectance of the structures is maximized using minuit (optimization software). The structures are designed through two techniques: chirped-type structures and stacking Bragg mirrors. Chirped-type structures are Bragg-type dispersive mirrors with a spatial variation of the design wavelength ( $\lambda_0$ ); this suggests that the spatial variation is modulated by some function. The reflectance of the structures is calculated in two ranges of the electromagnetic spectrum: the first region from 350 to 1400 nm and the second from 400 to 3000 nm in the the angular range from  $0^\circ$  to  $90^\circ$ . In the latter technique, the structures are formed by stacking Bragg mirrors tuned to different  $\lambda_0$ . In this case, the  $\lambda_0$  of the  $j$ -th mirror is less than that of the subsequent one. For each mirror, the forbidden propagation band of each mirror is obtained and the optimal overlap of two consecutive bands is obtained that maximize the reflectance of the structure. Reflectance calculations are obtained for nonpolarized light. Furthermore, Bruggeman's effective media approximation has been used to calculate the refractive index of porous silicon layers. Subsequently, the photonic structures with the maximum reflectance and the smallest physical thickness are synthesized. The electrochemical synthesis of multilayered structures with optimal parameters is carried out on p-type crystalline silicon wafers. The measurement of the optical properties is followed by the comparison of the reflectance spectra with the calculated spectra at different angles of incidence. In other words, some optimized omnidirectional structures with less than 100 pairs of layers were designed, synthesized and characterized. Two of them have an omnidirectional bandwidth of around 1800 nm, located in the near infrared region.

Additionally, the theoretical and experimental analysis of fully oxidized chirped (porous silicon) photonic structures is presented. The analysis was performed from 250 to 1400 nm, in the angular range of  $0^\circ$  to  $90^\circ$ . In this case, two quasi-omnidirectional structures were synthesized and characterized. The first structure reflects ( $R > 90\%$ ) from 385 to 1140 nm, in a spectral range of  $0^\circ$  to  $45^\circ$ ; while the second reflects from

430 to 1260 nm.

On the other hand, the structure of the photon band in 2D photonic crystals composed of dielectrics or that include a dispersive metamaterial with cylindrical inclusions that present rough surfaces is calculated using the integral equation method. It was found that for purely dielectric photonic crystals with relatively small roughness (compared to wavelength), the band structures remain unperturbed compared to those associated with photonic crystals having smooth surfaces. However, when a dispersive left material is included in the lattice, the band structures are strongly affected under TE and TM polarizations as new photon band spaces emerge. In addition, the band spaces that appear in the case of smooth surfaces change their position, becoming narrower or generating more band spaces in the same region.

**Keywords:** Porous silicon, Bragg mirror, omnidirectional photonic structure, photonic band gap, Transfer Matrix Method and the Integral Equation Method, optimized reflectance and transmittance.

# Dedicado...

A mi hijo Ethan Alfonso, no hay palabras suficientes para expresar lo que representas  
para mí.

Te amo incondicionalmente.

*Sinceramente*

*Victor*

# Agradecimientos

En primer lugar deseo agradecer de forma muy especial, el apoyo prestado en todo momento por el Dr. Héctor I. Pérez Aguilar y la Dra. Vivechana Agarwal, como directores de esta tesis, por su atenta dedicación e interés mostrado en la dirección del presente trabajo. Por el apoyo incondicional que me han brindado siempre y la confianza que han depositado en mi desde el primer día que comencé a trabajar con ellos.

Al Dr. W. Luis Mochán Backal por sus valiosas observaciones en el desarrollo de una parte teórica de esta tesis y compartir gran parte de sus conocimientos.

A mis padres, a mi tios y a mis hermanos por su gran apoyo incondicional y motivarme a realizar estos estudios de posgrado.

En esta etapa de formación ha resultado inestimable la ayuda de los compañeros del Posgrado, especialmente Hugo, Eduardo y Luis Eduardo, por su compañía en todos los momentos personales y profesionales que han ocurrido. Una especial mención a mis compañeros de laboratorio, a los Drs. Alberto, Naveen, Tenoch y Cristian, a los Ings. Christopher, Jesús y Arturo, incluido el M. C. Sergio, que por su forma de ser, los considero parte de mi familia.

Al CONACyT por el apoyo económico otorgado mediante una beca de estudios de doctorado. Al ICF-UNAM y CIICAp-UEAM por permitirme desarrollar gran parte de esta tesis en sus instalaciones.

*Atentamente*

*Victor*

“Para saber lo que es posible es necesario intentar lo imposible”

Que bonita frase, pero ayer tuve un sueño: Soñé que era un buen astronauta, también soñé que era un buen padre y un excelente esposo, que era un verdadero amigo y un ciudadano completamente integro. Soñé que cumplía todas mis creencias religiosas y que era misericordioso con mi prójimo.

Al despertar descubrí lo que ya sabía, que estoy más cerca de ser un buen astronauta que de todo lo demás.

¿Pesimismo, fatalismo o melancolía? ¡No!, es mi sencilla realidad. Lo que pasa es que todos los días soy consciente de mi verdad, de mis limitaciones y fracasos. No importa cuanto me aprueben o celebren, soy yo el que convive conmigo mismo y mis buenas intenciones no me engañan. Pero debo admitir que aunque sea una gran paradoja, es justo esta latente realidad de lo que soy, la misma que me impulsa a cambiar. A querer crecer, a luchar por mejorar, por ser bueno, aunque esto último suene tonto y me parezca imposible.

Si de casualidad alguien se siente así como yo, feliz de estar vivo, pero triste por no ser mejor, bueno entonces ya somos dos. Hay que seguir intentando, ser un poquito mejor, intentar lo imposible y lograr por lo menos lo posible.

¡Gracias!

*Adaptado de "Lo imposible"*

*de Yokoi Kenji Diaz.*

# Contenido

|   | Página      |
|---|-------------|
| <b>Resumen</b>  | <b>i</b>    |
| <b>Abstract</b>   | <b>iii</b>  |
| <b>Dedicatoria</b>  | <b>v</b>    |
| <b>Agradecimientos</b>  | <b>vi</b>   |
| <b>Contenido</b>  | <b>viii</b> |
| <b>Lista de Figuras</b>   | <b>x</b>    |
| <b>I. INTRODUCCIÓN</b>  | <b>1</b>    |
| I.1. Características de los CFs . . . . .                                 | 2           |
| I.2. Estructuras fotónicas en 1D . . . . .                                | 4           |
| I.2.1. Técnicas de síntesis . . . . .                                     | 5           |
| I.3. Estructuras fotónicas en 2D . . . . .                                | 8           |
| I.3.1. Métodos de fabricación . . . . .                                   | 9           |
| I.3.2. Aplicaciones . . . . .   | 11          |
| I.4. Estructuras fotónicas que incluyen metamateriales . . . . .          | 14          |
| I.5. Métodos para calcular la respuesta óptica . . . . .                  | 16          |
| I.6. Estructura de la tesis . . . . .                                     | 18          |
| <b>II. PROPIEDADES ÓPTICAS DE ESTRUCTURAS FOTÓNICAS EN 1D</b>             | <b>21</b>   |
| II.1. Teoría de medio efectivo . . . . .                                  | 22          |
| II.1.1. Aproximación de leyes de potencias . . . . .                      | 23          |
| II.1.2. Aproximación de Maxwell-Garnet . . . . .                          | 24          |
| II.1.3. Aproximación de Bruggeman . . . . .                               | 24          |
| II.2. Matriz de transferencia . . . . .                                   | 27          |
| II.2.1. Tratamiento convencional . . . . .                                | 28          |
| II.2.2. Tratamiento con ondas de Bloch . . . . .                          | 33          |
| <b>III. SÍNTESIS DE ESTRUCTURAS FOTÓNICAS DE SP</b>                       | <b>37</b>   |
| III.1. El silicio poroso . . . . .  | 37          |
| III.1.1. Formación del silicio poroso . . . . .                           | 37          |
| III.1.2. Formación de capas de SP . . . . .                               | 40          |
| III.1.3. Aplicaciones del silicio poroso . . . . .                        | 41          |
| III.2. Metodología óptima para la síntesis de estructuras de SP . . . . . | 43          |

# Contenido (continuación)

|   | Página     |
|---|------------|
| III.2.1. Caracterización de la resistividad . . . . .                       | 43         |
| III.2.2. Síntesis de capas de SP . . . . .                                  | 44         |
| III.2.3. Medición de la reflectancia de la estructura sintetizada . . . . . | 47         |
| III.2.4. Obtención de la porosidad . . . . .                                | 48         |
| III.3. Resultados . . . . .   | 50         |
| III.3.1. Estructuras monocapa . . . . .                                     | 51         |
| III.3.2. Espejos multicapas . . . . .                                       | 52         |
| III.3.3. Heteroestructuras multicapas . . . . .                             | 53         |
| <b>IV. OPTIMIZACIÓN DE ESTRUCTURAS FOTÓNICAS A BASE DE SP</b>               | <b>55</b>  |
| IV.1. Estructuras fotónicas tipo chirped . . . . .                          | 55         |
| IV.2. Estructura fotónica con espejos apilados . . . . .                    | 61         |
| <b>V. ESTRUCTURAS FOTÓNICAS DE SILICA POROSA</b>                            | <b>67</b>  |
| V.1. Introducción . . . . .   | 67         |
| V.2. Diseño de la estructura . . . . .                                      | 70         |
| V.3. Resultados . . . . .   | 72         |
| <b>VI. MÉTODO DE LA ECUACIÓN INTEGRAL</b>                                   | <b>78</b>  |
| VI.1. Descripción de la metodología . . . . .                               | 78         |
| VI.1.1. Ecuación de Helmholtz . . . . .                                     | 79         |
| VI.1.2. Función de Green para la ecuación de Helmholtz . . . . .            | 81         |
| VI.1.3. Segunda identidad de Green . . . . .                                | 82         |
| VI.1.4. Representación integral . . . . .                                   | 82         |
| VI.1.5. Discretización de la ecuación integral . . . . .                    | 83         |
| VI.2. Estructuras de bandas de CF2Ds de red hexagonal . . . . .             | 86         |
| VI.2.1. CF2D formado por dieléctricos . . . . .                             | 90         |
| VI.2.2. CF2D formado por metamateriales . . . . .                           | 94         |
| VI.3. Respuesta óptica de una estructura fotónica . . . . .                 | 99         |
| VI.3.1. El IEM aplicado a un sistema finito . . . . .                       | 99         |
| VI.3.2. Estructuras fotónicas formadas por dieléctricos . . . . .           | 110        |
| VI.3.3. Estructuras fotónicas que incluyen LHM . . . . .                    | 113        |
| <b>VII. Conclusiones</b>  | <b>119</b> |
| VII.1. Conclusiones generales . . . . .                                     | 119        |
| VII.2. Trabajo futuro . . . . .   | 122        |
| <b>REFERENCIAS</b>  | <b>124</b> |

# Lista de Figuras

| Figura |   | Página |
|--------|---|--------|
| 1      | Tipos de cristales fotónicos y su presencia en la naturaleza: a) 1D, b) 2D, c) 3D, d) piedra de ópalo, e) plumas del pavo real y f) caparazón de escarabajos. . . . .   | 3      |
| 2      | (a) Propagación del campo electromagnético en un LHM. (b) Propagación de una haz que incide en una placa con índice de refracción negativo. (c) Estructura periódica que se comporta como un LHM. . . . .   | 15     |
| 3      | Los LHMs se pueden utilizar en (a) superlentes para microscopio, (b) ocultamiento, (c) dispositivo propuesto por la Universidad de Duke para el ocultamiento y (d) generación de haces direccionado por filtrado de los rayos. . . . .  | 15     |
| 4      | Representación esquemática de una mezcla de dos medios dieléctricos. (a) Esferas con función dieléctrica $\varepsilon_1$ inmersas en un medio dieléctrico con $\varepsilon_2$ . (b) Esfera aislada con función dieléctrica $\varepsilon_1$ inmersa en un medio dieléctrico efectivo. (c) Esferas con función dieléctrica $\varepsilon_2$ inmersas en un medio dieléctrico con $\varepsilon_1$ . (d) Esfera aislada con función dieléctrica $\varepsilon_2$ inmerso en un medio dieléctrico efectivo. . . . .  | 25     |
| 5      | Estructura fotónica tipo chirped formada por dos materiales alternos $a$ y $b$ , con índices de refracción $n_a$ y $n_b$ , su espesor $d_a$ y $d_b$ aumenta gradualmente según la condición de $1/4$ de la $j$ -ésima longitud de onda a la que el $j$ -ésimo periodo se sintonizará. $\mathbf{E}_\alpha^\beta$ y $\mathbf{H}_\alpha^\beta$ son los campos eléctricos y magnéticos, y $\mathbf{k}_\alpha^\beta$ es el vector de onda, donde $\alpha = \{i, r, a, b\}$ corresponde al medio en el que viaja la onda y $\beta = \{-, +\}$ a la dirección de propagación de la onda a lo largo del eje $\pm z$ . . . . . | 28     |
| 6      | Espectros de reflectancia de una estructura formada por 222 pares de capas, calculada como función de la longitud de onda y del ángulo de incidencia para (a) polarización TE, (b) polarización TM y (c) luz no polarizada. El primer y el último par de capas se sintonizan a 250 y 1400 nm, respectivamente. Las capas tienen una porosidad de 51% y 76% . . . . .  | 33     |
| 7      | El sistema multicapa mostrado en la figura anterior puede ser reemplazado por una amplia capa efectiva dentro de la cual los campos eléctrico $\mathbf{E}_\beta$ y magnético $\mathbf{H}_\beta$ , y una onda de Bloch $\mathbf{K}_\beta$ se propagan en la dirección positiva y otro conjunto se propaga en la dirección opuesta a lo largo de la eje $z$ . . . . .   | 35     |

## Lista de Figuras (continuación)

| Figura |   | Página |
|--------|---|--------|
| 8      | Espectros de reflectancia de la estructura E-I, calculada como función de la longitud de onda y del ángulo de incidencia (empleando los modos de Bloch) para (a) polarización TE, (b) polarización TM y (c) luz no polarizada. . . . .  | 36     |
| 9      | Mecanismo simplificado del ataque electroquímico del silicio en un electrolito que contiene HF. . . . .   | 38     |
| 10     | Máscara que indica los puntos para medir la resistividad de la oblea. Las líneas punteadas indican por donde pasarán los cortes de la oblea. . .  | 44     |
| 11     | Ejemplo de la preparación de la oblea. En esta etapa se secciona la oblea comercial y se le remueve el óxido nativo. . . . .  | 45     |
| 12     | (a) Esquema simplificado y (b) vista real de la celda electroquímica empleada. . . . .  | 46     |
| 13     | Curvas de ajuste de la (a) velocidad de formación y (b) porosidad de las capas de SP para obleas de Si con una resistividad de $1.4 \text{ m}\Omega\cdot\text{cm}$ y utilizando un electrolito de HF (48%) y etanol en proporción volumétrica de 1:1. Estas curvas son comparadas con las obtenidas por (Theiß, W. 1997) y (Ariza-Flores <i>et al.</i> 2012), respectivamente. . . . .                      | 50     |
| 14     | Reflectancia calculada y medida para las monocapas sintetizadas con (a) 10 y (c) 30 $\text{mA}/\text{cm}^2$ . La reflectancia se obtuvo a $8^\circ$ de incidencia y se empleó luz no polarizada. Micrografías de las monocapas sintetizadas con (b) 10 y (d) 30 $\text{mA}/\text{cm}^2$ , durante 300 y 120 s, respectivamente. . .   | 51     |
| 15     | (a) Reflectancia calculada y medida de un espejo de Bragg sintonizado a $\lambda_0 = 610 \text{ nm}$ . La reflectancia se obtuvo a $8^\circ$ con luz polarizada. (d) Micrografía del espejo de Bragg con 30 periodos. . . . .   | 53     |
| 16     | (a) Mapeo de la reflectancia calculada como función de la longitud de onda y del ángulo de incidencia de la estructura. (b) Micrografía de la estructura sintetizada. La estructura fue formada por tres espejos sintonizados a 400, 1100 y 1700 nm, cada uno. (c) Comparación de la reflectancia calculada y medida de la estructura. La reflectancia se obtuvo a $8^\circ$ con luz no polarizada. . . . . | 54     |

## Lista de Figuras (continuación)

| Figura | Página   |    |
|--------|--|----|
| 17     | Perfiles de las funciones optimizadas que modulan la distribución del $j$ -ésimo período sintonizados al diseño $\lambda_j$ para las estructuras analizadas en la región (a) de 350 a 1400 nm y (c) de 400 a 3000 nm. Espectros de reflectancia de las estructuras optimizadas en la región (b) de 350 a 1400 nm y (d) de 400 a 3000 nm. Las líneas de puntos delimitan el área donde $R > 90\%$ . En la primera región hay una banda OD y en la segunda región hay una banda de cuasi OD. Los cálculos son para luz no polarizada. . . . .                                      | 58 |
| 18     | Espectros de reflectancia calculados y medidos en diferentes ángulos de incidencia para la estructura (a) S-1 y (b) S-2. Los espectros de reflectancia son para luz no polarizada. La zona gris indica la región donde la reflectancia es superior al 90%. Esta región corresponde a la banda cuasi OD de la estructura. En el recuadro se muestra una fotografía de la estructura sintetizada. . . . .  | 60 |
| 19     | (a) Reflectancia calculada para la estructura optimizada. (b) Comparación entre los espectros de reflectancia medidos y calculados en varios ángulos de incidencia. Los espectros de reflectancia son para luz no polarizada. La banda gris indica la región en la que la reflectancia es superior al 90%. El recuadro muestra una fotografía con una vista superior de la estructura sintetizada. . . . .   | 64 |
| 20     | Reflectancia promedio calculada a partir de estructuras que tienen de 200 a 600 períodos. Su distribución está modulada por la ec. (57) y los valores de $\alpha$ van desde 0.4 hasta 1.6, diseñados para (a) incidencia normal y (d) incidencia de $45^\circ$ (cada contorno representa 1%, siendo los valores máximos obtenidos con 84% y 87% , respectivamente). Mapeo de la reflectancia de las estructuras (b) [(e)] S-A [S-B] y (c) [(f)] S-A' [S-B']. Las líneas punteadas indican el gap OD o cuasi OD. Los cálculos que se muestran son para luz no polarizada. . . . . | 73 |
| 21     | Espectros de reflectancia calculados y medidos a diferentes ángulos de incidencia, (a) antes y (b) después del proceso de oxidación de la estructura diseñada a incidencia normal. Los espectros son obtenidos para luz no polarizada. El área sombreada indica el gap cuasi-OD. En la columna de la derecha se muestran fotografías de la estructura reflejando un objeto a diferentes ángulos. . . . .   | 74 |

## Lista de Figuras (continuación)

| Figura |  | Página |
|--------|--|--------|
| 22     | Espectros de reflectancia calculados y medidos a diferentes ángulos de incidencia, (a) antes y (b) después del proceso de oxidación de la estructura diseñada a $45^\circ$ de incidencia. La reflectancia mostrada es para luz no polarizada. El área sombreada indica el gap cuasi-OD. En la columna de la derecha se muestran fotografías de la estructura reflejando un objeto a diferentes ángulos. . . . .  | 76     |
| 23     | Celda unitaria de un CF2D con una red hexagonal y una inclusión circular con su vector normal $\hat{\mathbf{n}}$ perpendicular al contorno $\Gamma_j$ . . . . .  | 87     |
| 24     | Estructuras de bandas fotónicas de un CF2D de red hexagonal para (a) $\varepsilon_1 = 1$ y $\varepsilon_2 = 5$ con $f = 0.169$ bajo polarización TE y (b) $\varepsilon_1 = 12.5$ y $\varepsilon_2 = 1$ con $f = 0.6$ para polarización TM. . . . .   | 91     |
| 25     | Estructuras de bandas fotónicas de CF2Ds dieléctricos de red hexagonal con fracción de llenado $f = 0.12$ y constantes dieléctricas $\varepsilon_1 = 1$ y $\varepsilon_2 = 8.9$ bajo (a) polarización TE y (b) polarización TM, y $\varepsilon_1 = 8.9$ y $\varepsilon_2 = 1$ para (c) polarización TE y (d) polarización TM. El recuadro muestra la celda unitaria en el espacio real y la primera zona de Brillouin para la estructura periódica estudiada. Las curvas sólidas corresponden a superficies de inclusión lisas y las líneas discontinuas representan superficies de inclusión rugosas. . . . . | 93     |
| 26     | Función dieléctrica relativa y permeabilidad magnética relativa de un LHM dispersivo en función de la frecuencia. . . . .  | 94     |
| 27     | Estructuras de bandas fotónicas de un CF2D de red hexagonal con cilindros de LHM dispersivos embebidos en aire con (a) $f = 0.1$ y (b) $f = 0.2$ , y agujeros cilíndricos perforados en una placa de LHM dispersivo con (c) $f = 0.1$ y (d) $f = 0, 2$ , bajo polarización TM. Las curvas continuas corresponden al caso liso y las líneas discontinuas representan el caso rugoso. . . . .  | 95     |
| 28     | (a) Estructura de bandas fotónicas de un CF2D con cilindros de LHM dispersivo y $f = 0.2$ obtenidas con diferentes realizaciones de un proceso aleatorio gaussiano, bajo polarización TM. (b) De manera similar, la estructura de banda obtenidas con un proceso aleatorio rectangular. Las curvas sólidas corresponden al caso liso y las curvas discontinuas al caso rugoso. . . . .   | 97     |

## Lista de Figuras (continuación)

| Figura | Página   |     |
|--------|--|-----|
| 29     | Estructuras de bandas fotónicas de un par de CF2Ds de red hexagonal con (a) cilindros de LHM dispersivo embebidos en aire, y (b) orificios perforados en una matriz de LHM con $f = 0.5$ , que se obtienen bajo polarización TE. Las curvas sólidas corresponden al caso liso y las curvas discontinuas al caso rugoso. . . . .  | 98  |
| 30     | Esquema de un CF2D finito. Los contornos de integración están indicados por las curvas punteadas. $R_1$ y $R_q$ representan las regiones donde se refleja y transmite la onda electromagnética, respectivamente. . . . .   | 100 |
| 31     | Diagrama de una estructura fotónica con inclusiones cuasi circulares. El haz que incide sobre el sistema es un haz gaussiano con un semi-ancho $g$ . Los ángulos $\theta_1$ y $\theta_s$ corresponden a los ángulos de incidencia y esparcimiento (para reflexión y transmisión), respectivamente. $R_1$ y $R_q$ corresponden a las regiones que contienen a los medios de incidencia y de transmisión, mientras que $R_2$ y $R_3 - R_{q-1}$ representan la región que contiene a las inclusiones y las regiones correspondientes a cada inclusión. . . . .  | 103 |
| 32     | Reflectancia (R) y Transmitancia (T) como función del ángulo de incidencia de una lámina de vidrio ( $\varepsilon_2 = 2.31$ ) bajo polarización (a) TE y (b) TM. La longitud de onda del haz de iluminación fue de 632 nm. Las líneas sólidas corresponden a la respuesta óptica obtenida con el IEM y las líneas punteadas corresponden a la respuesta óptica obtenida con las ecuaciones de Fresnel. . . . .   | 109 |
| 33     | Reflectancia (R) y transmitancia (T) como función del ángulo de incidencia de una estructura fotónica de 360 cilindros dieléctricos ( $\varepsilon = 2.31$ ) inmersos en aire ( $\varepsilon = 1$ ) con una fracción de llenado $f = 0.1$ bajo la polarización (a) TE y (b) TM. R y T de una placa dieléctrica ( $\varepsilon = 2.31$ ) con 360 huecos llenos de aire con una fracción de llenado $f = 0.1$ bajo la polarización (c) TE y (d) TM. Las líneas sólidas corresponden a paredes de las inclusiones lisas y las líneas punteadas corresponden a paredes con rugosidad. La longitud de onda del haz de iluminación es de 850 nm. . . . . | 111 |

## Lista de Figuras (continuación)

| Figura | Página   |     |
|--------|--|-----|
| 34     | Reflectancia (R) y transmitancia (T) como función del ángulo de incidencia de una estructura fotónica de 360 cilindros dieléctricos ( $\varepsilon = 4$ ) inmersos en aire ( $\varepsilon = 1$ ) con una fracción de llenado $f = 0.1$ bajo la polarización (a) TE y (b) TM. R y T de una placa dieléctrica ( $\varepsilon = 4$ ) con 360 huecos llenos de aire con una fracción de llenado $f = 0.1$ bajo la polarización (c) TE y (d) TM. Las líneas sólidas corresponden a paredes de las inclusiones lisas y las líneas punteadas corresponden a paredes con rugosidad. La longitud de onda del haz de iluminación es de 850 nm. . . . . | 112 |
| 35     | Reflectancia (R) y transmitancia (T) como función del ángulo de incidencia de una estructura fotónica de 600 cilindros dieléctricos ( $\varepsilon = 4$ ) inmersos en aire ( $\varepsilon = 1$ ) con una fracción de llenado $f = 0.1$ bajo la polarización (a) TE y (b) TM. R y T de una placa dieléctrica ( $\varepsilon = 4$ ) con 600 huecos llenos de aire con una fracción de llenado $f = 0.1$ bajo la polarización (c) TE y (d) TM. Las líneas sólidas corresponden a paredes de las inclusiones lisas y las líneas punteadas corresponden a paredes con rugosidad. La longitud de onda del haz de iluminación es de 850 nm. . . . . | 113 |
| 36     | Reflectancia (R) y transmitancia (T) como función del ángulo de incidencia de una estructura fotónica de 360 cilindros de LHM inmersos en aire ( $\varepsilon = 1$ ) con una fracción de llenado $f = 0.1$ bajo la polarización (a) TE y (b) TM. R y T de una placa de LHM con 360 huecos llenos de aire con una fracción de llenado $f = 0.1$ bajo la polarización (c) TE y (d) TM. Las líneas sólidas corresponden a paredes de las inclusiones lisas y las líneas punteadas corresponden a paredes con rugosidad. La frecuencia reducida del haz de iluminación es de $\bar{\omega} = 0.82$ . . . . .                                     | 114 |
| 37     | Reflectancia (R) y transmitancia (T) como función del ángulo de incidencia de una estructura fotónica de 360 cilindros de LHM inmersos en aire con una fracción de llenado $f = 0.2$ bajo la polarización (a) TE y (b) TM. R y T de una placa de LHM con 360 huecos llenos de aire con una fracción de llenado $f = 0.2$ bajo la polarización (c) TE y (d) TM. Las líneas sólidas corresponden a paredes de las inclusiones lisas y las líneas punteadas corresponden a paredes con rugosidad. La longitud de onda del haz de iluminación es $\lambda = 1.17 \mu\text{m}$ ( $\bar{\omega} = 0.85$ ). . . . .                                 | 115 |

# Capítulo I

---

## INTRODUCCIÓN

---

La ciencia e ingeniería han sido parte esencial en el desarrollo industrial y tecnológico de nuestro planeta que gran parte de este desarrollo se ha originado a partir de la comprensión de las propiedades de los materiales. En el siglo pasado, el deseo por controlar los materiales aumentó hasta incluir sus propiedades eléctricas. Los avances en el estudio de semiconductores han permitido manipular las propiedades de conductividad de ciertos materiales; iniciando de este modo la revolución que trajo consigo el transistor en el campo de la electrónica.

En las últimas décadas ha surgido un nuevo campo de estudio denominado Fotónica. El objetivo de este campo es llegar a controlar las propiedades ópticas de los materiales. Una extensa cantidad de desarrollos tecnológicos pueden llegar a ser posibles si es factible diseñar materiales que respondan al campo electromagnético en un rango de frecuencias deseado, reflejándose perfectamente, o permitiendo que se propaguen sólo en ciertas direcciones, o confinándolas en un volumen específico. Por ejemplo, la fibra óptica ha revolucionado la industria de las telecomunicaciones. Así, los materiales fotónicos revolucionarán aún más esta área de gran necesidad en la actualidad.

Por otra parte, la tendencia de los avances tecnológicos basados en el estado sólido

ha sido la miniaturización de los dispositivos electrónicos. Un efecto de esta tendencia lleva a la saturación del límite físico posible, en el cual, ya no permite incrementar la densidad de componentes electrónicos presentes, ni aumentar la velocidad de los mismos. Por estas razones, los científicos han desarrollado nuevas tecnologías basadas en otras alternativas de mayor viabilidad. Los cristales fotónicos (CFs), debido a sus propiedades, prometen ser una opción viable en cuanto a la capacidad y a la velocidad de procesamiento de información en un determinado tiempo.

## I.1. Características de los CFs

Como se menciona anteriormente un CF es un material que presenta una modulación periódica del índice de refracción cuyo propósito es controlar el flujo de la luz a través de su estructura mediante el fenómeno de difracción. Las alas de la mariposa, el caparazón de los escarabajos, las plumas de los pavo reales y los opalos contienen una microestructura periódica natural responsable del color iridiscente. Estas estructuras representan un cristal fotónico natural. El interés de los científicos en este tipo de microestructuras periódicas los ha llevado a obtenerlas artificialmente, mediante técnicas modernas que permiten micro-maquinar la materia en el régimen sub-micrométrico y nanométrico.

Los parámetros que definen un CF, y que determinarán sus propiedades, son: la geometría o estructura cristalina, la topología, el contraste de índices de refracción y la fracción de llenado.

- *Estructura cristalina.* Se refiere a la forma en que se modula el índice de refracción.

La modulación puede ser en una (1D), dos (2D), o tres dimensiones (3D), como se muestra en la fig. 1, según los requerimientos prácticos de interés.

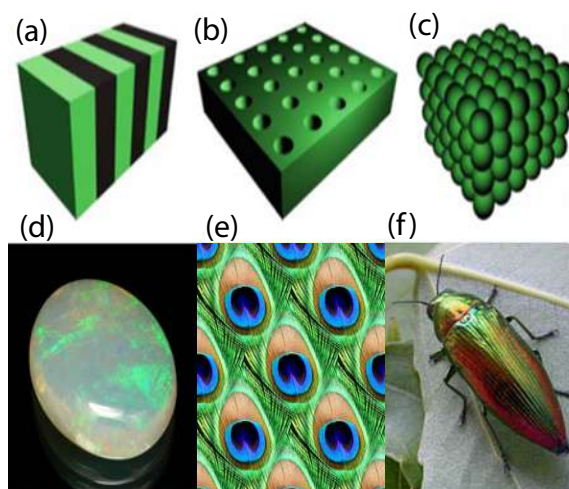


Figura 1. Tipos de cristales fotónicos y su presencia en la naturaleza: a) 1D, b) 2D, c) 3D, d) piedra de ópalo, e) plumas del pavo real y f) caparazón de escarabajos.

- *La topología* indica como se colocarán los centros dispersores (zonas de alto índice de refracción). Por ejemplo en un cristal fotónico bidimensional (CF2D), se pueden tener cilindros de algún tipo de material sumergidos en aire o viceversa, como en el caso de una placa dieléctrica con cilindros llenos de aire.
- *El contraste de los índices de refracción*. Entre más grande sea el contraste de los índices, las propiedades fotónicas serán más notorias.
- *La fracción de llenado* se define como el cociente entre el volumen o área de los centros dispersores y el volumen o área total del sistema. Las propiedades fotónicas variarán con la fracción de llenado para la misma estructura y la misma topología.

Un CF puede estar formado por diferentes tipos de materiales, como dieléctricos y/o metales donde su índice de refracción es positivo, o bien, metamateriales con índices de refracción negativo. Nuestro caso de interés son los dieléctricos, ya que las estructuras fotónicas bajo estudio se construyen en una oblea de silicio. Bajo esta consideración,

los CFs tienen regiones con constantes dieléctricas altas y bajas que se repiten de forma regular, las cuales afectan al campo electromagnético de la misma forma que un potencial periódico en un semiconductor afecta el movimiento de los electrones, definiendo bandas de energía permitidas y prohibidas (para un análisis más detallado ver la ref. (Joannopoulos *et al.*, 2008)).

## I.2. Estructuras fotónicas en 1D

Los CFs en 1D (a partir de aquí nos referiremos a ellos como estructuras fotónicas 1D, a menos que se indique lo contrario) presentan solamente periodicidad de la función dieléctrica  $\varepsilon$  en una dirección. En 1887, Lord Rayleigh empezó a estudiar sistemas 1D formados mediante el apilamiento periódico de múltiples láminas dieléctricas, mostrando que dichos sistemas poseen una banda fotónica prohibida o un rango espectral de gran reflexión en una dimensión (Rayleigh, 1888). Una variante de estos sistemas es una estructura fotónica compuesta por un número finito de capas. En estas capas se alternan periódicamente el índice de refracción, uno alto  $n_h$  y uno bajo  $n_l$ , con sus correspondientes espesores  $d_h$  y  $d_l$  elegidos de modo que sus espesores ópticos sean un cuarto de la longitud de onda  $n_H d_H = n_L d_L = \lambda_0/4$  a una longitud de onda nominal  $\lambda_0$ . Esto produce un espejo de Bragg que puede tener una banda omnidireccional (BOD) ancha si el contraste  $n_H/n_L$  y el número de períodos son lo suficientemente grandes. Los espejos con una BOD más amplia pueden diseñarse utilizando diferentes longitudes de onda nominales para diferentes capas. Por ejemplo, una forma de obtener estas estructuras es cambiar gradualmente el ancho de las capas en función de su profundidad, produciendo estructuras de tipo chirped (Szipócs and Kóházi–Kis, 1997). Otra alternativa es apilar varios espejos de Bragg, de tal manera que sus bandas de reflexión se superpongan parcialmente entre sí en el borde, dando como resultado una banda de alta reflexión

más ancha (Xifré-Pérez *et al.*, 2009).

### I.2.1. Técnicas de síntesis

Para obtener estructuras omnidireccionales (OD) que operan en el rango visible y/o infrarrojo cercano (Vis-NIR) del espectro electromagnético se han utilizado diferentes técnicas de fabricación, tales como:

**I** *Sol-gel*. Este proceso envuelve la transición de un sistema desde una fase líquida (sol) hasta una fase sólida (gel) mediante reacciones químicas de hidrólisis y condensación de los precursores metálicos. Mediante esta tecnología se obtienen materiales cerámicos basados en óxidos inorgánicos ( $\text{SiO}_2$ ,  $\text{TiO}_2$ ,  $\text{ZrO}_2$ ,  $\text{Al}_2\text{O}_3$ , etc.). En soluciones no acuosas se define al término de sol como aquellos sistemas donde la fase sólida no contiene partículas mayores a 1 nm; y los geles, que se definen como un sistema conformado por dos fases que contiene un sólido continuo y una fase líquida. Si una molécula alcanza dimensiones macroscópicas de modo que se extiende a través de la solución, la sustancia se denomina gel. El proceso sol-gel reemplaza las técnicas clásicas de fabricación de materiales a altas temperaturas por un proceso que se realiza a temperaturas menores y en el cual es posible formar redes mediante polimerización de monómeros a temperatura ambiente. Por ejemplo, Chen *et al.* (Chen *et al.*, 1999) reportó la fabricación de una estructura de  $\text{TiO}_2/\text{SiO}_2$  de 6 pares con una BOD aproximadamente de 70 nm en el rango NIR, empleando esta técnica.

**II** La *epitaxia por haces moleculares* es una técnica habitual en el crecimiento de heteroestructuras de semiconductores por la gran perfección cristalina que alcanza. Los haces moleculares inciden sobre un sustrato y diversas reacciones químicas

ocasionan la deposición de monocapas sucesivas. Mediante el adecuado control de las especies químicas de los haces se puede variar la composición de las capas epitaxiales. Los requerimientos técnicos son elevados pues se exige un perfecto control de la temperatura y vacío en la cámara de crecimiento. Park *et al.* (Park *et al.*, 2003), utilizó esta técnica para hacer crecer una pila de cuatro pares de capas de GaAs/AlAs, seguido de su conversión a capas de GaAs/Al<sub>2</sub>O por oxidación selectiva de las capas de AlAs, para obtener un OD con una banda de 710 a 950 nm.

**III** La técnica de deposición por *evaporación térmica en vacío* consiste en el calentamiento hasta la evaporación del material que se pretende depositar. El vapor del material termina condensándose en forma de lámina delgada sobre la superficie fría del sustrato y las paredes de la cámara de vacío. Normalmente la evaporación se hace a presiones reducidas, del orden de  $10^{-6}$  o  $10^{-5}$  Torr, con objeto de evitar la reacción del vapor con la atmósfera ambiente. A estas presiones bajas, el recorrido libre medio de los átomos de vapor es del orden de las dimensiones de la cámara de vacío por lo que estas partículas viajan en línea recta desde la fuente de evaporación (crisol) hasta el sustrato. Esto da lugar a fenómenos de “sombreado” en piezas de 3D sobre todo en aquellas regiones no directamente accesibles desde la fuente de evaporación. Al mismo tiempo, en las técnicas de evaporación térmica la energía media de llegada de los átomos de vapor a la superficie del sustrato suele ser baja (del orden de décimas de eV) lo cual puede afectar seriamente la morfología de las capas, resultando frecuentemente un material poroso y poco adherente. Utilizando la evaporación térmica y la centrifugación, DeCorby *et al.* (DeCorby *et al.*, 2005), fabricó una estructura fotónica con una BOD de 150 nm de ancho centrada en 1750 nm, mediante el acoplamiento de múltiples

capas de vidrio de calcogenuro  $\text{Ge}_{33}\text{As}_{12}\text{Se}_{55}$  y polímero de poliamida.

**IV** La técnica de *pulverización catódica* se basa en el depósito de capas delgadas, mediante la aceleración de los iones formados en un plasma que dirigidos hacia el blanco mediante un campo eléctrico. El blanco se encuentra entre el ánodo (parte superior) y el cátodo (parte inferior de la cámara de vacío). Sobre el blanco se aplica un gran diferencial de potencial, provocando que los iones del gas golpeen el blanco con energía suficiente para arrancar átomos de la superficie del disco mediante una transferencia de momento. El proceso de *pulverización catódica por magnetrón de radiofrecuencia* es asistido por un campo magnético, el cual tiene la función de aumentar la ionización del gas del proceso y dirigir el material pulverizado hacia la muestra donde se quiere depositar. Un ejemplo del uso de estas dos técnicas, es la estructura fotónica sintetizada por Jena *et al.* (Jena *et al.*, 2019) formada por capas de  $\text{TiO}_2/\text{SiO}_2$  y logró obtener una BOD de 592 a 668 nm.

Sin embargo, estas técnicas son caras y requieren equipos sofisticados y largos tiempos de fabricación. El uso de SP es una alternativa atractiva, ya que se puede fabricar fácilmente mediante *grabado electroquímico* de Si cristalino en un electrolito a base de ácido fluorhídrico, para obtener una nanoestructura esponjosa compuesta de Si y aire. Modulando la corriente suministrada y su tiempo de aplicación durante la reacción electroquímica, es posible obtener estructuras multicapa que permitan la fabricación de espejos OD (Xifré-Pérez *et al.*, 2015; Bisi *et al.*, 2000). Aunque los filtros ópticos (Estevez *et al.*, 2009; Ariza-Flores *et al.*, 2014) es la aplicación más común de los sistemas de SP, también se han utilizado ampliamente como sensores químicos (Ruminski *et al.*, 2011; Karthik *et al.*, 2018), guías de ondas (Hussell and Ramaswamy, 1997) y para el control de la fotoluminiscencia (Antunez *et al.*, 2014). Recientemente, el es-

tudio de estructuras multicapa tipo chirped se ha incrementado debido a su posible aplicación como espejos de enfoque planos (Wu *et al.*, 2021; Kozar *et al.*, 2017; Cheng and Staliunas, 2018).

Los filtros ópticos dieléctricos basados en SP, los espejos cuasi OD y OD se han estudiado ampliamente en diferentes regiones del espectro electromagnético, como el ultravioleta (UV<sup>1</sup>) (Jimenez Vivanco *et al.*, 2020), visible (Ariza-Flores *et al.*, 2012), e infrarrojo cercano (NIR<sup>2</sup>) (Bruyant *et al.*, 2003). Sin embargo, para obtener el alto índice de contraste de refracción deseable, deben emplearse capas de alta porosidad, lo que hace que las estructuras resultantes sean relativamente frágiles. Además, el uso de alta porosidad hace inviable la fabricación de grandes estructuras, con un gran número de capas. Por esta razón, en este trabajo estudiamos diferentes estrategias para producir espejos multicapa con banda omnidireccional de alta reflectancia con un grosor relativamente pequeño y contraste de índice de refracción reducido.

### I.3. Estructuras fotónicas en 2D

La estructura de los CF2Ds tiene asociada una función dieléctrica periódica en dos direcciones  $(x, y)$ , mientras que en la otra  $(z)$  permanece constante. Estos cristales pueden tener un gap fotónico en el plano de propagación  $x-y$ , donde no existen modos permitidos (frecuencias del espectro electromagnético). Así, si un haz de luz cumple con el rango de frecuencias del gap e intenta propagarse dentro del plano, éste será reflejado.

La polarización de la luz tiene una contribución importante en la presencia del gap fotónico en estos cristales. Al considerar un haz de luz que se propaga en un

---

<sup>1</sup>Por sus siglas en inglés, UltraViolet.

<sup>2</sup>Por sus siglas en inglés, Near-Infrared.

medio que es periódico en dos dimensiones, éste “observará” contrastes en el índice de refracción de acuerdo a la polarización con la que se propague dentro del medio. Debido a este fenómeno, es conveniente separar la polarización en transversal eléctrica TE (las componentes del campo electromagnético  $E_z$ ,  $H_x$  y  $H_y$  son diferentes de cero) y transversal magnética TM (las componentes de campo  $H_z$ ,  $E_x$  y  $E_y$  son diferentes de cero) para tener un mejor entendimiento del mecanismo de funcionamiento de los CFs.

### I.3.1. Métodos de fabricación

La investigación relacionada con la obtención y caracterización de CFs ha experimentado una rápida progresión en los últimos años, debido al gran interés despertado en diferentes ámbitos de las telecomunicaciones y en las aplicaciones de ingeniería de dispositivos fotónicos. Actualmente, existe un gran número de grupos de investigación, tanto teóricos como experimentales, que se dedican al análisis, diseño, fabricación y caracterización de CFs, convirtiéndose en estos momentos en una de las ramas más estudiadas en el campo de la óptica y nanotecnología.

En 1996 Thomas Krauss (Krauss *et al.*, 1996) desarrolló un CF en dos dimensiones en el que encontró un bandgap en la región del infrarrojo cercano. Esto abrió el camino a la fabricación de CFs aprovechando los métodos empleados en la industria de los semiconductores.

A continuación se describen los métodos más comunes empleados en la fabricación de CF2Ds (Krauss and De La Rue, 1999).

- I. *Litografía.* Esta técnica se ha tomado de la industria micro-electrónica; sin embargo, como en el caso de un CF las dimensiones de la red son muy pequeñas (periodicidad de 200-700 nm y con dimensiones de la inclusión que se repite periódicamente  $\sim 100$  nm) no es posible utilizar la fotolitografía estándar (Charlton

*et al.*, 1997). La alternativa es utilizar la litografía por haz de electrones (EBL<sup>3</sup>). Con este método se fabrican los CFs, que pueden ser empleados en aplicaciones que utilizan frecuencias en el visible o en el infrarrojo cercano.

II. *Eletroquímica*. Método también conocido como “grabado anódico y crecimiento” (Rowson *et al.*, 1998). El único requerimiento para iniciar el proceso es algo de discontinuidad en la superficie; una vez que el proceso da inicio, el tamaño del poro es determinado por la corriente electroquímica y no por el tamaño de la irregularidad en la superficie que inicia el proceso. Se han logrado relaciones de aspecto (profundidad - diámetro de la inclusión) impresionantes con esta técnica en aluminio y en silicio. Con este método se han obtenido relaciones de aspecto  $>50:1$  comparándose favorablemente con las relaciones  $<10:1$  que son típicos de “dry etching”. El alto grado de regularidad alcanzable con el proceso electroquímico sobrepasa las estructuras generadas por medios litográficos.

III. *Oxidación vertical selectiva*. Para fabricar un CF es necesario cambiar de forma periódica espacialmente las propiedades ópticas del material base, es por eso que se perfora un patrón de orificios mediante diversas técnicas (Dallesasse *et al.*, 1990). De esta forma, se crea un alto contraste de índice de refracción. Sin embargo, la distribución de orificios presentes en la superficie de la muestra dificulta el depósito de espejos o contactos una vez grabada la estructura. La oxidación vertical selectiva mantiene la integridad física del material, produciendo una micro estructura completamente sólida debido a que esta produce “columnas de óxido”, que brindan un contraste de índice de refracción, evitando la necesidad de perforar el material. El problema de esta técnica es que la relación de aspecto que pueden alcanzarse es muy pequeña (1:1); además de tener muy altas probabilidades de

---

<sup>3</sup>Por sus siglas en inglés, Electron-Beam Lithography.

generar micro-fracturas.

IV. *Haz enfocado de iones*. Un método muy útil para la fabricación de prototipos rápidos y modificación de CFs, es el haz enfocado de iones (FIB<sup>4</sup>) (Nellen *et al.*, 2007). Este equipo permite hacer un micro-maquinado sin la necesidad de utilizar máscaras o irregularidades en el material, como lo requieren alguno de los métodos antes mencionados. Para fabricar CFs mediante FIB, sólo es necesario indicar al equipo el patrón donde debe erosionar el material y establecer los parámetros de erosión (Castillo-Gallardo, 2016; Murillo *et al.*, 2019). Con este equipo es posible hacer varias iteraciones en un mismo material de forma rápida.

### I.3.2. Aplicaciones

Una de las propiedades ópticas de mayor interés en los CFs es el gap fotónico, debido a que las aplicaciones tecnológicas que se prevén dependen de la posición y el tamaño de dicho gap en estas estructuras. Aunque actualmente la tecnología no está tan desarrollada para la fabricación en masa de estos materiales, existen una cantidad considerable de aplicaciones opto-electrónicas donde estas estructuras pueden ser utilizadas (Yablonovitch *et al.*, 1991; Englund *et al.*, 2005; Assefa *et al.*, 2006; Ju *et al.*, 2008; Bernier *et al.*, 2008; Ebbesen *et al.*, 1998). Algunas de las aplicaciones de estos materiales son:

- *Manejo de radiación espontánea*. Esta característica de los CFs juega un rol importante en el diseño de fuentes de luz. En estas fuentes, los CFs con defectos inducidos, forman resonadores que proveen una fuerte localización de la radiación dentro del defecto. Esta radiación puede ser monocromática o policromática, i.e.

---

<sup>4</sup>Por sus siglas en inglés, Focused Ion Beam.

puede ser utilizada para manejo y mejoras de las características de láseres y de LEDs<sup>5</sup>.

- *Guías de onda fotónicas.* Se representan por defectos lineales de las estructuras periódicas en los CFs. Dichos defectos son capaces de guiar ondas dentro de un amplio rango de longitudes de onda. Una característica única de las guías de onda basadas en CFs es la capacidad de formar dobleces en la dirección de propagación de la radiación a un ángulo de 90° e incluso mayores, alcanzando una transmitancia mayor al 98%.
- *Manejo de dispersión.* Una propiedad de dispersión única de los CFs permite utilizarlos como super prismas, super lentes, multiplexores y demultiplexores.
- *Fibras micro-estructuradas.* Estas fibras ópticas consisten en CFs de tamaño finito con uno o muchos defectos introducidos en el centro. Existen dos tipos de fibras micro-estructuradas. Las primeras funcionan bajo el principio de reflexión total interna. Estas fibras son típicamente monomodo. Mientras que, el segundo tipo, se basa en la localización de la radiación dentro del defecto debido a un bandgap fotónico que cubre un rango de frecuencias dado. Estas últimas son fibras multimodo.
- *Luz lenta.* Esta aplicación emplea la habilidad de los CFs para inducir ultra-baja velocidad a longitudes de onda específicas. Los dispositivos basados en el efecto de luz lenta pueden ser utilizados como enrutadores fotónicos en redes ópticas transparentes, micro-láseres y líneas de retraso óptico.
- *Elementos no lineales.* El uso de materiales no lineales en CFs pueden ser utilizados para almacenamiento de información. Esto debido a que el material no lineal

---

<sup>5</sup>Por sus siglas en inglés, Light Emitting Diodes.

cambia su índice de refracción bajo la presencia de radiación de alta intensidad que pasa a través de él. Este efecto tiene lugar cuando dos haces de luz que tienen suficiente potencia inciden en la estructura fotónica no lineal, de tal forma que las características del CF cambian, particularmente la reflectancia y la transmitancia. Así, mediante este principio se puede controlar el cierre o apertura de un interruptor óptico con la intensidad de radiación incidente en el material debido a la presencia de uno o dos haces de luz.

- *Plasmones de superficie.* Muchos diseñadores de dispositivos (por ejemplo en el área de láseres de semiconductores) pasan esfuerzo en evitar la interacción entre el campo óptico en sus dispositivos y películas de metal, por ejemplo, el contacto entre ellos. Esto se entiende fácilmente, ya que, a frecuencias ópticas, las pérdidas por absorción en un metal pueden ser grandes. De hecho, la realidad de que no hay reflectores metálicos perfectos para las ondas ópticas es una de las motivaciones para la fabricación de CFs, porque en muchos casos simplemente pueden ser considerados como espejos de alta reflectividad.

Una propiedad óptica interesante que poseen los metales es que bajo ciertas condiciones la luz puede viajar por las superficies metálicas sin alejarse de ella. Esta propiedad es muy peculiar, ya que en condiciones normales la luz viaja por las tres dimensiones del espacio y no se le confina con facilidad. La luz se transporta en forma de “ondas plasmónicas”, que son excitaciones electrónicas colectivas generadas por un campo electromagnético que excita a una interfaz metal-dieléctrico. Como resultado de esta interacción entre la materia y la radiación, cuando los campos electromagnéticos están confinados a la superficie y se propagan a lo largo de la interfaz, se les llama polaritones de plasmones de superficie (SPP<sup>6</sup>)

---

<sup>6</sup>Por sus siglas en inglés, Surface Plasmon Polariton.

(Dragoman and Dragoman, 2008).

## I.4. Estructuras fotónicas que incluyen metamateriales

Se ha demostrado en los últimos años que agregar nuevos materiales a la estructura de los cristales fotónicos da como resultado propiedades novedosas de estos sistemas, que originalmente se concibieron como compuestos de materiales puramente dieléctricos (Li *et al.*, 2006; Stomeo *et al.*, 2006). Un tipo de material estructurado que recientemente han atraído mucho interés, a partir de los trabajos experimentales de Pendry y colaboradores (Pendry *et al.*, 1998; Pendry *et al.*, 1999), son los materiales zurdos o metamateriales (LHMs<sup>7</sup>). Su nombre se debe al hecho de que los vectores del campo electromagnético ( $\mathbf{E}$  y  $\mathbf{H}$ ) y el vector de onda ( $\mathbf{K}$ ) forman una tríada de mano izquierda para una onda propagándose a través de estos medios (fig. 2(a)). Este fenómeno fue predicho años atrás por Victor Veselago (Veselago, 1968). El LHM es creado artificialmente en el cual la permitividad eléctrica ( $\varepsilon$ ) y la permeabilidad magnética ( $\mu$ ) son simultáneamente negativas. La fig. 2(b) muestra la propagación de una onda electromagnética a través de una placa con índice de refracción negativo inmersa en un medio real ( $n_1 > 0$ ). Los primeros LHMs se diseñaron como matrices periódicas de condensadores y cables metálicos con una celda unitaria de dimensiones mucho más pequeñas que la longitud de onda, como se muestra en la fig. 2(c) (Smith *et al.*, 2000).

Varios grupos de investigación han propuesto que los LHMs sean aplicados en: superlentes o lentes de Pendry que, teóricamente, supera el límite de la resolución debido a la difracción y emplearse en microscopios de alta resolución (fig. 3(a)), capas de

---

<sup>7</sup>Por sus siglas en inglés, Left-Handed Materials.

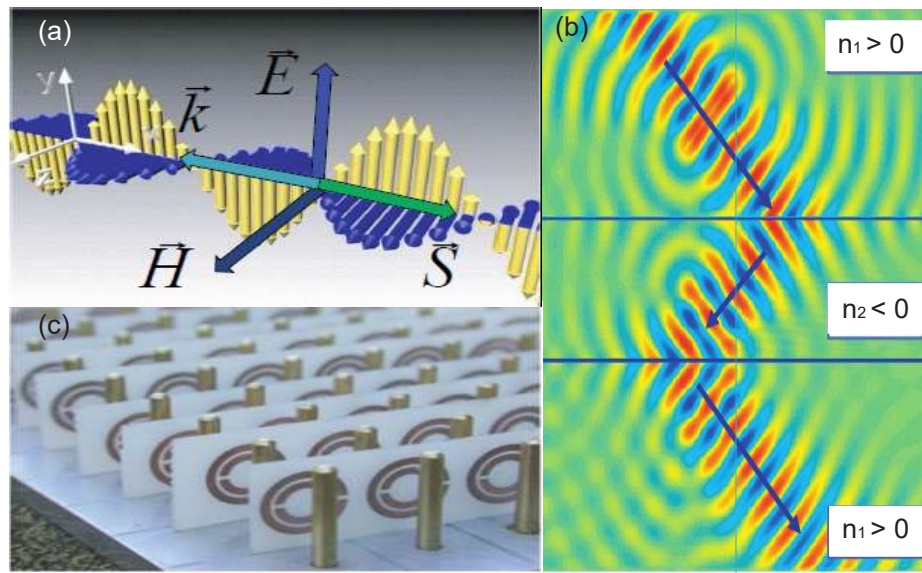


Figura 2. (a) Propagación del campo electromagnético en un LHM. (b) Propagación de una haz que incide en una placa con índice de refracción negativo. (c) Estructura periódica que se comporta como un LHM.

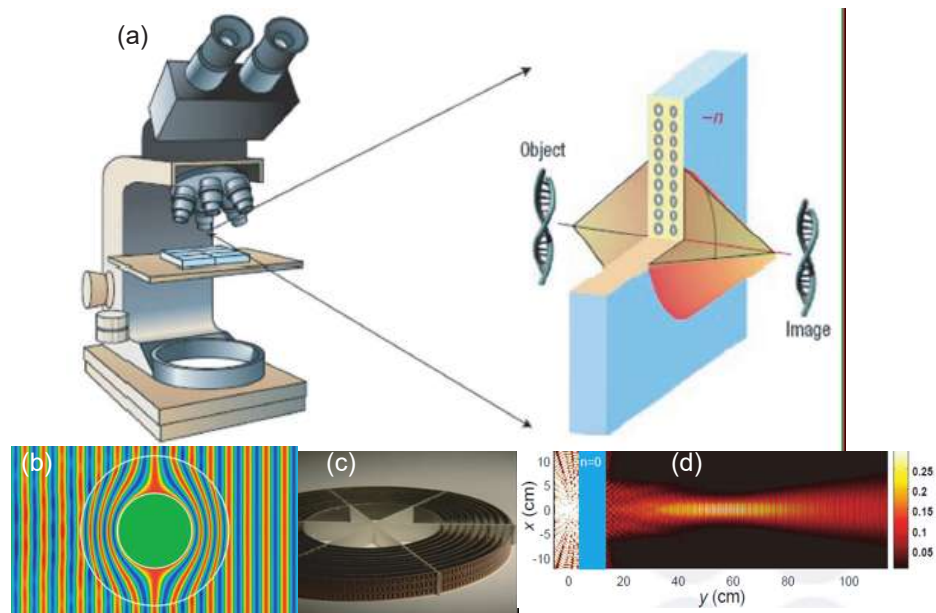


Figura 3. Los LHMs se pueden utilizar en (a) superlentes para microscopio, (b) ocultamiento, (c) dispositivo propuesto por la Universidad de Duke para el ocultamiento y (d) generación de haces direccionado por filtrado de los rayos.

invisibilidad (figs. 3(b) y 3(c)) (Schurig *et al.*, 2006), o dispositivos para la generación de haces direccionales por filtrado de los rayos (fig. 3(d)) (Martínez *et al.*, 2006), etc.

## I.5. Métodos para calcular la respuesta óptica

Al proponer una estructura fotónica es necesario pronosticar la posición y el tamaño de la banda fotónica prohibida (PBG<sup>8</sup>), así como la respuesta óptica. El método de la matriz de transferencia es el más utilizado para obtener las propiedades ópticas de estructuras fotónicas 1D. La matriz de transferencia es una herramienta que permite transformar las ecuaciones que tradicionalmente se plantean para describir el comportamiento de la luz al interactuar con un sistema óptico en un sistema matricial (Padrón-Godínez, 2017). Pueden ser aplicadas en la construcción de instrumentos ópticos sencillos y en el análisis de los mismos. Una opción tradicional para diseñar y construir dispositivos ópticos con reflexión y transmisión controladas son las películas delgadas o las estructuras multicapa.

Además, existen otros métodos útiles en el cálculo de las propiedades ópticas de estructuras fotónicas 1D y también pueden aplicarse a sistemas 2D, por ejemplo: el método de expansión de ondas planas o aproximación escalar (Archuleta-García *et al.*, 2014), el método de las Diferencias Finitas en el Dominio del Tiempo (Kane Yee, 1966), o el método de la Ecuación Integral (Mendoza-Suárez *et al.*, 2006, 2007), sólo por mencionar algunos. Básicamente estos métodos calculan las frecuencias (modos normales) de los cristales fotónicos para cada valor de la dirección de propagación dada por el vector de onda. A continuación, brevemente se dará una descripción de los métodos numéricos previamente mencionados.

En el método de ondas planas se realiza una expansión en serie de Fourier de la función dieléctrica y del campo electromagnético que son periódicos para tener un sistema de eigenvalores para la relación de dispersión. Con la relación de dispersión es posible obtener la estructura de bandas del sistema. A continuación se muestran

---

<sup>8</sup>Por sus siglas en inglés, Photonic Band Gap.

las ecuaciones representativas de este método aplicado a un sistema unidimensional en la dirección  $z$ , donde la longitud de la celda unitaria es  $d = a + b$  y la función dieléctrica está definida en el intervalo  $-d/2 \leq z \leq d/2$  (para más detalle ver la ref. (Archuleta-Garcia *et al.*, 2014)).

La función dieléctrica para un sistema 1D es

$$\varepsilon(z) = \varepsilon_1 + (\varepsilon_2 - \varepsilon_1) \Theta\left(\frac{a}{2} - |z|\right), \quad (1)$$

donde  $\Theta(z)$  es la función de Heaviside y vale 1 si  $z \geq 0$  y 0 si  $z < 0$ .

Después de expandir la ec. (1) se obtiene

$$\varepsilon(0) = \varepsilon_1 + f(\varepsilon_2 - \varepsilon_1), \quad (2)$$

$$\varepsilon(G_z) = (\varepsilon_2 - \varepsilon_1) \operatorname{sinc}\left(\frac{1}{2}G_z a\right), \quad (3)$$

donde  $G_z = \frac{2\pi}{d}n$  es un vector de la red recíproca y  $n$  es un número entero.

La ecuación de onda para este sistema la expresamos como

$$\frac{1}{\varepsilon(z)} \frac{\partial^2}{\partial z^2} E_y(z, \omega) + \frac{\omega^2}{c^2} E_y(z, \omega) = 0, \quad (4)$$

que en términos de los coeficientes de Fourier del campo eléctrico,  $u(k_x + G')$ , es

$$\sum_{G'_z} f_{G-G'} (k_x + G')^2 E(G'_z) = \frac{\omega^2}{c^2} E(G'_z), \quad (5)$$

siendo  $G'_z = \frac{2\pi}{d}n$ . Expandiendo la sumatoria desde  $-n$  hasta  $n$  se genera un sistema matricial de la forma  $\overleftrightarrow{A} \overrightarrow{X} = \lambda \overrightarrow{X}$ , siendo  $\lambda = \frac{\omega^2}{c^2}$  los eigenvalores y  $\overrightarrow{X} = E(N)$  las incógnitas del sistema.

En el método de diferencias finitas en el dominio del tiempo se hace un mallado del sistema igualmente espaciado de modo que los campos pueden ser evaluados de manera discreta dentro del sistema. Los operadores diferenciales se aproximan mediante una serie de Taylor. Para finalmente llegar a un sistema de eigenvalores. Para más detalle ver la ref. (Kane Yee, 1966).

El método de la ecuación integral parte del teorema de Green aplicado a la ecuación de Helmholtz, permitiendo obtener un par de ecuaciones integrales acopladas que involucran como incógnitas al campo y su derivada normal evaluadas en los contornos involucrados. Para tener un muestreo finito de puntos, los contornos se dividen en pequeñas regiones,  $\Delta s$ , de esta forma las ecuaciones acopladas se aproximan mediante sumatorias que resultan en un sistema matricial homogéneo (análisis infinito) y un sistema matricial inhomogéneo (análisis finito) cuya solución determina las funciones fuente, con las que se puede obtener la estructura de bandas y la reflectancia, respectivamente. Este método se desarrolla en esta tesis para el cálculo de las estructuras de bandas en un CF2D que contienen medios dieléctricos y/o de LHM.

## **I.6. Estructura de la tesis**

Esta tesis se desarrolla de la siguiente manera:

En el capítulo II, se presentan algunas teorías de medio efectivo empleadas para calcular la función dieléctrica de una mezcla heterogénea, por ejemplo, de materiales porosos. Concretamente, se aplica la teoría de Bruggeman a capas de SP. El SP es un material obtenido a través de corrosión electroquímica de silicio cristalino. Esta modificación provee al silicio de nuevas propiedades opto-electrónicas. El grado de porosidad y el material contenido en los poros permiten sintonizar las propiedades eléctricas y ópticas. Esto lo ha convertido en un material con potenciales aplicaciones en optoelectrónica y biotecnología. Adicionalmente, en este capítulo, se desarrolla el método de la matriz de transferencia (a través del formalismo convencional) para calcular la reflectancia de estructuras fotónicas formadas por multicapas de SP. Debido a que el SP es disipativo en la región del UV, el método de la matriz de transferencia se vuelve inestable (numéricamente) y poco fiable. También se desarrolla el formalismo

empleando la expansión de ondas de Bloch.

En el capítulo III, se mencionan algunos aspectos históricos del SP y se describe, brevemente, el proceso de formación del SP. También, se incluyen algunas de sus aplicaciones. Posteriormente, se presenta una metodología óptima para la síntesis de capas de SP.

En el capítulo IV, se desarrollan dos técnicas para diseñar estructuras fotónicas multicapa. En la primera, la distribución de los periodos de la estructura se modula mediante una función creciente. La función puede ser tan simple o complejo como se desee. La reflectancia de la estructura diseñada se maximizó con el módulo Minuit de PDL (Perl Data Language). La otra técnica para proponer estructuras altamente reflectantes en una amplia región del espectro electromagnético consiste en apilar espejos sintonizados en diferentes longitudes de onda. Para cada espejo se calcula su gap fotónico. En este tipo de estructuras se obtiene el traslape óptimo de dos gaps consecutivos que maximiza la reflectancia de la estructura. Tres de las estructuras optimizadas son sintetizadas y caracterizadas.

En el capítulo V, se compara la reflectancia calculada y medida a diferentes ángulos de incidencia de dos estructuras fotónicas de SP. Estas estructuras se oxidaron completamente, obteniendo espejos cuasi omnidireccionales en la región visible del espectro electromagnético, en un rango de  $0^\circ$  a  $45^\circ$  de incidencia.

En el capítulo VI, se describe una técnica rigurosa para modelar la interacción de la luz con un sistema fotónico. La técnica se conoce como el método de la ecuación integral. El método se aplica, en particular, para estudiar la propagación de luz a través de una estructura fotónica bidimensional. Se presenta un planteamiento teórico que permite calcular la estructura de bandas, los coeficientes de reflexión y transmisión de estructuras cristalinas bidimensionales de red hexagonal (aunque puede aplicarse a

otros tipos de red) con inclusiones de geometrías arbitrarias. Posteriormente, se verifica el método integral comparando los resultados obtenidos con los resultados existentes en la literatura. Finalmente, se aplica el método de la ecuación integral a diferentes estructuras fotónicas formadas por materiales dieléctricos y estructuras fotónicas que incluyen metamaterial.

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

## Capítulo II

---

# PROPIEDADES ÓPTICAS DE ESTRUCTURAS FOTÓNICAS EN 1D

---

En este capítulo se mencionan algunas teorías empleadas para calcular la función dieléctrica efectiva de una mezcla heterogénea, tal es el caso de materiales porosos. Un material poroso es un sistema que tiene una geometría y/o morfología que origina cavidades entre los elementos que lo forman. Estas cavidades son llamadas poros que de acuerdo al tamaño el material puede ser clasificado en micro, meso o macroporoso. Por ejemplo, el SP es un material obtenido a través de corrosión electroquímica de silicio cristalino. Esta modificación provee al silicio de nuevas propiedades en comparación del material en bulto, permitiendo sintonizar las propiedades eléctricas y ópticas en función de la porosidad y del material contenido en los poros. Esto lo ha convertido en un material con potenciales aplicaciones en optoelectrónica y biotecnología. Para el caso de capas mesopóricas de SP, en trabajos previos, se ha comprobado que la teoría de Bruggeman da la mejor aproximación de la función dieléctrica efectiva comparándola con resultados experimentales (Estrada-Wiese and Río, 2018; Canham, 2018). En consecuencia, es la aproximación más utilizada para calcular las propiedades ópticas de sistemas multicapa. Adicionalmente, en este capítulo, se desarrolla el método de la ma-

triz de transferencia para calcular la reflectancia de estructuras fotónicas formadas por multicapas de SP. Debido a que el SP es disipativo en la región del UV, y el método de la matriz de transferencia se vuelve inestable (numéricamente) y poco fiable, también se hace un análisis a través de la expansión de ondas de Bloch.

## II.1. Teoría de medio efectivo

En la teoría del medio efectivo, se describen las propiedades macroscópicas de un medio, basado en las propiedades y fases de cada uno de sus componentes (Stroud, 1975). Existen diversas aproximaciones para los medios efectivos, las cuales se ajustan en gran medida dependiendo de las distintas condiciones (Tinga *et al.*, 1973). Todas las aproximaciones asumen un medio macroscópico homogéneo y el campo resultante en el sistema es un campo promedio de todos los componentes. Supongamos un medio resultante de la mezcla de dos materiales, uno de función dieléctrica  $\varepsilon_1$  y el otro con  $\varepsilon_2$ . Si la mezcla es lo suficientemente homogénea de tal manera que un campo electromagnético externo no pueda distinguir entre los componentes del medio, entonces se obtendrá un medio efectivo. Comúnmente, los materiales porosos son descritos como una mezcla; en el caso del SP, de aire y silicio. Desde el punto de vista de la óptica, en el rango visible y el infrarrojo cercano del espectro electromagnético, el SP puede ser visto como un medio efectivo cuyas propiedades ópticas dependen de los volúmenes relativos del silicio, del medio que llena el poro y en algunos casos de óxidos de silicio (Ruminski *et al.*, 2011). Debido a que el SP presenta dos medios (aire y silicio) con funciones dieléctricas  $\varepsilon_1$  y  $\varepsilon_2$  respectivamente, es posible emplear un modelo de medio efectivo para describir el campo eléctrico en el interior de una estructura porosa.

Las reglas de medio efectivo se han desarrollado para obtener valores teóricos de la función dieléctrica efectiva ( $\varepsilon_{eff}$ ) de una mezcla, o de un medio heterogéneo compuesto

por materiales que son dieléctricamente diferentes entre sí. Analizando una mezcla heterogénea de dos componentes, uno formará la matriz y el otro se empotra como invitado, formando la fase de inclusiones. Sea  $\varepsilon_m$  la permitividad dieléctrica relativa del material huésped y  $\varepsilon_{fm}$  la del huésped. La fracción de volumen de las inclusiones se denota por  $f$ . Entonces, el volumen fraccional ocupado por el anfitrión es  $1 - f$ . Las mezclas tratadas son tridimensionales a menos que se indique lo contrario. Las permitividades son relativas, en otras palabras, cantidades adimensionales. Esto es para evitar mantener la permitividad de espacio libre  $\varepsilon_0$  en los resultados. Además, se sigue la convención armónica de tiempo  $e^{i\omega t}$  que conduce a una parte imaginaria negativa de la permitividad para los medios disipativos. Esto hace que la definición  $\varepsilon_{eff} = \varepsilon'_{eff} - i\varepsilon''_{eff}$  sea conveniente. A continuación se describen brevemente algunas teorías de medio efectivo.

### II.1.1. Aproximación de leyes de potencias

Una clase de modelos de mezcla ampliamente utilizada en aplicaciones de sensado remoto son las aproximaciones de la ley de potencia:

$$\varepsilon_{eff}^a = f\varepsilon_{fm}^a + (1 - p)\varepsilon_m^a. \quad (6)$$

Por ejemplo, la aproximación lineal ( $a = 1$ ) es la solución estática exacta para una mezcla sin depolarización (en otras palabras, en este tipo de mezclas el campo está polarizado paralelo al plano de incidencia). En la fórmula de Birchak (Birchak *et al.*, 1974) el parámetro es  $a = 1/2$ , lo que significa que las raíces cuadradas consideradas en volumen de las componentes de las permitividades se suman a la raíz cuadrada de la permitividad efectiva. Otro modelo propuesto es la fórmula de Looyenga (Looyenga, 1965), donde  $a = 1/3$ . Sin embargo, estas teorías son poco utilizadas en materiales porosos.

### II.1.2. Aproximación de Maxwell-Garnet

En 1904, Maxwell-Garnett (Garnett and Larmor, 1904) desarrolló una teoría de homogeneización simple pero inmensamente exitosa. Como cualquier teoría de este tipo, su objetivo es aproximar un medio electromagnético complejo a un medio eficaz homogéneo, por ejemplo, una solución coloidal de micropartículas de oro en agua. La fórmula de Maxwell-Garnett da la permitividad del medio efectivo (o, simplemente, la permitividad efectiva) en términos de las permitividades de los constituyentes individuales del medio complejo. La ecuación de Maxwell-Garnet (considerando esferas inmersas en una matriz) está dada por

$$\varepsilon_{eff} = \varepsilon_m \frac{2f_{fm}(\varepsilon_{fm} - \varepsilon_m) + \varepsilon_{fm} + 2\varepsilon_m}{\varepsilon_{fm} + 2\varepsilon_m - f_{fm}(\varepsilon_{fm} - \varepsilon_m)}. \quad (7)$$

Debido a que esta ecuación considera partículas aisladas, este modelo no es relevante para materiales porosos en los cuales hay percolación (Wolf *et al.*, 2008).

### II.1.3. Aproximación de Bruggeman

La teoría de Bruggeman (TB) se usa para hallar la función dieléctrica efectiva o resultante de una mezcla homogénea de dos o más componentes dieléctricos (Bruggeman, 1935). Se ha demostrado que esta teoría es la más adecuada para obtener la función dieléctrica efectiva de medios porosos (Estrada-Wiese and Río, 2018). En esta tesis, se utiliza la TB y a continuación se da una explicación más detallada.

Como primera aproximación, consideremos el medio efectivo formado de diminutas esferas dieléctricas ( $\varepsilon_{fm}$ ) inmersas en un medio dieléctrico ( $\varepsilon_m$ ), (fig. 4(a)), y que existe un campo eléctrico externo que permea todo el espacio. Desde el punto de vista macroscópico, si centramos la atención en un cilindro, podemos suponer que el campo eléctrico promedio afuera de la esfera corresponde al campo eléctrico promedio en todo

el medio. Entonces, podemos simplificar el problema del sistema, de tal manera que se trate de una esfera dieléctrica ( $\varepsilon_{fm}$ ) inmerso en un medio dieléctrico efectivo (fig. 4(b)). La función dieléctrica  $\varepsilon_{eff}$  será entonces resultante de la mezcla de constantes dieléctricas  $\varepsilon_{fm}$  y  $\varepsilon_m$ . Considerando el problema general de una esfera dieléctrica en un medio dieléctrico, dado un campo eléctrico externo que permea el sistema, el campo en el interior de la esfera, será

$$E_1^{int} = \frac{3\varepsilon_{eff}}{2\varepsilon_{eff} + \varepsilon_{fm}} E^{ext}, \quad (8)$$

donde  $E^{ext}$  es la magnitud del campo eléctrico externo.

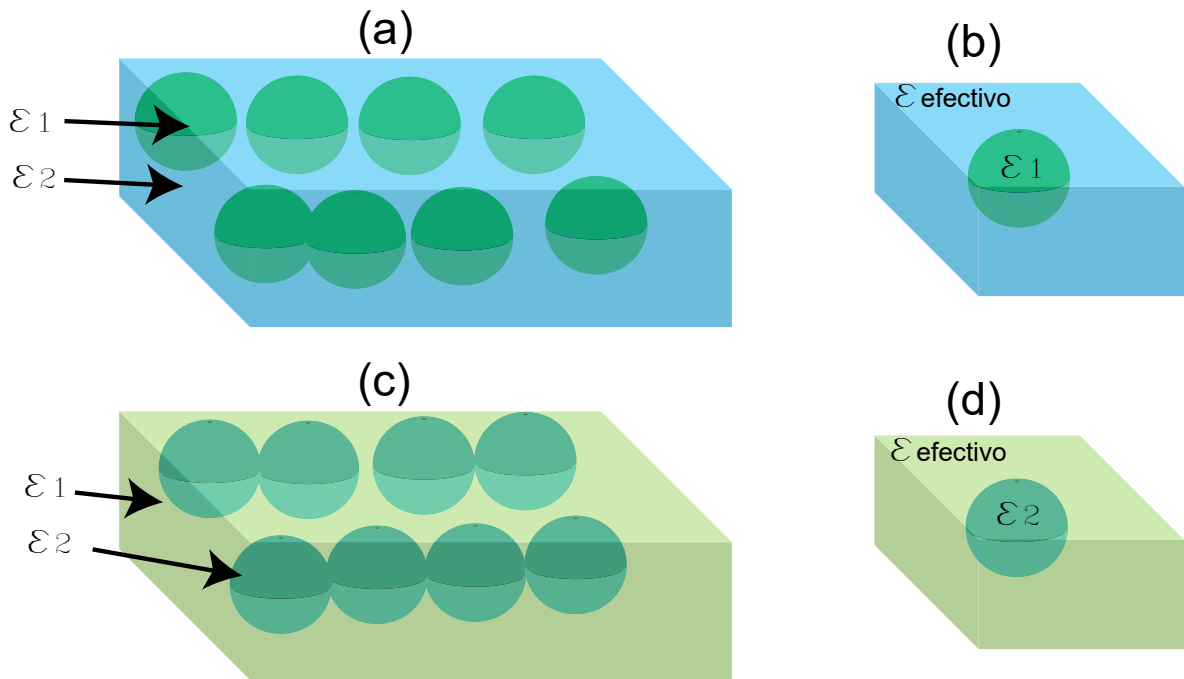


Figura 4. Representación esquemática de una mezcla de dos medios dieléctricos. (a) Esferas con función dieléctrica  $\varepsilon_1$  inmersas en un medio dieléctrico con  $\varepsilon_2$ . (b) Esfera aislada con función dieléctrica  $\varepsilon_1$  inmersa en un medio dieléctrico efectivo. (c) Esferas con función dieléctrica  $\varepsilon_2$  inmersas en un medio dieléctrico con  $\varepsilon_1$ . (d) Esfera aislada con función dieléctrica  $\varepsilon_2$  inmerso en un medio dieléctrico efectivo.

Por otro lado, podemos considerar el sistema opuesto en donde los cilindros están hechos del material con constante dieléctrica  $\varepsilon_m$ , y el medio tiene constante dieléctrica

$\varepsilon_{fm}$  (fig. 4(c)). En este caso, la expresión para el campo eléctrico dentro del cilindro de la fig. 4(d) será

$$E_2^{int} = \frac{3\varepsilon_{eff}}{2\varepsilon_{eff} + \varepsilon_m} E^{ext}. \quad (9)$$

Suponiendo que en ambos casos anteriores, la fracción de llenado de cada medio  $f_{fm}$  y  $f_m$  son complementarias para los dos sistemas, entonces el campo macroscópico promedio de la mezcla inicial se puede proponer como la suma de los campos de cada uno de los componentes en la proporción que tenga cada uno, siempre y cuando el tamaño de las esferas (en el sistema 1 y en el sistema 2) sean mucho menor que el tamaño de todo el sistema y la distribución de las mismas sea homogénea. Por lo tanto, en promedio, el campo al interior de todas las esferas de  $\varepsilon_{fm}$  más el campo interior  $\varepsilon_m$  será igual al campo total externo. Esto es

$$E^{ext} = f_{fm} \frac{3\varepsilon_{eff}}{2\varepsilon_{eff} + \varepsilon_{fm}} E^{ext} + f_2 \frac{3\varepsilon_{eff}}{2\varepsilon_{eff} + \varepsilon_m} E^{ext}, \quad (10)$$

por lo tanto, reduciendo términos se obtiene

$$f_1 \frac{\varepsilon_{eff} - \varepsilon_{fm}}{2\varepsilon_{eff} + \varepsilon_{fm}} + f_2 \frac{\varepsilon_{eff} - \varepsilon_m}{2\varepsilon_{eff} + \varepsilon_m} = 0. \quad (11)$$

La relación anterior es la ecuación de Bruggeman para dos medios y relaciona la función dieléctrica efectiva ( $\varepsilon_{eff}$ ) con las funciones dieléctricas de cada medio ( $\varepsilon_1$  y  $\varepsilon_2$ ). La generalización para una mezcla de  $N$  medios dieléctricos es

$$\sum_{i=1}^N f_i \frac{\varepsilon_{eff} - \varepsilon_{fm_i}}{2\varepsilon_{eff} + \varepsilon_m} = 0, \quad (12)$$

donde  $f_i$  es la fracción de llenado y  $\varepsilon_i$  la constante dieléctrica del  $i$ -ésimo medio.

Aplicando la ecuación de Bruggeman al SP, tenemos que

$$p \frac{\varepsilon_{SP} - \varepsilon_{Aire}}{\varepsilon_{SP} + \varepsilon_{Aire}} + (1 - p) \frac{\varepsilon_{SP} - \varepsilon_S}{\varepsilon_{SP} + \varepsilon_S} = 0, \quad (13)$$

o bien,

$$p \frac{n_{SP}^2 - n_{Aire}^2}{n_{SP}^2 + n_{Aire}^2} + (1 - p) \frac{n_{SP}^2 - n_S^2}{n_{SP}^2 + n_S^2} = 0, \quad (14)$$

donde  $p$  es la porosidad de la capa de SP,  $n_S$ ,  $n_{Aire}$  y  $n_{SP}$  son los índices de refracción del silicio cristalino, del aire y del SP, respectivamente.

## II.2. Matriz de transferencia

La importancia de la matriz de transferencia es incuestionable en todos los campos de la física y de la ingeniería. Las referencias que se pueden encontrar sobre este asunto en la literatura son muy amplias (Yeh, 2005; Pérez-Alvarez and García-Moliner, 2004). Por ejemplo, el método de la matriz de transferencia puede ser utilizado para el análisis de ondas que se propagan, como partículas cuánticas; así como, los electrones en pozos cuánticos. También, puede ser utilizada para describir fenómenos con ondas mecánicas y ondas electromagnéticas. En el caso de ondas electromagnéticas, este tratamiento se basa en el hecho de que las ecuaciones que rigen la propagación de la luz en medios homogéneos e isotrópicos son lineales. Si se considera que el sistema sólo varía en el eje  $z$ , la matriz de transferencia  $M(z_2, z_1)$  es una matriz de  $2 \times 2$  que relaciona las componentes del campo eléctrico  $\mathbf{E}_{\parallel}$  y del campo magnético  $\mathbf{H}_{\parallel}$  paralelo al plano,  $x$ - $y$ , y normal al eje de la estructura, evaluados en dos puntos cualesquiera  $z_2$  y  $z_1$ ,

$$\begin{pmatrix} E_{\parallel} \\ H_{\parallel} \end{pmatrix}_{z_2} = M(z_2, z_1) \begin{pmatrix} E_{\parallel} \\ H_{\parallel} \end{pmatrix}_{z_1} .$$

Se han propuesto muchas formulaciones equivalentes para obtener  $M$ . Por ejemplo, en la metodología más utilizada, cada capa se caracteriza por una matriz de  $2 \times 2$  que transfiere los componentes independientes continuos del campo electromagnético de una interfaz a la siguiente. Posteriormente, multiplicando las matrices de todas las capas obtenemos una matriz de transferencia que relaciona los campos en la primera y 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 García-Moliner, 2004) y las propiedades ópticas resultantes pueden ser poco fiables. Para subsanar este inconveniente, Puente-Díaz (Puente-Díaz *et al.*, 2020) propone una herramienta confiable y estable para diseñar una estructura con un número grande de capas de materiales absorbentes y disipativos. A continuación se desarrollan las dos formulaciones aplicadas a un espejo de Bragg tipo *chirped*.

### II.2.1. Tratamiento convencional

Supongamos una estructura multicapa dieléctrica como se muestra en la fig. 5. Tal

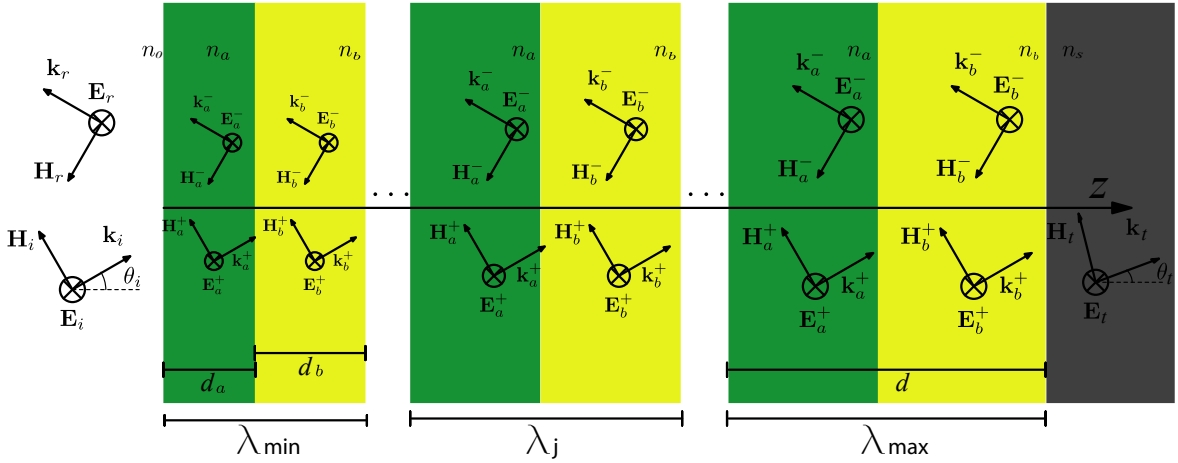


Figura 5. Estructura fotónica tipo chirped formada por dos materiales alternos  $a$  y  $b$ , con índices de refracción  $n_a$  y  $n_b$ , su espesor  $d_a$  y  $d_b$  aumenta gradualmente según la condición de  $1/4$  de la  $j$ -ésima longitud de onda a la que el  $j$ -ésimo periodo se sintonizará.  $\mathbf{E}_\alpha^\beta$  y  $\mathbf{H}_\alpha^\beta$  son los campos eléctricos y magnéticos, y  $\mathbf{k}_\alpha^\beta$  es el vector de onda, donde  $\alpha = \{i, r, a, b\}$  corresponde al medio en el que viaja la onda y  $\beta = \{-, +\}$  a la dirección de propagación de la onda a lo largo del eje  $\pm z$ .

estructura se puede describir matemáticamente como

$$\begin{aligned}
 n_0, \quad z < z_0, \\
 n_a, \quad z_{2(j-1)} < z < z_{2j-1}, \\
 n_b, \quad z_{2j-1} < z < z_{2j}, \\
 n_s, \quad z_{2N} < z,
 \end{aligned} \tag{15}$$

donde  $z_i$  es la posición de la interfaz entre la  $i$ -ésima capa y la capa  $i+1$ ,  $j$  es el  $j$ -ésimo periodo que está sintonizado a la  $j$ -ésima longitud de onda (aquí  $n_a$  y  $n_b$  corresponden a los índices de refracción alto y bajo). Además,  $n_0$  y  $n_s$  son los índices de refracción del medio incidente y del sustrato, respectivamente. Los espesores de las capas están determinados por la condición de Bragg.

El campo electromagnético más simple que se puede considerar es una onda plana que se propaga armónicamente en el espacio; por ejemplo,  $\psi = \psi_0 e^{i(kz - \omega t)}$ . Si el campo eléctrico es perpendicular al plano de incidencia (modo TE), el campo electromagnético es descrito por

$$\mathbf{E} = (0, E_y, 0) \tag{16}$$

y

$$\mathbf{H} = (H_x, 0, H_z). \tag{17}$$

La impedancia superficial de un material ( $Z$ ), se define como el cociente del campo eléctrico y magnético a lo largo de la superficie. A partir de la componente  $x$  de la ecuación de Faraday

$$\left( \nabla \times \mathbf{E} = -\mu \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{H} \right)_x, \tag{18}$$

o bien,

$$kE_y = -\mu\omega H_x, \tag{19}$$

se obtiene la expresión para  $Z$ :

$$Z = \frac{E_y}{H_x} = -\frac{\mu\omega}{k}. \quad (20)$$

Al analizar el campo electromagnético en la interfaz  $z_1$  de la fig. 5, se tiene

$$E_y(1) = E_+(1) + E_-(1) \quad (21)$$

y

$$\begin{aligned} H_x(1) &= H_+(1) + H_-(1) \\ &= Z_1^{-1}E_+(1) - Z_1^{-1}E_-(1), \end{aligned} \quad (22)$$

donde se han utilizado las ecs. (19) y (20). La forma compacta de representar las componentes  $E_y$  y  $H_x$  es en forma matricial como

$$\begin{bmatrix} E_y \\ H_x \end{bmatrix}_1 = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ Z_1^{-1} & -Z_1^{-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E_+ \\ E_- \end{bmatrix}_1. \quad (23)$$

En la interfaz  $z_2$ , se tiene algo similar,

$$\begin{bmatrix} E_y \\ H_x \end{bmatrix}_2 = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ Z_1^{-1} & -Z_1^{-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E_+ \\ E_- \end{bmatrix}_2. \quad (24)$$

Entre las dos interfaces hay una diferencia de fase dada por

$$\begin{bmatrix} E_+ \\ E_- \end{bmatrix}_2 = \begin{bmatrix} e^{i\beta} & 0 \\ 0 & e^{-i\beta} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E_+ \\ E_- \end{bmatrix}_1. \quad (25)$$

Con estas expresiones matriciales, se obtiene la relación que hay entre las componentes

$E_y$  y  $H_x$  de la interfaz  $z_1$  y  $z_2$

$$\begin{aligned}
\begin{bmatrix} E_y \\ H_x \end{bmatrix}_2 &= \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ Z_1^{-1} & -Z_1^{-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e^{i\beta} & 0 \\ 0 & e^{-i\beta} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ Z_1^{-1} & -Z_1^{-1} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} E_y \\ H_x \end{bmatrix}_1 \\
&= \begin{bmatrix} \cos \beta & iZ_1 \sin \beta \\ iZ_1^{-1} \sin \beta & \cos \beta \end{bmatrix}_{21} \begin{bmatrix} E_y \\ H_x \end{bmatrix}_1 \\
&= M_{21} \begin{bmatrix} E_y \\ H_x \end{bmatrix}_1,
\end{aligned} \tag{26}$$

donde  $\beta = kd \cos \theta$  es la diferencia de camino óptico,  $d$  es el espesor de la película y  $\theta$  es el ángulo del haz incidente. Generalizando este análisis para la interfaz  $z_L$  y  $z_0$ , la relación entre las componentes del campo electromagnético es

$$\begin{aligned}
\begin{bmatrix} E_y \\ H_x \end{bmatrix}_L &= M_{L(L-1)} \cdots M_{21} M_{10} \begin{bmatrix} E_y \\ H_x \end{bmatrix}_0 \\
&= M_{L0} \begin{bmatrix} E_y \\ H_x \end{bmatrix}_0.
\end{aligned} \tag{27}$$

Ahora, si la estructura es iluminada desde la región 0, el coeficiente de reflexión  $r_s$  y el coeficiente de transmisión  $t_s$  en la región  $S$ , están dados por

$$r_s = \frac{-Z_0 m_{11} - m_{12} + Z_0 Z_s m_{21} + Z_s m_{22}}{Z_0 m_{11} - m_{12} - Z_0 Z_s m_{21} + Z_s m_{22}} \tag{28}$$

y

$$t_s = \frac{2Z_s}{Z_0 m_{11} - m_{12} - Z_0 Z_s m_{21} + Z_s m_{22}}, \tag{29}$$

por lo tanto, la reflectancia  $R_s$  y la transmitancia  $T_s$  son

$$R_s = |r_s|^2 \tag{30}$$

y

$$T_s = \frac{Z_0}{Z_s} |t_s|^2. \tag{31}$$

Por otra parte, si el campo magnético es perpendicular al plano de incidencia (modo TM), la impedancia superficial es  $Z = k/(\varepsilon\omega)$ ; además se cumplen las expresiones:

$$r_p = -r_s \quad (32)$$

y

$$t_p = \frac{Z_0}{Z_s} t_s, \quad (33)$$

por lo que la reflectancia  $R_p$  y la transmitancia  $T_p$  son

$$R_p = |r_p|^2 \quad (34)$$

y

$$T_p = \frac{Z_s}{Z_0} |t_p|^2. \quad (35)$$

Para probar que los cálculos de la reflectancia de un sistema multicapa obtenidos bajo la metodología desarrollada son inestables y poco fiables, consideremos una estructura fotónica (definida como E-I) a base de multicapas de SP que opere en un amplio rango del espectro electromagnético (UV-NIR). Cada bicapa está formada por una capa con  $n_a(\lambda_j)$  y la otra con  $n_b(\lambda_j)$ , que representa un periodo. Cada periodo está sintonizado a una determinada longitud de onda de diseño ( $\lambda_j$ ). Su distribución se modula por la siguiente función

$$\lambda_j = \lambda_{\min} + (\lambda_{\max} - \lambda_{\min}) \left( \frac{j-1}{N_p-1} \right)^\alpha, \quad (36)$$

donde  $\lambda_{\min}$  y  $\lambda_{\max}$  son las longitudes de onda mínima y máxima de diseño,  $j$  es el  $j$ -ésimo periodo,  $N_p$  es el número de periodos y  $\alpha$  es una potencia cualesquiera. En este ejemplo, la longitud de onda de diseño va desde 250 hasta 1400 nm,  $\alpha = 0.25$  y se emplean 222 periodos en los cuales las porosidades de cada bicapa son de  $p_1 = 51\%$  y

$p_2 = 76\%$ . Los espesores de cada capa se calculan a partir de  $d_i = \frac{\lambda_j}{4n_i(\lambda_j)}$ , siendo  $n_i(\lambda_j)$  el índice de refracción efectivo de cada una de las capas. La reflectancia calculada para esta estructura bajo las polarizaciones TE y TM y luz no polarizada se muestra en las figs. 6(a)-(c), respectivamente. Bajo este formalismo no se pueden calcular los espectros de reflectancia para longitudes de onda menores a 370 nm, ya que el SP es altamente disipativo en la región UV.

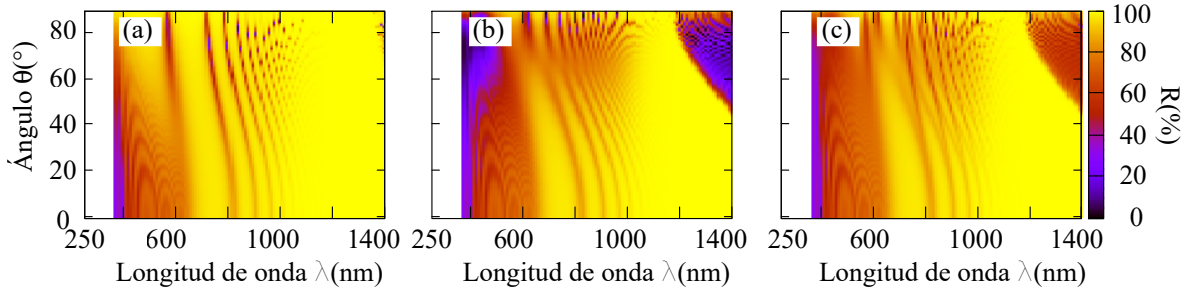


Figura 6. Espectros de reflectancia de una estructura formada por 222 pares de capas, calculada como función de la longitud de onda y del ángulo de incidencia para (a) polarización TE, (b) polarización TM y (c) luz no polarizada. El primer y el último par de capas se sintonizan a 250 y 1400 nm, respectivamente. Las capas tienen una porosidad de 51% y 76%

Para conocer los espectros de reflectancia de sistemas disipativos y dispersivos es necesario replantear el formalismo de la matriz de transferencia.

## II.2.2. Tratamiento con ondas de Bloch

Supongamos que se tiene un sistema multicapa completo (como el mostrado en la fig. 5) y se replica periódicamente para formar un cristal fotónico artificial, entonces el teorema de Bloch se puede usar para describir los modos normales de este cristal. Según el teorema de Bloch, los modos de 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. De modo que, cada onda de Bloch

se puede describir como

$$\begin{pmatrix} E_{\parallel}^{\pm} \\ H_{\parallel}^{\pm} \end{pmatrix}_{z_N} = M \begin{pmatrix} E_{\parallel}^{\pm} \\ H_{\parallel}^{\pm} \end{pmatrix}_{z_0} = e^{\pm iKD} \begin{pmatrix} E_{\parallel}^{\pm} \\ H_{\parallel}^{\pm} \end{pmatrix}_{z_0}, \quad (37)$$

donde  $D = z_N - z_0$  es el periodo, que corresponde al espesor real del sistema multicapa, y  $\pm K$  representa un vector de Bloch 1D correspondiente a una onda que se propaga a lo largo de la dirección  $z$ .

Por otra parte,  $\Lambda_{\pm} = e^{\pm iKD}$  son los valores propios de la matriz de transferencia  $M$ ,  $E_{\parallel}^{\pm}$  y  $H_{\parallel}^{\pm}$  son los vectores propios correspondientes. Se observa que se usa exactamente que el  $\det M = 1$ , de modo que el producto de los valores propios debería ser  $\Lambda_+ \Lambda_- = 1$ , y la relación de dispersión de los modos de Bloch se puede obtener en principio de

$$\cos KD = \frac{1}{2} \text{Tr } M, \quad (38)$$

siendo  $\text{Tr}$  la traza de la matriz de transferencia  $M$  de un periodo de espesor  $D$ .

Imagínese un sistema finito formado por  $P$  periodos (con espesor  $PD$ ) colocado sobre un sustrato. Ahora, en el caso extremo de sólo un periodo  $P = 1$ , las propiedades ópticas de este sistema se pueden obtener considerando una onda entrante del ambiente, una onda reflejada al medio ambiente, una onda transmitida al sustrato y dos ondas Bloch dentro de la estructura, una moviéndose hacia la derecha y la otra propagándose hacia la izquierda, como se muestra en la fig. 7.

En dicho sistema, la continuidad de  $E_{\parallel}$  y  $H_{\parallel}$  producirá dos ecuaciones en cada interfaz, con las que se obtienen las cuatro incógnitas, a saber,  $r$ ,  $t$  y las amplitudes de dos ondas de Bloch. En un sistema finito,  $K$  puede ser complejo. Incluso en presencia de muy poca disipación, las ondas de Bloch deberían decaer a medida que se propagan. Así, el eigenvalor del modo ascendente  $\Lambda_+ = e^{iKD}$  se identifica como el que obedece a  $|\Lambda_+| < 1$ ,  $\text{Im}K > 0$  y si es necesario, se puede agregar una cantidad insignificante de disipación para evitar los casos  $|\Lambda_+| = 1$ .

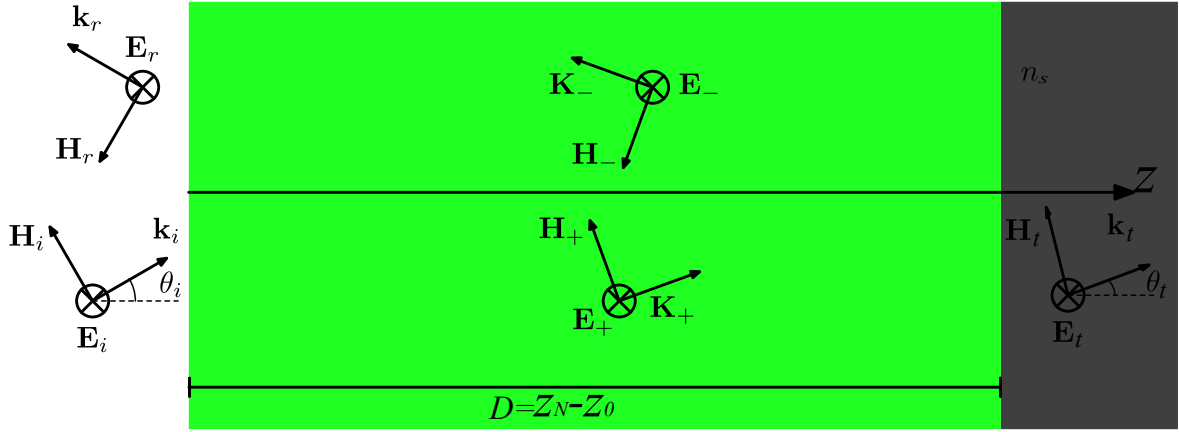


Figura 7. El sistema multicapa mostrado en la figura anterior puede ser reemplazado por una amplia capa efectiva dentro de la cual los campos eléctrico  $\mathbf{E}_\beta$  y magnético  $\mathbf{H}_\beta$ , y una onda de Bloch  $\mathbf{K}_\beta$  se propagan en la dirección positiva y otro conjunto se propaga en la dirección opuesta a lo largo de la eje  $z$ .

De los eigenvalores  $\Lambda_\pm$  de  $M$ , se pueden obtener los eigenvectores correspondientes  $E_\parallel^\pm$  y  $H_\parallel^\pm$  de la ec. (37), y de ellos, las correspondientes impedancias de superficies

$$Z^\pm = -\frac{M_{12}}{M_{11} - \Lambda_\pm}, \quad (39)$$

donde  $M_{ij}$  con  $i = 1, 2$  y  $j = 1, 2$  denota a los elementos de  $M$ . Al escribir los campos en  $z_0$  y  $z_N$  como una superposición de los campos de propagación ascendente y descendente,  $E_\parallel^\pm = Z^\pm H_\parallel^\pm$ , se pueden relacionar los campos en  $z_N$  con los campos en  $z_0$  a través de una matriz de transferencia *reconstruida*  $\tilde{M}$ ,

$$\begin{pmatrix} E_\parallel \\ H_\parallel \end{pmatrix}_{z_N} = \tilde{M} \begin{pmatrix} E_\parallel \\ H_\parallel \end{pmatrix}_{z_0}, \quad (40)$$

donde

$$\tilde{M} = \frac{1}{Z^+ - Z^-} \begin{pmatrix} Z^+ e^{iKD} - Z^- e^{-iKD} & -2iZ^+ Z^- \sin KD \\ 2i \sin KD & Z^+ e^{-iKD} - Z^- e^{iKD} \end{pmatrix}. \quad (41)$$

Finalmente, las expresiones explícitas para los coeficientes ópticos son:

$$r = \mp \frac{Z_0 \tilde{M}_{11} + \tilde{M}_{12} - Z_0 Z_s \tilde{M}_{21} - Z_s \tilde{M}_{22}}{Z_0 \tilde{M}_{11} - \tilde{M}_{12} - Z_0 Z_s \tilde{M}_{21} + Z_s \tilde{M}_{22}}, \quad (42)$$

y

$$t = \frac{2Z_\alpha}{Z_0\tilde{M}_{11} - \tilde{M}_{12} - Z_0Z_s\tilde{M}_{21} + Z_s\tilde{M}_{22}}, \quad (43)$$

donde el signo superior  $-$  en la ec. (42) y el subíndice  $\alpha = s$  de la ec. (43) han sido elegidas para la polarización TE, mientras el signo inferior  $+$  y el subíndice  $\alpha = 0$  corresponden a la polarización TM. Como es habitual, la reflectancia está dada por  $R = |r|^2$  y la transmitancia por  $T = \beta |t|^2$  con  $\beta = Z_0/Z_s$  para el caso de polarización TE y  $\beta = Z_s/Z_0$  para el caso de la polarización TM.

La reflectancia calculada con el nuevo formalismo para la estructura E-I bajo las polarizaciones TE y TM y luz no polarizada se muestran en las figs. 8(a)-(c), respectivamente. En estos resultados no hubo algún inconveniente para obtener los espectros de reflectancia para longitudes de onda tan bajas como 250 nm e incluso menores, ya que convergen sin problema. Por lo tanto, la expansión de Bloch nos proporciona estabilidad numérica, confiabilidad y eficiencia computacional.

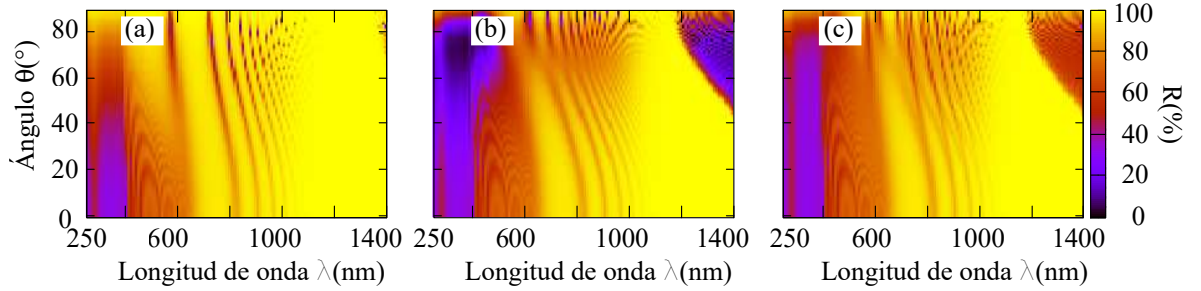


Figura 8. Espectros de reflectancia de la estructura E-I, calculada como función de la longitud de onda y del ángulo de incidencia (empleando los modos de Bloch) para (a) polarización TE, (b) polarización TM y (c) luz no polarizada.

## Capítulo III

---

# SÍNTESIS DE ESTRUCTURAS FOTÓNICAS DE SP

---

### III.1. El silicio poroso

En esta sección se mencionan algunos aspectos históricos del SP. Además, se describe, brevemente, el proceso de formación del SP, propuesto por Lehman y Gosele (Lehmann and Gósele, 1991). También, se incluyen algunas de sus aplicaciones.

#### III.1.1. Formación del silicio poroso

El SP fue descubierto en 1955 por los Uhlirs, un matrimonio que trabajaba en los Laboratorios Bell. Ellos trataban de desarrollar un método electroquímico de fabricación de obleas de silicio para usarlas en circuitos microelectrónicos. En la década de los 80's se retomó la investigación en el SP, ya que su área superficial podría ser utilizada en modelos de espectroscopía, como precursor para generar películas delgadas de óxido sobre el silicio y como películas dieléctricas en sensores químicos basados en capacitancia (Anderson *et al.*, 1989). En la década de los 90's se incrementó la importancia del SP, debido a que Canham obtuvo fotoluminiscencia en el visible (Canham, 1990). El SP

es un material formado por silicio y huecos llenos de aire. La estructura consta de una red interconectada de silicio cristalino, que forma un esqueleto poroso. Los diámetros de cada poro pueden variar de tamaño y distribución espacial, siendo designados por la IUPAQ<sup>1</sup> como: *microporos* (cuando el ancho del poro es menor que 2 nm), *mesoporos* (el ancho del poro es mayor que 2 nm y menor que 50 nm) y *macroporos* (el ancho del poro es mayor a 50 nm).

Asimismo, se han propuesto muchas teorías sobre los mecanismos para su formación, siendo la más aceptada la propuesta por Lehman y Gosele (Lehmann and Gósele, 1991). El mecanismo de reacción que se da en la fabricación de silicio poroso se muestra en la fig. 9. Esta reacción consiste en la remoción de átomos de silicio por agentes nucleofílicos

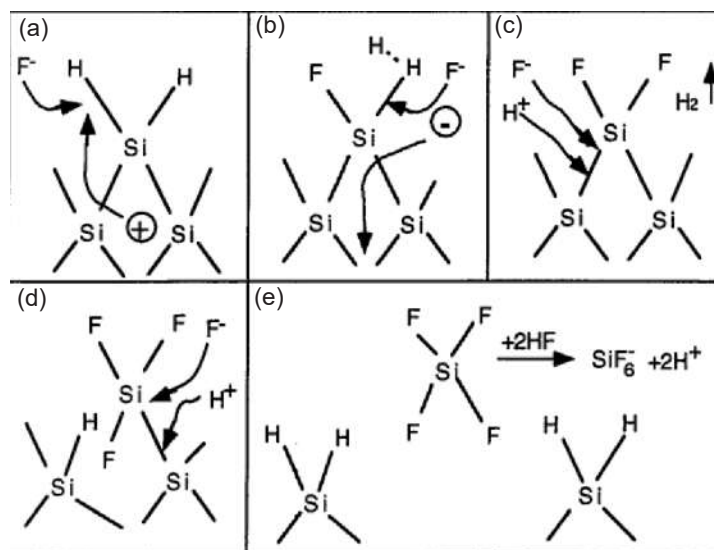
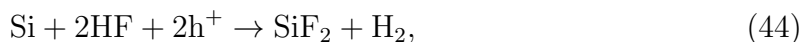


Figura 9. Mecanismo simplificado del ataque electroquímico del silicio en un electrolito que contiene HF.

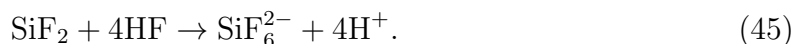
$F^-$ . El proceso comienza con un flujo de huecos ( $h^+$ ) hacia la superficie del silicio, promovidos por una corriente electrónica en dirección inversa (de la superficie hacia a la base del silicio). Enseguida, un ion de flúor ataca el silicio desplazando un enlace con alguno de los hidrógenos (fig. 9(a)). Posteriormente, el hidrógeno es desplazado

<sup>1</sup>Por sus siglas en inglés, International Union of Pure and Applied Chemistry.

formando un puente con algún hidrógeno adyacente, mientras que el flúor forma un enlace covalente con el silicio (fig. 9(b)). 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  $H_2$  (fig. 9(c)). 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 (fig. 9(d)). 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 de 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 (fig. 9(e)). De esta manera se van removiendo los átomos de silicio para dar lugar a la formación de los poros en la estructura. Esto se puede resumir a través de la reacción electroquímica



donde  $h^+$  es el portador de carga (hueco) y la reacción química



El proceso para controlar la formación del poro en el silicio poroso es una mezcla complicada de factores químicos y electrónicos, los cuales se discuten a detalle en (Bomchil *et al.*, 1990). La composición del electrolito, el tipo del dopante (fosforo para el tipo  $n$  y boro para el tipo  $p$ ) y su concentración, el voltaje aplicado, la temperatura y la intensidad de la luz pueden jugar un rol importante en el experimento. A continuación se dan algunas características: (*i*) los poros se nuclean uniformemente y no siguen algún orden en la superficie del silicio, (*ii*) la corriente fluye preferencialmente cerca del fondo

del poro, (*iii*) la pared del poro se considera pasiva, (*iv*) una vez formado, el poro no se puede redistribuir o reconstruir, y (*v*) todas las muestras contienen una distribución del diámetro del poro en lugar de un tamaño de poro único.

### III.1.2. Formación de capas de SP

Se han utilizado varios métodos para fabricar multicapas (MC) de SP, por ejemplo, densidad de corriente constante en una oblea de Si dopada (Frohnhoff and Berger, 1994), variación de la densidad de iluminación en una oblea de Si de tipo  $n$  dopada uniformemente (Frohnhoff *et al.*, 1995), o bien la técnica de deposición de ángulo de mirada (Robbie *et al.*, 2004), entre otras. La variación de la densidad de corriente en un grabado electroquímico de una oblea de silicio dopada uniformemente es el método más utilizado, basado en el hecho de que el proceso de grabado es autolimitante (Smith and Collins, 1992) y ocurre principalmente en las puntas de los poros, es decir, en la interface entre el electrolito y el sustrato de silicio, sin afectar la capa porosa ya formada. Por lo tanto, la multicapa de SP se forma controlando la densidad de corriente a lo largo de la profundidad del sustrato de Si. Los poros se forman y sus paredes se erosionan hasta que se vacían de agujeros. Esto pasiva el SP ya formado de un ataque adicional, y la reacción prosigue en la punta del poro, manteniendo todo el esqueleto de Si grabado. Para obtener las multicapas de propiedades ópticas requeridas, se necesita la variación exacta de la velocidad de grabado y la porosidad (o índices de refracción) en función de la densidad de corriente.

Aparte de eso, se pueden hacer otras observaciones:

- i. Las obleas de Si tipo  $p$  de alta resistividad ( $>0.01 \Omega \cdot \text{cm}$ ) conducen a una estructura MC con dimensiones de poro más pequeñas y una variación relativamente menor de porosidad (Mulloni *et al.*, 1999) entre 55% y 75% en comparación con las

altamente dopadas oblea de silicio que da como resultado la formación de una estructura de dimensión de poro más grande y porosidades que oscilan entre 35% y 85%, es decir, un aumento en la concentración de dopaje aumenta el rango de la porosidad efectiva (Frohnhoff *et al.*, 1995).

- ii. Son posibles grandes variaciones en los índices de refracción variando la densidad de corriente o la concentración de electrolito. Se requiere un nivel óptimo de concentración de HF para obtener el rango máximo del posible contraste del índice de refracción (Pavesi, 1997).
- iii. Se ha informado que el estrés inducido por un contraste de alto índice de refracción causa la ruptura de la estructura (Pavesi and Turan, 2010). Las tensiones son a menudo tensiones capilares provocadas por la evaporación del electrolito.
- iv. La velocidad de grabado es casi una función lineal de la densidad de corriente para el sustrato tipo  $p$  (Mulloni *et al.*, 1999) pero no lineal para el tipo  $n$  (Loni, 2014).
- v. Como la velocidad de grabado depende de la concentración de HF, para diseñar un dispositivo óptico con capas delgadas de silicio poroso, se recomiendan concentraciones bajas de HF debido a la baja velocidad de grabado.
- vi. Dependiendo de la aplicación requerida, la elección adecuada del sustrato (tipo y resistividad) y las condiciones de fabricación pueden resultar en MC micro, meso o macroporosa.

### III.1.3. Aplicaciones del silicio poroso

Una de las aplicaciones del SP son los espejos dieléctricos. Un espejo ampliamente estudiado es el espejo tipo Bragg (EB), en el cual el índice de refracción de la estructura

varía periódicamente (con un índice de refracción alto,  $n_a$ , y el otro bajo,  $n_b$ ) y el espesor óptico de cada película (a incidencia normal) es de un cuarto de onda a una longitud de onda de diseño ( $\lambda_0$ ); esto es  $n_a d_a = n_b d_b = \lambda_0/4$ . Una de las características de un EB es ser altamente reflejante para la longitud de onda de diseño. En un EB, a medida de que el número de periodos se incrementa, la reflectancia se aproxima al 100%; además cuando la razón de  $n_a/n_b$  es grande, la banda fotónica se incrementa. Si el EB refleja toda la intensidad sin importar el ángulo de incidencia del haz, se dice que el EB es omnidireccional (Ariza-Flores *et al.*, 2012). Adicionalmente a este tipo de estructuras, se pueden diseñar espejos omnidireccionales en los cuales los índices de refracción de la celda unitaria varíen siguiendo algún patrón; por ejemplo, un perfil sinusoidal o Gaussiano (Estevez *et al.*, 2009).

Las características que hacen al SP un material inestable químicamente (alta superficie específica y gran reactividad química) resultan las más atractivas para su empleo como sensor químico o biológico (Balderas-Valadez and Agarwal, 2014; Karthik *et al.*, 2018). Otra aplicación importante del SP es su utilización como dispositivos emisores de luz, debido a la luminiscencia que presenta el material en un amplio rango del espectro. La eficiencia de un diodo de SP es mayor que la del Si masivo, dependiendo de la estructura del diodo y del método de contacto del SP (Antunez *et al.*, 2014).

Existen otros campos de desarrollo tecnológico que utilizan al SP como guías de onda, filtros Fabry- Perot, interruptores ópticos, cubrimientos antirreflectantes (Ariza-Flores *et al.*, 2014), celdas solares, microcapacitores, capas aislantes (eléctrica y térmica), por mencionar algunos (Canham, 1997).

## III.2. Metodología óptima para la síntesis de estructuras de SP

La síntesis de películas de SP es una técnica simple y económica basada en la anodización electroquímica de obleas de Si cristalino en una solución de HF. Una característica principal de la oblea de Si es que la oblea debe estar polarizada anódicamente (Si tipo  $p$ ) ya que los huecos son consumidos durante el proceso electroquímico. Para asegurar que los experimentos sean reproducibles, se debe contar con una metodología apropiada. En el caso de la obtención de estructuras fotónicas a base de SP es necesario conocer la porosidad y velocidad de ataque en función de la densidad de corriente suministrada.

### III.2.1. Caracterización de la resistividad

Las obleas comerciales suelen ser de diferente resistividad dependiendo de la cantidad del dopante suministrado durante su elaboración. En el laboratorio se trabaja con obleas que tienen una resistividad de 0.001 a 0.005  $\Omega\cdot\text{cm}$ . La oblea comercial será seccionada en rectángulos de  $2\times 1.9\text{ cm}^2$  para obtener 16 obleas útiles. Entonces, es conveniente hacer una máscara para medir la resistividad y que los puntos de medición concidan con las líneas por donde pasará el corte. Esto se muestra en la fig. 10.

La resistividad se mapea a través de una prueba de resistividad de cuatro puntos. Aquí se emplea un dispositivo de cuatro puntas operado por computadora, en el que se pasa una corriente constante entre las dos puntas externas, mientras que el voltaje se mide simultáneamente entre las dos puntas internas. La resistividad se determina a partir de los valores medidos de caída de voltaje ( $V$ ) y corriente ( $I$ ). La resistencia de la oblea ( $R_s$ ) se calcula a partir de la relación de corriente y voltaje, multiplicada por un

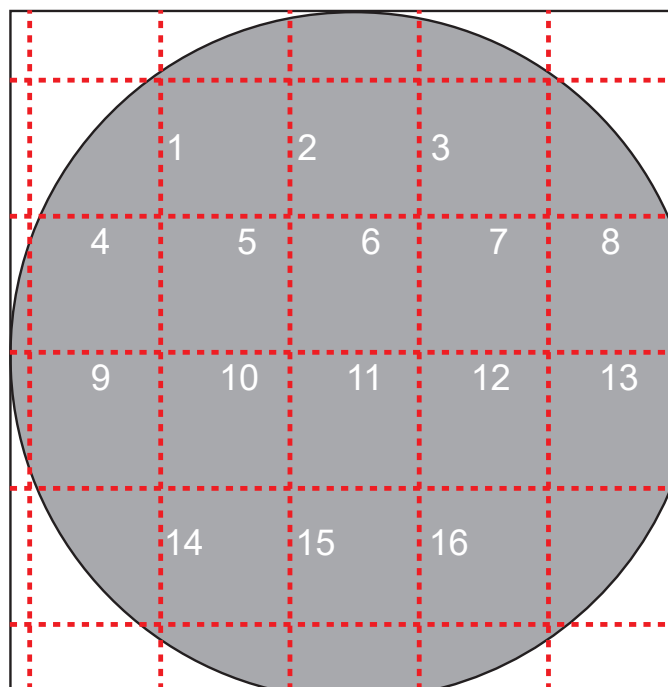


Figura 10. Máscara que indica los puntos para medir la resistividad de la oblea. Las líneas punteadas indican por donde pasarán los cortes de la oblea.

factor de corrección ( $F_c$ ) relacionado con la geometría de la muestra, es decir  $R_s = \frac{V}{I} F_c$ .

La resistencia de la oblea y la resistividad ( $\rho$ ) están relacionadas por  $\rho = R_s W$ , siendo  $W$  el espesor de la oblea.

### III.2.2. Síntesis de capas de SP

El proceso de la síntesis del SP se puede resumir en tres etapas: preparación de la oblea, anodización electroquímica y enjuague y secado de la muestra.

#### Preparación de la muestra

Dependiendo del número de estructuras que se van a sintetizar será la cantidad de obleas que se someterán a la remoción de óxido nativo, para lo cual se necesita:

- i. Preparar una solución de HF al 2%. En el laboratorio se cuenta con HF al 48%.

Para obtener 400 ml de HF (2%) se ocupan 383.4 ml de agua desionizada y 16.6 ml de HF (48%).

- ii. Verter 20 ml de la solución preparada en un contenedor de plástico y colocar las obleas con la superficie pulida hacia arriba durante 10 minutos.
- iii. Enjuagar las obleas con etanol al 96% y secar con gas de nitrógeno.
- iv. Repetir los dos pasos anteriores con la superficie pulida hacia abajo.

El objetivo de estas actividades, además de remover el óxido, es que los átomos de Si que se encuentran en la superficie tengan enlaces Si-H.

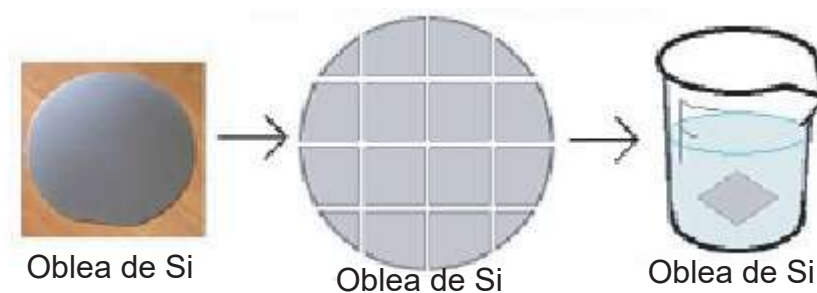


Figura 11. Ejemplo de la preparación de la oblea. En esta etapa se secciona la oblea comercial y se le remueve el óxido nativo.

### Anodización electroquímica

En esta etapa se sintetizan las capas de SP. Para lo cual se realizan las siguientes actividades:

- i. Armado de la celda electroquímica.
- ii. Preparación del electrólito. En nuestro caso empleamos 6 ml de HF al 48% y 6 ml de etanol al 99%.
- iii. Programación del software que controla la fuente de corriente y ejecución del mismo.

iv. Durante la reacción electroquímica, es importante eliminar las burbujas generadas mediante pipeteo por goteo.

En la fig. 12(a) y 12(b) se muestra un esquema simplificado y la vista real de la celda electroquímica empleada durante la anodización electroquímica, respectivamente.

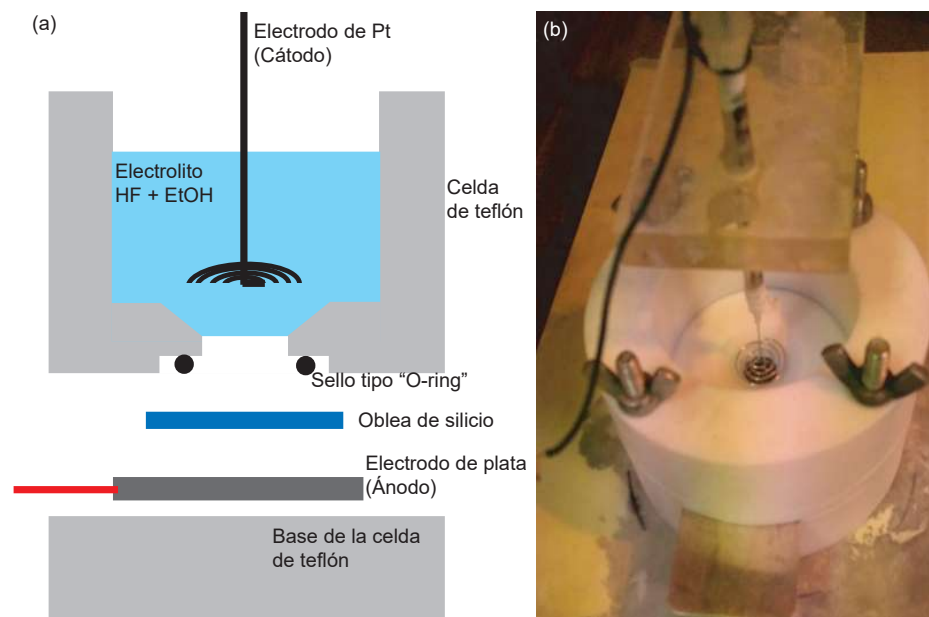


Figura 12. (a) Esquema simplificado y (b) vista real de la celda electroquímica empleada.

### Enjuague y secado de la muestra

Al finalizar el ataque electroquímico se llevan a cabo las siguientes acciones:

- i. Retirar la mayor parte del electrolito y enjuagar la estructura dentro de la celda electroquímica tres veces con etanol. La primera con etanol al 99% y las restantes con etanol al 96%.
- ii. Desarmar la celda electroquímica y secar la oblea con un ligero flujo de gas nitrógeno (el secado en pentano es opcional).

### III.2.3. Medición de la reflectancia de la estructura sintetizada

En el mercado existe una gran variedad de dispositivos capaces de medir la reflectancia, cuyas características dependen de las necesidades del usuario. En el laboratorio se cuenta con el espectrofotómetro Lambda 950 y su accesorio universal para medir reflectancia (URA<sup>2</sup>) que opera desde 190 nm hasta 3300 nm y una variación angular de 8° hasta 65°. La programación y operación de este equipo es relativamente sencilla. Al ejecutar el software del espectrofotómetro (UV WinLab) se abre un cuadro de diálogo con una lista de carpetas que contienen una serie de opciones. Las carpetas que nos interesan son:

- i. Data collection. En esta carpeta se le indica la región del espectro electromagnético donde se llevará a cabo la medición de la reflectancia y el incremento de cada paso.
- ii. Universal Reflectance Accesory. En esta carpeta se selecciona el modo de medición (reflectancia relativa), el ángulo de incidencia y el tipo de ajuste (línea base), el tamaño del spot (ajuste físico de 5 mm × 5 mm) y se aplican las opciones.
- iii. Corrections. Aquí se dan las opciones para realizar las correcciones necesarias a las mediciones obtenidas, como son la frecuencia (al inicio de cada tarea), la línea base (autocero) y ajuste de la reflectancia (ninguna).
- iv. Sample info. Presenta la información de las muestras a medir y la reflectancia se grafica en tiempo real.

Obtener el espesor físico ( $d$ ) de la monocapa a través de una micrografía obtenida por SEM. Con este parámetro y el tiempo de síntesis, se obtiene la velocidad de

---

<sup>2</sup>Por sus siglas en inglés, Universal Reflectance Accesory.

ataque.

A partir del patrón de interferencia del espectro de reflectancia de la monocapa porosa se puede evaluar el espesor óptico  $\Lambda = n_{SP}d$ , siendo  $n_{SP}$  el índice de refracción de la capa porosa. La posición de los máximos de interferencia están dadas por la relación

$$n_{SP} d = \frac{\lambda_{m+1}\lambda_m}{2(\lambda_{m+1} - \lambda_m)}, \quad (46)$$

donde  $\lambda_m$  es la longitud de onda del  $m$ -ésimo máximo de reflexión. Si se conoce el espesor  $d$  de la monocapa por algún método independiente, entonces  $n_{SP}$  está dado por la relación del espesor óptico dividido por  $d$ . La ec. (46) es válida para materiales cuyos índices de refracción presentan una variación muy pequeña con la longitud de onda, con muy poca absorción, o en el caso de capas muy gruesas, cuyos espectros presentan extremos separados por pequeños intervalos de longitud de onda (Poelman and Smet, 2003). Cuando la capa es muy fina o el material tiene una gran dispersión, el patrón de interferencia presenta pocos extremos. En estos casos se utilizan otros métodos para evaluar el índice de refracción.

### III.2.4. Obtención de la porosidad

La porosidad de la monocapa correspondiente a la densidad de corriente de interés se obtiene a través de la técnica de gravimetría. Para ello, la oblea de silicio utilizada para la síntesis de la monocapa de SP es pesada en tres etapas: antes ( $m_1$ ) y después ( $m_2$ ) del ataque electroquímico, seguido de pesar la oblea de silicio después de disolver la película de SP ya formada ( $m_3$ ) para calcular la porosidad con

$$p = \frac{m_1 - m_2}{m_1 - m_3}. \quad (47)$$

Otra forma de estimar  $n_{SP}$ , es emplear alguna teoría de medio efectivo, tales como Maxwell-Garnet, Bruggeman o Looyenga-Landau-Lifshitz (Aspnes *et al.*, 1979). En nuestro caso, la expresión

$$p \frac{n_{fm}^2 - n_{SP}^2}{n_{fm}^2 + 2n_{SP}^2} + (1 - p) \frac{n_{si}^2 - n_{SP}^2}{n_{si}^2 + 2n_{SP}^2} = 0, \quad (48)$$

que corresponde a la teoría de Bruggeman. Aquí  $n_{si}$  y  $n_{SP}^2$  son el índice de refracción del silicio cristalino y del medio que llena los poros, respectivamente, y  $p$  es la porosidad de la capa de SP. En el capítulo anterior se justificó el uso de esta teoría y se desarrolló la misma.

Para que la síntesis de las capas de SP sea reproducible, es indispensable contar con las curvas de calibración para la porosidad y velocidad de ataque en función de la densidad de corriente, por lo cual es necesario repetir los pasos 3-6 para las densidades de corriente de interés.

En el laboratorio se cuenta con un lote de obleas de silicio cristalino cuyo mapeo de resistividad promedio fue de  $1.4 \pm 0.15 \text{ m}\Omega \cdot \text{cm}$ . La tabla I contiene los parámetros obtenidos de diversas muestras en las que se utilizaron densidades de corrientes ( $j$ ) y tiempos de exposición ( $t$ ) diferentes. Aquí se empleó un electrolito compuesto por HF (concentración de 48%) y etanol (99% de pureza) en proporción volumétrica de 1:1.

Y en la fig. 13 se presentan las curvas de ajuste para la velocidad de ataque y porosidad en función de la densidad de corriente empleada para la síntesis de las películas de SP. La función que modula a la velocidad de ataque es  $v(j) = (Aj)^{3/4}$ , siendo  $A = 1.6 \left(\frac{\text{nm}}{\text{s}}\right)^{4/3} \frac{\text{cm}^2}{\text{mA}}$  y  $j$  la densidad de corriente (en  $\frac{\text{mA}}{\text{cm}^2}$ ). Para la porosidad es  $p(j) = B + (Cj)^{1/3}$ , siendo  $B = \frac{1}{3}$  y  $C = 0.00022 \frac{\text{cm}^2}{\text{mA}}$ . Además, estas curvas de ajuste se comparan con las obtenidas por (Theiß, 1997) y (Ariza-Flores *et al.*, 2012), respectivamente. Se observa que los perfiles de las curvas son similares.

Tabla I. Parámetros obtenidos en la síntesis de diferentes monocapas de SP.

| Muestra | $j$<br>(mA/cm <sup>2</sup> ) | $t$<br>(s) | Espesor<br>(nm) | Vel. Ataque<br>(nm/s) | Porosidad<br>(%) |
|---------|------------------------------|------------|-----------------|-----------------------|------------------|
| 1       | 0.5                          | 7200       | 2060±15         | 0.28±0.01             | 34.20            |
| 2       | 1.0                          | 5400       | 3142±10         | 0.58±0.02             | 37.40            |
| 3       | 2.0                          | 2978       | 3325±20         | 1.11±0.05             | 42.05            |
| 4       | 10.0                         | 299        | 1948±18         | 6.51±0.13             | 47.60            |
| 5       | 30.0                         | 120        | 1979±15         | 16.49±0.05            | 49.85            |
| 6       | 40.0                         | 75         | 1953±20         | 26.04±0.23            | 52.35            |
| 7       | 85.0                         | 6          | 274±25          | 45.75±0.23            | —                |
|         | 156.0                        | 4          | 245±25          | 61.29±0.58            | —                |
|         | 200.0                        | 3          | 224±25          | 74.76±1.56            | —                |
|         | 305.0                        | 2          | 201±25          | 100.75±3.21           | 76.50            |

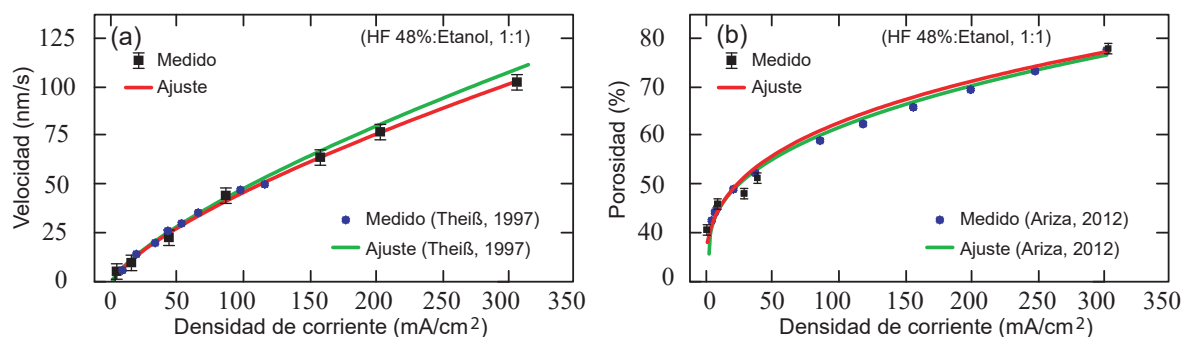


Figura 13. Curvas de ajuste de la (a) velocidad de formación y (b) porosidad de las capas de SP para obleas de Si con una resistividad de 1.4 m $\Omega$ ·cm y utilizando un electrolito de HF (48%) y etanol en proporción volumétrica de 1:1. Estas curvas son comparadas con las obtenidas por (Theiß, W. 1997) y (Ariza-Flores *et al.* 2012), respectivamente.

### III.3. Resultados

En esta sección se muestran diversas estructuras de SP, las cuales se pueden agrupar en tres bloques: (i) estructuras monocapa, (ii) espejos de Bragg y (iii) estructuras

multicapa tipo chirped.

### III.3.1. Estructuras monocapa

Para validar las curvas de ajuste, se sintetizaron dos estructuras monocapa. La primera estructura se sintetizó con una densidad de corriente de  $10 \text{ mA/cm}^2$  durante 305 segundos. En la fig. 14(a) se grafica el espectro de reflectancia calculado y medido desde 400 hasta 2500 nm. Estos espectros se obtuvieron utilizando luz no polarizada y el haz incidió a  $8^\circ$  respecto a la normal de la superficie. En la fig. 14(b) se muestra la micrografía de la estructura sintetizada. La otra estructura se sintetizó con  $j = 30 \text{ mA/cm}^2$

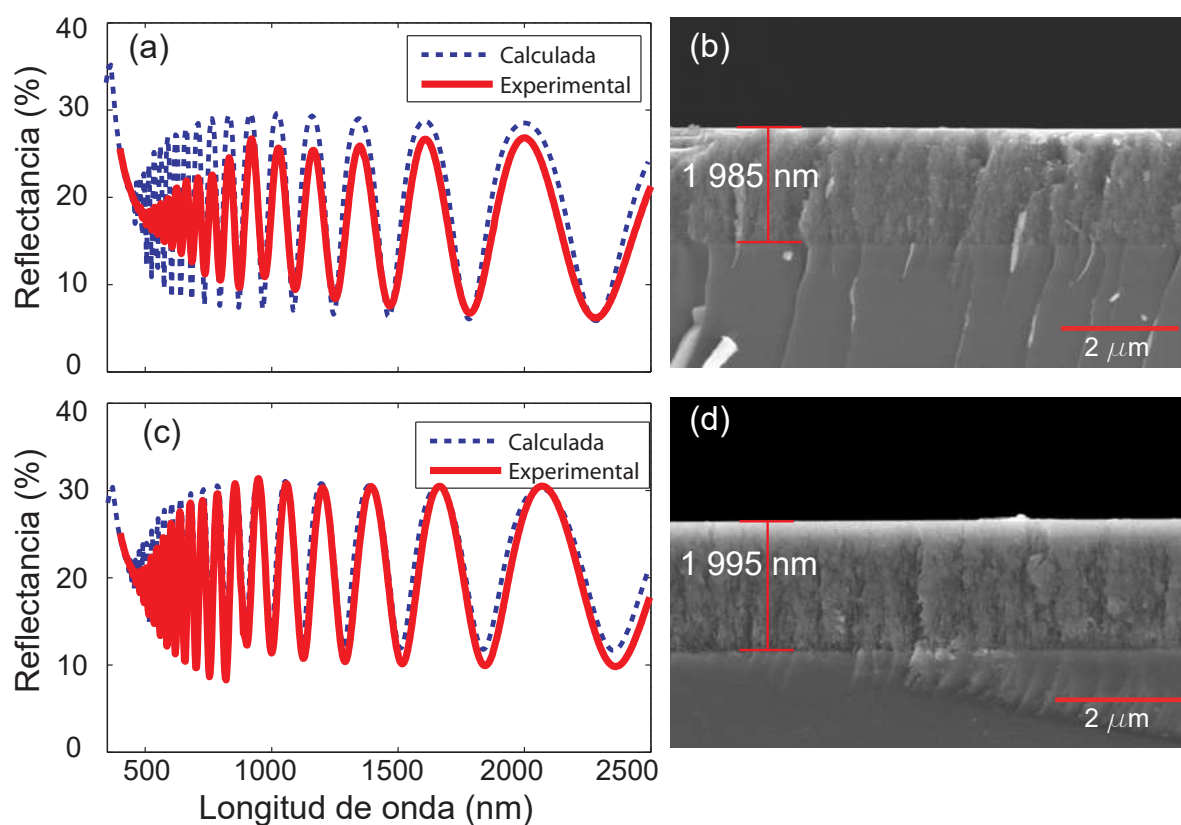


Figura 14. Reflectancia calculada y medida para las monocapas sintetizadas con (a) 10 y (c)  $30 \text{ mA/cm}^2$ . La reflectancia se obtuvo a  $8^\circ$  de incidencia y se empleó luz no polarizada. Micrografías de las monocapas sintetizadas con (b) 10 y (d)  $30 \text{ mA/cm}^2$ , durante 300 y 120 s, respectivamente.

durante 120 s. El espectro de reflectancia calculado y medido, en el mismo rango, se muestran en la fig. 14(c), mientras que la micrografía de la estructura se presenta en la fig. 14(d). En estas gráficas se observa que el número de oscilaciones de la reflectancia coincide; sin embargo, para la primer película su amplitud es menor en la región visible. Con los resultados obtenidos de estas dos estructuras se puede decir que las curvas de ajuste son las adecuadas para la síntesis de capas de SP.

### III.3.2. Espejos multicapas

El objetivo de la síntesis de espejos multicapa tipo Bragg diseñados para una determinada longitud de onda fue corroborar la velocidad de formación y su porosidad de las películas de SP. Para ello, se debe pensar en las características que tendrá el espejo, como son: la longitud de onda central que se quiere reflejar ( $\lambda_0$ ), el número de periodos y el contraste de porosidades. Por ejemplo, considerese un espejo de 30 periodos, centrado en  $\lambda_0 = 650$  nm y que las porosidades de las capas sean de 51% y 76%. De acuerdo a las curvas de ajuste, la densidad de corriente para estas porosidades son de 35.37 y 304.9 mA/cm<sup>2</sup> y las velocidades de ataque son 20.6 y 103.6 nm/s, respectivamente. Este espejo se sintetizó y el tiempo de síntesis de cada capa fue de 3.03 s y 1.01 s, respectivamente.

Posteriormente, se midió la reflectancia de la estructura fotónica obteniéndose un espectro centrado en una longitud de onda menor. Si consideramos que la porosidad es constante, el espesor de cada película es menor y, por consecuencia, la velocidad de ataque, también. Entonces, los parámetros se ajustaron numéricamente de tal forma que las reflectancias fueron semejantes (ver fig. 15(a)). Después de analizar los espesores de las capas (ver fig. 15(b)), se obtuvieron las velocidades de ataque de 19.35 y 98.07 nm/s para las densidades de corrientes utilizadas. Claramente, estos valores son

menores a los obtenidos con las curvas de ajuste. La diferencia se puede atribuir a una variación de la resistividad de la oblea empleada.

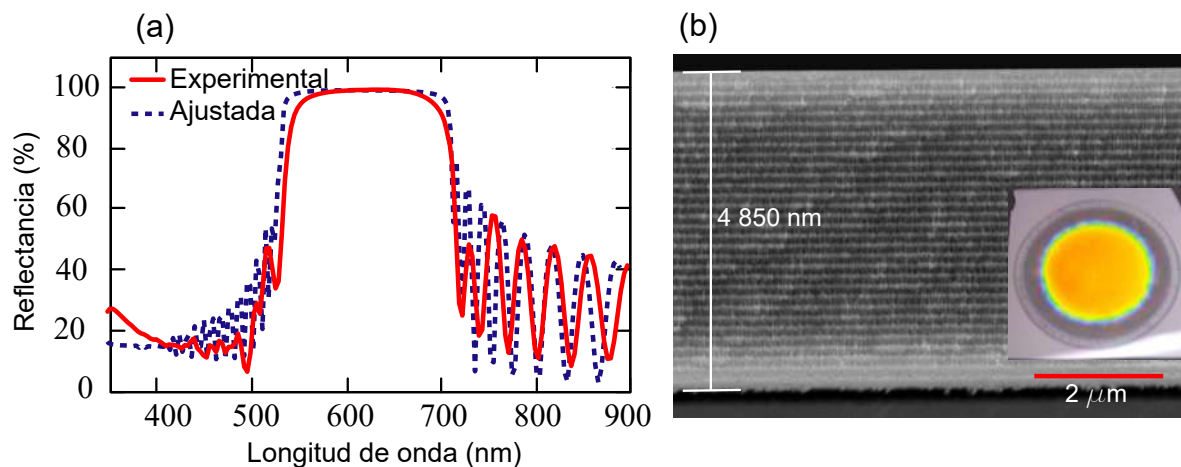


Figura 15. (a) Reflectancia calculada y medida de un espejo de Bragg sintonizado a  $\lambda_0 = 610$  nm. La reflectancia se obtuvo a  $8^\circ$  con luz polarizada. (d) Micrografía del espejo de Bragg con 30 periodos.

### III.3.3. Heteroestructuras multicapas

El propósito de sintetizar heteroestructuras de SP es obtener una estructura dieléctrica que sea capaz de reflejar en una amplia región del espectro electromagnético. Otra de las características deseable de estos espejos es que cumplan la condición de Bragg (el espesor de cada una de las películas debe ser de  $\lambda/4$ ). Existen diversas formas de diseñar y obtener dichas estructuras. Una de ellas es apilar varios espejos sintonizados a diferentes longitudes de onda. Por ejemplo, en la fig. 16(a) se mapean los espectros de reflectancia calculados para una estructura fotónica formada por 3 espejos. El primer espejo se sintonizó a  $\lambda_0 = 400$  nm y está formado por 20 periodos; el segundo se sintonizó a  $\lambda_0 = 1100$  nm y tiene 10 pares de capas; el tercer espejo se diseñó con 10 periodos y está sintonizado para reflejar en  $\lambda_0 = 1700$  nm. La micrografía de la estructura sintetizada se muestra en la fig. 16(b). El espectro de reflectancia medido

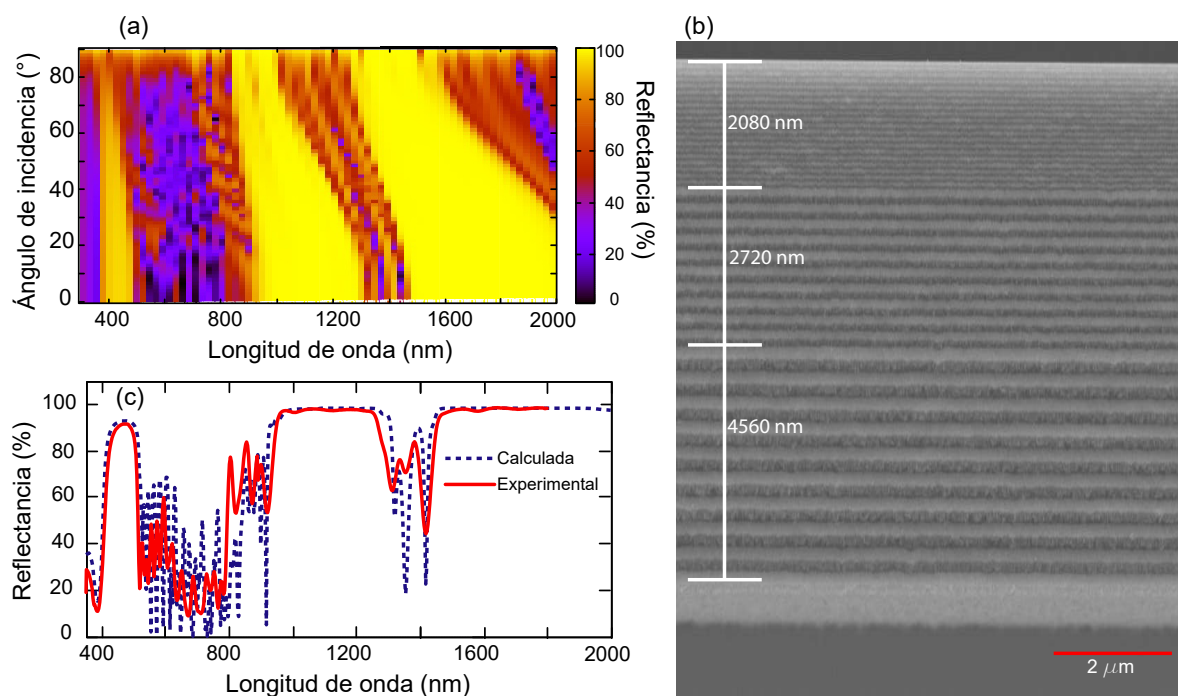


Figura 16. (a) Mapeo de la reflectancia calculada como función de la longitud de onda y del ángulo de incidencia de la estructura. (b) Micrografía de la estructura sintetizada. La estructura fue formada por tres espejos sintonizados a 400, 1100 y 1700 nm, cada uno. (c) Comparación de la reflectancia calculada y medida de la estructura. La reflectancia se obtuvo a  $8^\circ$  con luz no polarizada.

a  $8^\circ$  se muestra en la fig. 16(c). En esta figura se compara con el espectro calculado y se observa que ambos espectros tienen características similares. Con esto, quedan validadas las curvas de ajustes.

Otra forma de obtener heteroestructuras, es en la cual el cambio en la longitud de onda de diseño se modula por alguna función. En los capítulos siguientes se describen a detalle estas técnicas de diseño.

## Capítulo IV

---

# OPTIMIZACIÓN DE ESTRUCTURAS FOTÓNICAS A BASE DE SP

---

En este capítulo se desarrollan dos técnicas para diseñar estructuras fotónicas multicapa altamente reflectivas (omnidireccionales). En la primera, la distribución de los periodos de la estructura se modula mediante una función creciente. La función puede ser tan simple o complejo como se desee. La reflectancia de la estructura diseñada se maximiza con el módulo Minuit de PDL<sup>1</sup> (James, 1994). La otra técnica para proponer estructuras omnidireccionales en una amplia región del espectro electromagnético consiste en apilar espejos sintonizados a diferentes longitudes de onda. Para cada subespejo se calcula su gap fotónico. Con la ayuda de Minuit, se obtiene el traslape óptimo de dos gaps consecutivos que maximiza la reflectancia de la estructura.

### IV.1. Estructuras fotónicas tipo chirped

En esta sección, se estudian estructuras multicapa donde los espesores de cada par de capas están sintonizados a una longitud de onda  $\lambda_j$  que cambia gradualmente con la

---

<sup>1</sup>Por sus siglas en inglés, Perl Data Language.

profundidad de la capa. La distribución de cada par de capas se modula por la expresión

$$\lambda_j = \lambda_{\min} + (\lambda_{\max} - \lambda_{\min}) f\left(\frac{j-1}{N_p-1}\right), \quad (49)$$

donde  $\lambda_{\min}$  y  $\lambda_{\max}$  son las longitudes de onda de diseño mínima y máxima, respectivamente,  $N_p$  es el número de períodos en la estructura y  $f(\xi)$  es una función suave que va de 0 a 1, desde la superficie ( $\xi = 0$ ) al substrato ( $\xi = 1$ ). Sólo consideramos funciones crecientes  $f(\xi)$  debido a la alta absorción de SP en la región ultravioleta que disminuye en el visible y se vuelve insignificante en el infrarrojo cercano, por lo que los primeros períodos se sintonizan en las regiones UV-Vis. Considerese las siguientes clases de funciones:

$$f_1(\xi) = \xi^\alpha, \quad (50)$$

$$f_2(\xi) = \frac{1}{2}(\xi^\alpha + \xi^\beta) \quad (51)$$

y

$$f_3(\xi) = Ax^\alpha(1-\xi) + \xi^\beta, \quad (52)$$

donde  $\alpha$ ,  $\beta$ , y  $A$  son parámetros a optimizar para maximizar la reflectancia promedio. La función  $f_1$  (ec. (50)) representa perfiles crecientes simples, restringiendo  $\alpha > 0$ . La función  $f_2$  es un promedio aritmético de dos funciones del tipo  $f_1$  con diferentes potencias  $\alpha$  y  $\beta$ . La función  $f_3$  (ec. (52)) está diseñada para que el sumando con la potencia  $\alpha$  domine cerca de la superficie y el sumando con la potencia  $\beta$  prevalezca cerca del substrato, para permitir diferentes comportamientos en los bordes del espectro. Los parámetros que se optimizaron para obtener la máxima reflectancia media fueron  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $A$  y  $N_p$ . La reflectancia  $R(\lambda, \theta)$  de las estructuras resultantes se calculó en dos regiones del espectro electromagnético. La región  $\mathfrak{R}_1$  se eligió de 350 a 1400 nm y  $\mathfrak{R}_2$  se seleccionó de 400 a 3000 nm, ambos en el rango angular de  $0^\circ$  a  $90^\circ$ . Además, en la primera región se optimizó la longitud de onda mínima de diseño y la longitud de onda máxima

de diseño se estableció en 1400 nm; mientras que en la segunda región las longitudes de onda se establecieron en 850 y 3000 nm, respectivamente. Aproximadamente el 90% de la radiación solar que llega a la superficie terrestre está contenida en la región espectral  $\mathfrak{R}_1$  y el 98% en  $\mathfrak{R}_2$  (Bird *et al.*, 1983). Una aplicación directa de las estructuras optimizadas en estas regiones son los concentradores solares. Los parámetros optimizados correspondientes a un contraste de porosidad del 51/76% se muestran en la tabla II.

Tabla II. Parámetros optimizados  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $A$  y  $N_p$  que producen la reflectancia más alta  $\langle R \rangle$  promediada sobre los rangos espectrales  $\mathfrak{R}_1$  (primer bloque) y  $\mathfrak{R}_2$  (segundo bloque) y el rango angular 0-90° para las clases de perfil  $f_1$ ,  $f_2$  y  $f_3$  (ecs. (50)-(52)). Incluimos el espesor  $d$  de la estructura y el ancho y centro espectral omnidireccional (AOD y COD).

| Función | Parámetro |         |      | Periodos<br>$N_p$ | Espesor<br>( $\mu\text{m}$ ) | BOD<br>(nm) | COD<br>(nm) | $\langle R \rangle$<br>% |
|---------|-----------|---------|------|-------------------|------------------------------|-------------|-------------|--------------------------|
|         | $\alpha$  | $\beta$ | $A$  |                   |                              |             |             |                          |
| $f_1$   | 0.24      | —       | —    | 222               | 86.1                         | 300         | 1150        | 89                       |
| $f_2$   | 0.37      | 1.06    | —    | 102               | 35.9                         | 220         | 1110        | 88                       |
| $f_3$   | 1.23      | 0.54    | 0.18 | 63                | 21.6                         | 250         | 1125        | 89                       |
| $f_1$   | 1.20      | —       | —    | 90                | 60.4                         | 2150        | 1925        | 92                       |
| $f_2$   | 1.08      | 1.86    | —    | 105               | 61.7                         | 2000        | 2000        | 89                       |
| $f_3$   | 1.01      | 1.95    | 0.20 | 102               | 62.3                         | 2005        | 1975        | 90                       |

En la región  $\mathfrak{R}_1$ , la función  $f_3$  modula la mejor distribución de los periodos en el menor espesor y la estructura fotónica propuesta tiene la mayor reflectancia. Además, esta estructura tiene un ancho omnidireccional (AOD) de 250 nm centrada (COD) en 1125 nm, como se muestra en la fig. 17(b). Se han reportado varias estructuras fotónicas con una BOD (Xu *et al.*, 2018; Ahmed *et al.*, 2014; Dietsch *et al.*, 2000) definida como aquellas regiones espectrales en las que  $R > 90\%$  para todos los ángulos. Aquí adoptamos el mismo criterio. Esta estructura será sintetizada y la llamaremos S-1.

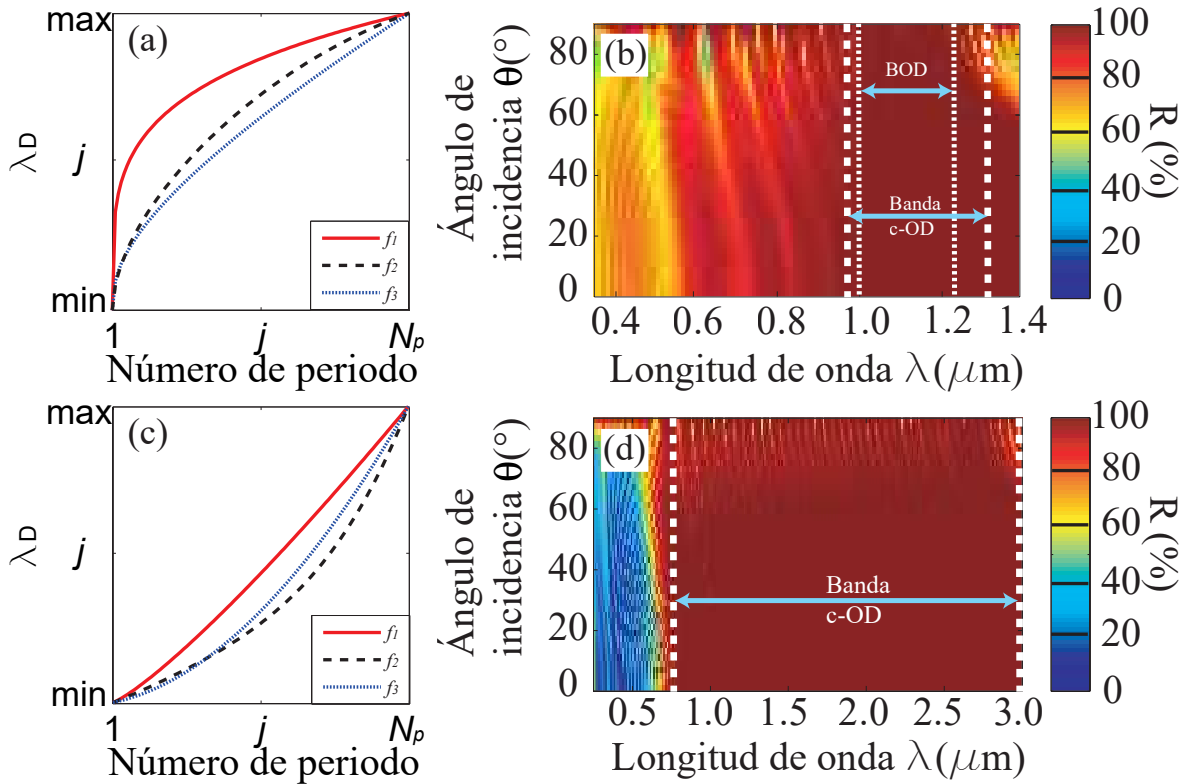


Figura 17. Perfiles de las funciones optimizadas que modulan la distribución del  $j$ -ésimo período sintonizados al diseño  $\lambda_j$  para las estructuras analizadas en la región (a) de 350 a 1400 nm y (c) de 400 a 3000 nm. Espectros de reflectancia de las estructuras optimizadas en la región (b) de 350 a 1400 nm y (d) de 400 a 3000 nm. Las líneas de puntos delimitan el área donde  $R > 90\%$ . En la primera región hay una banda OD y en la segunda región hay una banda de cuasi OD. Los cálculos son para luz no polarizada.

En la región  $\mathfrak{R}_2$ , las estructuras propuestas tienen espesores y espectros de reflectancia muy similares; sin embargo, la de menor espesor y máxima reflectancia es la diseñada a partir de la función  $f_1$ . Esta estructura también será sintetizada y la llamaremos S-2. Los espectros de reflectancia calculados de S-2 se muestran en la fig. 17(d). Esta estructura tiene una región muy amplia donde  $R(\lambda, \theta) > 0.90$ , que se ubica de 850 a 3000 nm y en un rango angular de  $0^\circ$  a  $70^\circ$ . Entonces, se puede decir que S-2 tiene una banda cuasi-OD (c-BOD) de 2150 nm centrada en 1925 nm.

Por otro lado, los perfiles de las funciones (con los parámetros optimizados) que modulan la distribución del  $j$ -ésimo período sintonizado a  $\lambda_j$ , en la primera región

de análisis, se muestran en la fig. 17(a). En la fig. 17(c), se grafican los perfiles de las funciones relacionadas con la segunda región. En estas figuras, se observa que los perfiles son muy similares en cada región de análisis. Por ejemplo, en la primera región de análisis, es necesario que las estructuras fotónicas tengan el menor número de períodos sintonizados en la zona donde el SP está absorbiendo y que sean los primeros períodos de la estructura. Debido a que la absorción del SP es insignificante en  $\mathfrak{R}_2$ , las funciones optimizadas no están demasiado lejos de un perfil lineal.

Se fabricaron las estructuras optimizadas (S-1 y S-2) y se midió sus espectros de reflectancia en varios ángulos de incidencia  $\theta$ . Debido a limitaciones experimentales, se restringen los resultados al caso de luz no polarizada. En la fig. 18(a), las reflectancias calculadas y medidas se comparan de 350 a 1400 nm para diferentes ángulos de incidencia ( $\theta = 10^\circ, 20^\circ, 30^\circ, 40^\circ, 50^\circ$  y  $60^\circ$ ) para S-1. Sus espectros tienen características muy similares. Por ejemplo, para  $\lambda > 700$  nm y  $10^\circ < \theta < 40^\circ$ , el espectro difiere en menos del 5% y para  $\theta > 40^\circ$  ambos espectros son cualitativamente consistentes pero la reflectancia medida es menor que la calculada. Esta diferencia se puede atribuir, en parte, a la dispersión de la luz en interfaces reales, que generalmente tienen una cierta rugosidad (Theiß *et al.*, 1994; Chavez-Castillo *et al.*, 2020; Missoni *et al.*, 2020) que no hemos tenido en cuenta en nuestra teoría. La reflectancia se midió usando luz no polarizada. Debido a las limitaciones del espectrofotómetro, no es posible realizar mediciones para  $\theta > 60^\circ$  y, por lo tanto, verificar la BOD. Por tanto, en este rango angular, nos limitaremos a decir que la estructura tiene una banda cuasi-omnidireccional ( $R(\lambda, \theta) > 90\%$ ) ubicado entre 980 y 1340 nm.

Por otro lado, la fig. 18(b) muestra la comparación de los espectros de reflectancia calculados y los espectros medidos en el rango de 400 a 3000 nm y los ángulos de incidencia antes mencionados para S-2. Estos espectros también son muy similares. La

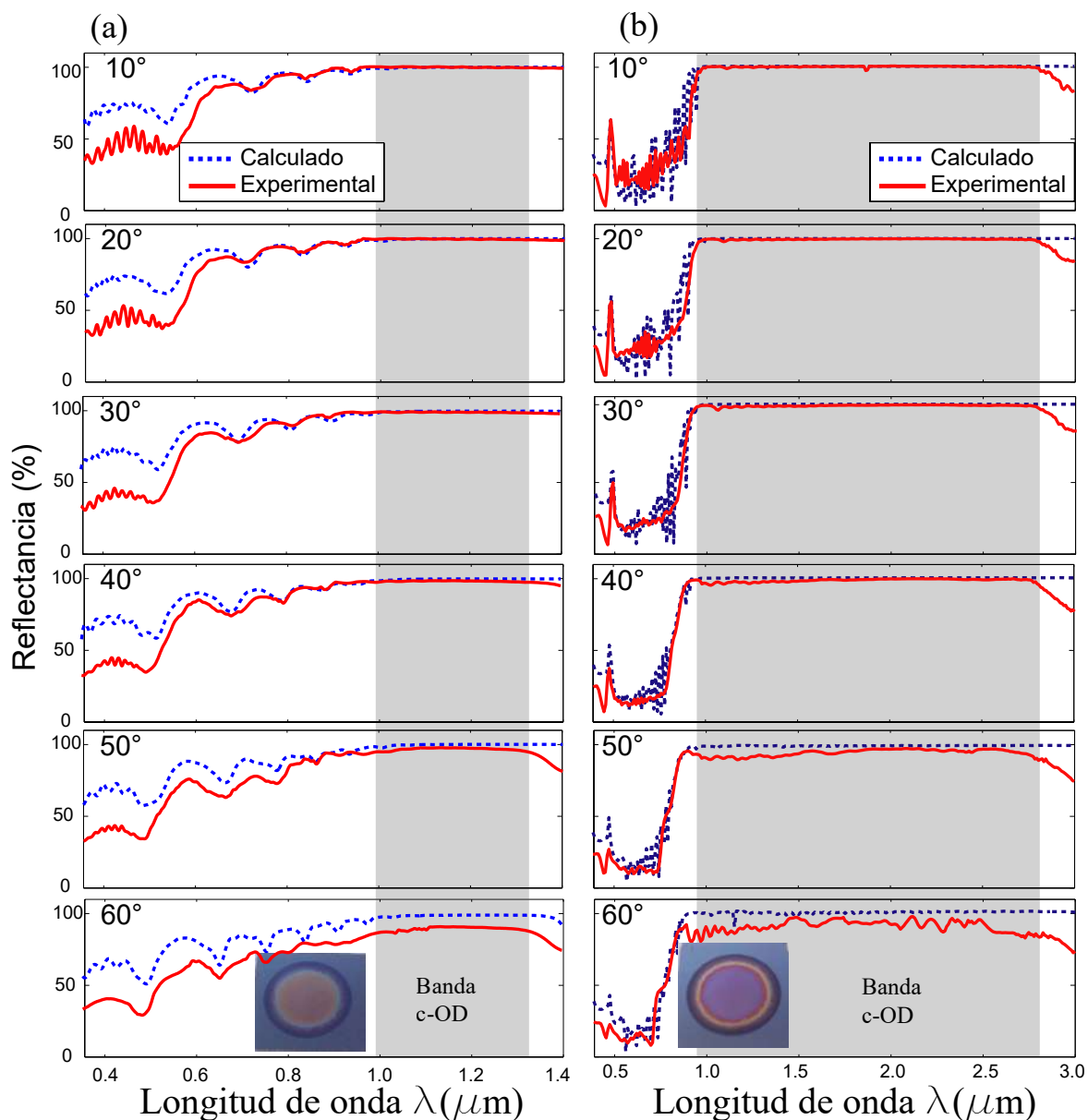


Figura 18. Espectros de reflectancia calculados y medidos en diferentes ángulos de incidencia para la estructura (a) S-1 y (b) S-2. Los espectros de reflectancia son para luz no polarizada. La zona gris indica la región donde la reflectancia es superior al 90%. Esta región corresponde a la banda cuasi OD de la estructura. En el recuadro se muestra una fotografía de la estructura sintetizada.

diferencia entre los espectros calculados y medidos a longitudes de onda más largas, se puede atribuir a un aumento de imperfecciones como capas onduladas y más rugosidad para capas más profundas, debido a una difusividad más restringida del electrolito a medida que aumenta el espesor de la estructura (Dal Negro *et al.*, 2003; Vincent, 1994). Según los resultados obtenidos, esta estructura tiene una amplia banda cuasi-omnidireccional ( $R > 0.90$ ) de 1800 nm centrada en 1880 nm.

## IV.2. Estructura fotónica con espejos apilados

Otra técnica para diseñar estructuras que se reflejen en una amplia gama del espectro electromagnético es apilar espejos de Bragg sintonizados en diferentes longitudes de onda ( $\lambda_0$ ). Por ejemplo, Agarwal and Del Rio (Agarwal and Río, 2003) propuso una estructura fotónica en la cual apiló 54 espejos de la siguiente manera: el primer espejo lo sintonizó a  $\lambda_1 = 700$  nm y tuvo 2.5 periodos. Los siguientes  $j$ -ésimos espejos los sintonizó a las  $j$ -ésimas longitudes de onda ( $\lambda_j$ ) siguiendo la secuencia  $\lambda_{j+1} - \lambda_j = (2 + j)$  nm. Los  $j$ -ésimos espejos los sintetizó con 4 periodos cada uno. Además, Estrada-Wiese *et al.* (Estrada-Wiese *et al.*, 2018) desarrolló un método que combina tres algoritmos de optimización estocástica junto con una metodología de búsqueda de espacio reducido para obtener una configuración de estructuras fotónicas personalizadas y optimizadas.

En esta técnica, se continúa utilizando la propagación de ondas de Bloch en estructuras periódicas, ya que esto permite conocer las frecuencias que tienen prohibido propagarse a través de la estructura. Estos se obtienen analizando la expresión

$$\cos(KD) = \frac{1}{2} \text{Tr}M, \quad (53)$$

donde  $D$  es el espesor del espejo,  $\pm K$  representa el vector de Bloch que se propaga en el

espejo (Mochán *et al.*, 1987; Mochán and del Castillo Mussot, 1988; Pérez-Huerta *et al.*, 2018),  $\text{Tr}$  denota la traza y  $M$  es la matriz de transferencia de un periodo de espesor  $D$ . Por lo tanto, siempre que  $|\text{Tr}(M)| > 2$ , la energía electromagnética no se pueda propagar en el sistema periódico. Esta condición corresponde a una banda fotónica prohibida dentro de la cual esperamos una alta reflectancia, incluso para un sistema finito hecho de unos pocos periodos. Esto sugiere la siguiente estrategia de diseño. Apilar espejos, cada uno formado por unos pocos periodos de un sistema periódico, de modo que su PBG se superpone al PBG del subespejo anterior y al del siguiente. El número de periodos de cada subespejo es un parámetro importante. Si es demasiado pequeño, el subespejo sería parcialmente transparente dentro del PBG. Si es demasiado grande, la estructura resultante sería demasiado gruesa. Esto es particularmente importante para los subespejos sintonizados en longitudes de onda más cortas, para las que existe cierta absorción.

Por estas razones, el diseño de la estructura se realizó a través de dos estrategias: en la primera, se consideraron períodos constantes. En la segunda, se asignó un número fijo de periodos a cada espejo de acuerdo con el centro de su PBG: elegimos un solo periodo para aquellos  $j$ -ésimos espejos sintonizados en  $\lambda_j < 500$  nm, dos periodos para  $500 < \lambda_j < 650$  nm, tres periodos para  $650 < \lambda_j < 800$  nm, y para  $\lambda_j \geq 800$  nm el número de periodos  $p$  se varió entre 4 y 10. En ambos diseños, el grado de superposición de PBG consecutivos se tomó como parámetro a optimizar para maximizar la reflectancia  $\langle R \rangle$  promediada dentro de los rangos espectral  $400 \leq \lambda \leq 3000$  nm y angular  $0^\circ \leq \theta \leq 90^\circ$ . Definimos el porcentaje de superposición en términos de la parte del PBG del  $j$ -ésimo espejo que se encuentra dentro del PBG del  $(j + 1)$ -ésimo espejo.

La Tabla III muestra los valores optimizados de la reflectancia promedio  $\langle R \rangle$  para diferentes elecciones del número de períodos  $p$  de cada subespejo, como se discutió

anteriormente, incluyendo el número resultante  $N_m$  de subespejos apilados, el espesor  $d$  de la estructura y la óptima superposición de PBG consecutivos. El primer y segundo bloque corresponden a la primera y segunda estrategia discutidas anteriormente, respectivamente.

Tabla III. Número total de espejos apilados  $N_e$ , grosor  $d$ , superposición entre PBG consecutivos y reflectancia promedio  $\langle R \rangle$  para estructuras optimizadas diseñadas con un número  $p$  de períodos por espejos (primer bloque) o un número  $p$  de períodos para esos espejos sintonizados en longitudes de onda  $\lambda_j > 800$  nm (segundo bloque, ver texto), para diferentes valores de  $p$ .

| $p$ | $N_e$ | $d$<br>( $\mu\text{m}$ ) | Traslape del<br>PBG (%) | $\langle R \rangle$<br>(%) |
|-----|-------|--------------------------|-------------------------|----------------------------|
| 1   | 98    | 43.2                     | 95                      | 91.0                       |
| 3   | 31    | 42.5                     | 81                      | 91.8                       |
| 5   | 17    | 41.9                     | 68                      | 92.0                       |
| 4   | 25    | 38.7                     | 74                      | 92.3                       |
| 6   | 18    | 41.5                     | 78                      | 95.35                      |
| 10  | 13    | 45.4                     | 56                      | 95.34                      |

Según la tabla III, la estructura que tiene la mayor reflectancia está en el segundo bloque. A esta estructura la llamaremos S-3. En S-3, la superposición de dos PBG consecutivos es del 78%, su espesor es de 41,5  $\mu\text{m}$  y su reflectancia promedio es del 95.3%. Además, S-3 se compone de 18 espejos sintonizados en las siguientes longitudes de onda: 400, 460, 510, 570, 640, 720, 810, 910, 1020, 1150, 1290, 1450, 1630, 1830, 2060, 2320, 2610 y 2860 nm. Los espectros de reflectancia calculados y medidos de S-3 se muestran en la fig. 19. El mapeo de reflectancia que se muestra en la fig. 19(a) revela una estructura casi omnidireccional en el rango de 950 a 2900 nm, y un rango angular entre  $0^\circ$  y  $60^\circ$ . También se observa que para  $\theta > 70^\circ$  y longitudes de onda

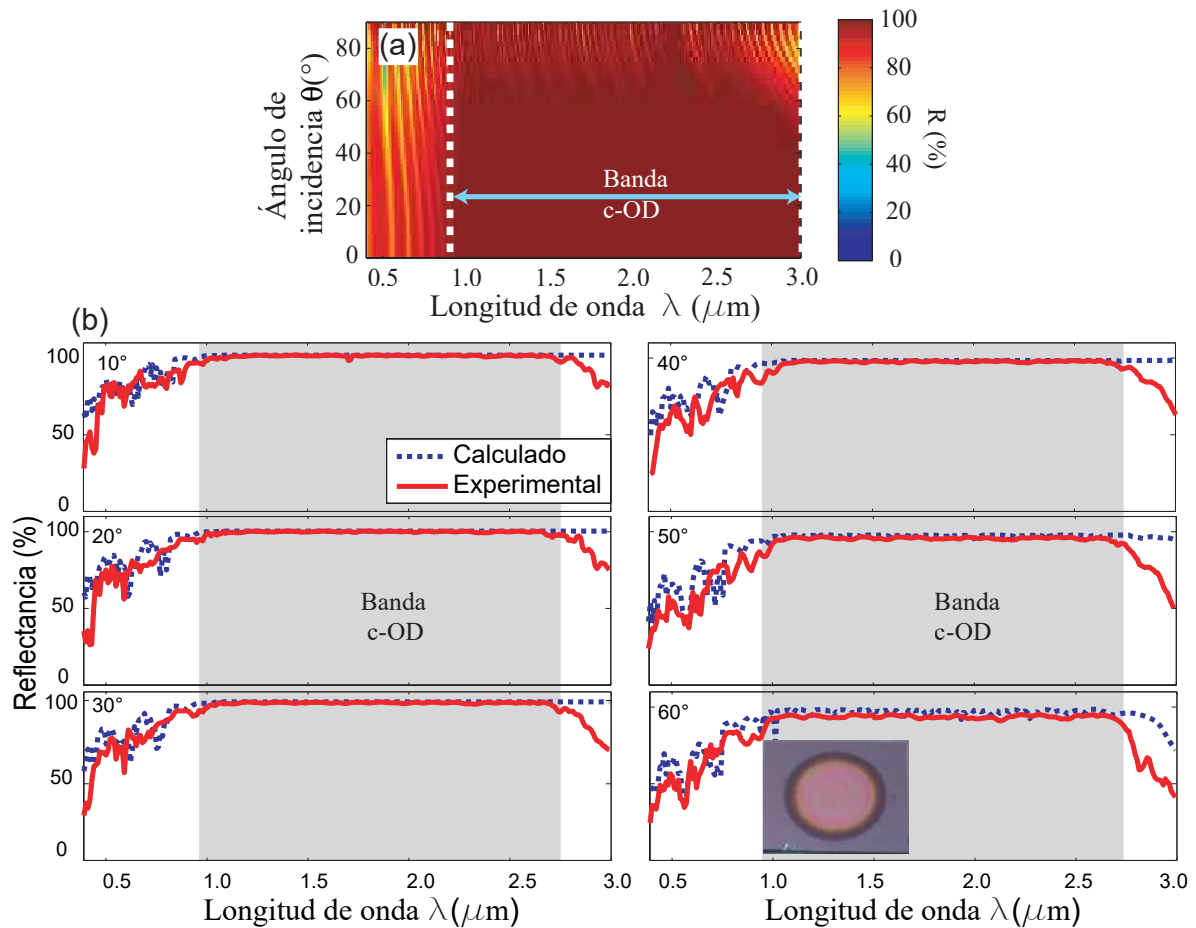


Figura 19. (a) Reflectancia calculada para la estructura optimizada. (b) Comparación entre los espectros de reflectancia medidos y calculados en varios ángulos de incidencia. Los espectros de reflectancia son para luz no polarizada. La banda gris indica la región en la que la reflectancia es superior al 90%. El recuadro muestra una fotografía con una vista superior de la estructura sintetizada.

larga la reflectancia disminuye y tiene oscilaciones. Estos efectos se pueden atribuir a la mayor penetración del campo electromagnético dentro de la estructura, como lo muestra Puente-Díaz, *et al.* (Puente-Díaz *et al.*, 2020). En la fig. 19(b) se compara la reflectancia calculada y medida para la estructura S-3, en varios ángulos de incidencia. Aunque, el rango de longitud de onda cuasi omnidireccional de la estructura sintetizada, de 950 a 2750 nm, es ligeramente más pequeño que el calculado, el PBG medido es casi el doble de ancho de una estructura de SP tipo chirped recientemente reportada

(Chavez-Castillo *et al.*, 2020), que tiene el mayor tamaño anteriormente publicado.

Finalmente, la tabla IV muestra algunos espejos OD basados en SP diseñados para operar en la región NIR y el ancho de la banda prohibida omnidireccional se compara con las estructuras analizadas en el presente estudio. Por ejemplo, el AOD de la estructura S-1 es 20 nm más ancho que el reportado por Bruyant, *et al.* (Bruyant *et al.*, 2003) y se encuentra más cerca del rango visible. Además, el BOD de la estructura S-3 comienza a 950 nm como el sintetizado por Estévez, *et al.* (Estevez *et al.*, 2009); sin embargo, el ancho de S-3 se extiende a 2750 nm. En otras palabras, S-3 tiene una AOD 3,55 veces mayor. Además, el BOD de la estructura reportada por Xifre-Perez, *et al.* (Xifré-Pérez *et al.*, 2005) representa sólo el 17,6% del AOD de las estructuras S-2 y S-3. La tabla Tabla IV. Desarrollo de espejos omnidireccionales basados en silicio poroso para la región NIR para trabajos previamente publicados (primer bloque) y para las diferentes muestras aquí estudiadas (segundo bloque). Mostramos las bandas omnidireccionales (BOD) logradas y sus anchos (AOD).

| Referencia                           |     | Año  | BOD<br>(nm) | AOD<br>(nm) |
|--------------------------------------|-----|------|-------------|-------------|
| Bruyant <i>et al.</i> (2003)         |     | 2003 | 1100-1440   | 340         |
| Xifré-Pérez <i>et al.</i> (2005)     |     | 2004 | 1297-1615   | 318         |
| Estevez <i>et al.</i> (2009)         |     | 2009 | 950-1456    | 506         |
| Chavez-Castillo <i>et al.</i> (2020) |     | 2020 | 1000-2000   | 1000        |
| Wu <i>et al.</i> (2021)              |     | 2021 | 1284-2605   | 1321        |
| Este trabajo                         | S-1 |      | 980-1340    | 360         |
|                                      | S-2 |      | 980-2780    | 1800        |
|                                      | S-3 |      | 950-2750    | 1800        |

revela que las estructuras porosas basadas en silicio S-2 y S-3 tienen el ancho de brecha

más amplio, siendo 1,36 veces mayor que el trabajo más grande reportado hasta ahora en la región NIR (Wu *et al.*, 2021).

## Capítulo V

---

# ESTRUCTURAS FOTÓNICAS DE SILICA POROSA

---

En este capítulo se mencionan algunos procesos de oxidación del SP, siendo la oxidación térmica la más usada. Además, se presenta el diseño, la síntesis y la caracterización óptica de diversos sistemas multicapa de SP completamente oxidados.

### V.1. Introducción

El estudio de las estructuras fotónicas 1D, especialmente los espejos de Bragg, ha tenido un impulso en los últimos años ya que se han propuesto varias técnicas para optimizar su diseño como las estructuras tipo chirped (Chavez-Castillo *et al.*, 2020), el apilamiento de espejos mediante el análisis del traslape de dos BOD consecutivas (Castillo-Gallardo *et al.*, 2021) o métodos estocásticos (Estrada-Wiese *et al.*, 2018), y estructuras con gradiente de Fermi (Guermi *et al.*, 2020). En estos trabajos se reportan estructuras de Bragg OD o cuasi OD en el IR. Además, Castillo *et al.* (Castillo-Gallardo *et al.*, 2021), minimizó el espesor de las estructuras sintetizadas.

Se ha observado que el almacenamiento de películas de SP en el aire ambiente provoca una oxidación incontrolada. El silicio se convierte parcialmente en  $\text{SiO}_2$  y,

en consecuencia, las propiedades del SP cambian (Kellarev and Ruschin, 2018). La oxidación térmica (OT) es el método de estabilización térmica más antiguo y más utilizado para SP. Además, existen otros tratamientos de oxidación, que tienen sus propios potenciales y resultados característicos. Cabe señalar que los tratamientos de oxidación no poseen extensión, estabilidad o propiedades similares. Por ejemplo, la oxidación con ozono tiende a formar más grupos de hidroxilo en la superficie del SP que la oxidación térmica. La oxidación electroquímica tiene efectos similares, pero la capa de óxido producida es más gruesa y más estable que la de la oxidación por ozono. El uso de oxidantes en la oxidación química generalmente acelera el proceso de oxidación, dependiendo de si se usa un oxidante suave (bórax (Joo *et al.*, 2014)) o fuerte (ácido nítrico). Es posible combinar las diferentes rutas de oxidación simultánea o sucesivamente para obtener la adecuada formación de óxido.

La OT tiene diferentes variaciones, que dependen de la atmósfera, la presión, la velocidad de calentamiento y la duración del proceso. Además, la temperatura de oxidación tiene efectos significativos en el proceso. La oxidación en oxígeno seco generalmente consta de tres procesos diferentes dependientes de la temperatura (Pap *et al.*, 2004; Salonen and Makila, 2014):

I El proceso de temperatura más baja se llama oxidación de enlace posterior, que tiene lugar a temperatura ambiente. Sin embargo, el proceso es muy lento a temperatura ambiente y generalmente necesita temperaturas superiores a 200 °C si se va a completar en unas pocas horas. En este proceso, los átomos de oxígeno atacan selectivamente a los enlaces de Si–Si de la superficie y los átomos de Si no reemplazan a los átomos de hidrógeno en la superficie. Los puentes de oxígeno formados entre los átomos de Si de superficie y la segunda capa de Si atómica expanden la estructura atómica local en un 30%, causando una ligera disminución

en el diámetro de poro. Además de mejorar la estabilidad, la oxidación a 300 °C cambia la superficie del SP de hidrofóbica a hidrofílica, aunque la mayoría de los átomos de hidrógeno permanecen en la superficie.

**II** El siguiente proceso de oxidación comienza por encima de 400 °C. En este proceso, la terminación de hidrógeno se reemplaza con grupos hidróxilo y aumenta el grosor de la capa oxidada. Un proceso completo puede necesitar temperaturas tan altas como 650 °C.

**III** En el proceso final, la oxidación avanza hacia el esqueleto del SP, esto ocurre a temperaturas alrededor de 900-1000 °C.

Debido a la expansión estructural, el diámetro de los poros y la porosidad dependen de la extensión de la oxidación. Adicionalmente, se ha observado que disminuyen el área superficial específica, el tamaño de los poros y el volumen en el SP oxidado por encima de 600 °C. Esto podría evitarse pre-oxidando SP a alrededor de 300 °C, antes de la oxidación a alta temperatura, pero depende de la estructura inicial del SP.

Después de la oxidación, una monocapa de SP oxidada se compone de una mezcla de silicio, aire y SiO<sub>2</sub>. La reacción de silicio con oxígeno produce un aumento de 2.27 veces en la fracción de volumen en el esqueleto de silicio. Suponiendo que la fracción de volumen de óxido de silicio es  $V_{ox}$ , la porción de Si se reduce en  $V_{ox}/2.27$  y la fracción de volumen vacío es  $(1.27/2.27) V_{ox}$ , en relación con las muestras obtenidas (Ruminski *et al.*, 2011). Ahora bien, si se desea una estructura fotónica, por ejemplo, un espejo de Bragg en el cual la fracción del volumen de SP del conjunto de capas de baja porosidad se oxida completamente ( $V_{ox} = 1$ ) durante el proceso de oxidación y la capa no se deforma, la fracción de esta tendrá que ser  $1/2.27$ , o bien, una porosidad  $p \simeq 56\%$ . En el caso de capas de alta porosidad, existe una mayor fracción de aire y esto implica

que se obtienen capas de sílice porosa. Con esta configuración, tendremos estructuras fotónicas de sílice porosa de SP, seguido de un proceso de oxidación. En este trabajo se reporta el efecto de oxidación de estructuras fotónicas tipo chirped de SP. La porosidad baja y alta utilizada en la estructura multicapa es 56% y 76%, respectivamente. Con estos valores se obtienen capas de  $\text{SiO}_2$  sin y con una porosidad  $p \simeq 54,5\%$ .

El proceso de OT se realiza en un horno con flujo de oxígeno en tres etapas continuas, primero a  $350\text{ }^\circ\text{C}$  durante 1 h, luego a  $600\text{ }^\circ\text{C}$  durante 2 h y finalmente a  $900\text{ }^\circ\text{C}$  durante 2 h. Después del proceso de oxidación, todo el silicio contenido en las capas de SP se transformó en  $\text{SiO}_2$ , capas alternas de sílice y sílice porosa. La porosidad de la capa muestra un 55% según el cálculo con la teoría del medio efectivo de Bruggeman.

## V.2. Diseño de la estructura

Es bien sabido que un espejo de Bragg (Bruyant *et al.*, 2003; Xifré-Pérez *et al.*, 2009) es una estructura fotónica en la que dos capas con diferente índice de refracción se alternan periódicamente y el espesor de la capa óptica es un cuarto de onda para una determinada longitud de onda ( $\lambda_0$ ); es decir,

$$k_H d_H = k_L d_L = \pi/2, \quad (54)$$

donde  $d_i$  es el espesor físico de cada capa y  $k_i$  se obtiene de

$$k_i = \sqrt{\varepsilon_i q^2 - Q^2}, \quad (55)$$

siendo  $i = H$  o  $L$ . Aquí  $\varepsilon_i = n_i^2$  es la permitividad eléctrica (por simplicidad se asume que todos los medios son no magnéticos, con permeabilidad  $\mu_i = 1$ ),  $q = \omega/c = 2\pi/\lambda$  es el número de onda del espacio libre correspondiente a la longitud de onda  $\lambda$  y

$$Q = n_0 q \sin \theta_i \quad (56)$$

es la proyección del vector de onda sobre las interfaces, que se conserva de acuerdo con la ley de Snell, siendo  $\theta_i$  el ángulo de incidencia. Las muestras utilizadas en este trabajo contienen dos componentes: silicio y aire u óxidos de silicio y aire. Para calcular la porosidad y el espesor a partir de los espectros de reflectancia experimentales, se debe utilizar un modelo de medio eficaz apropiado. En el presente trabajo se utilizó la aproximación de Bruggeman (Pap *et al.*, 2006). Se ha demostrado que la teoría de medio efectivo de Bruggeman produce resultados que concuerdan bien con las mediciones experimentales cuando se aplica a Si poroso construido a partir de obleas altamente dopadas con boro (Si tipo  $p$ ) (Estrada-Wiese and R  o, 2018). Para un medio que contiene dos componentes diferentes, la relaci  n viene dada por

$$(1 - p) \frac{n_m^2(\lambda) - n_{eff}^2(\lambda)}{n_m^2(\lambda) + 2n_{eff}^2(\lambda)} + p \frac{n_{fm}^2(\lambda) - n_{eff}^2(\lambda)}{n_{fm}^2(\lambda) + 2n_{eff}^2(\lambda)},$$

donde  $p$  es la porosidad,  $n_m$ ,  $n_{fm}$  y  $n_{eff}$ , es el   ndice de refracci  n de la matriz porosa, del medio que llena la matriz porosa y del medio efectivo, respectivamente. El   ndice de refracci  n complejo se define como  $\eta(\lambda) = n(\lambda) + i\kappa(\lambda)$  donde la absorpci  n est   relacionada con el coeficiente de extinci  n  $\kappa(\lambda)$ . Los valores para  $n(\lambda)$  y  $\kappa(\lambda)$  del Si y SiO<sub>2</sub> se tomaron de (Polyanskiy, 15 de Enero de 2020). Aunque el Si a frecuencias   pticas depende de la concentraci  n del portador de carga, el cambio en el   ndice de refracci  n var  a como  $10^{-3}$ , lo cual es insignificante en comparaci  n con el cambio en el   ndice de refracci  n debido a la incertidumbre en las mediciones de porosidad (Reed, 2008).

Existen varias t  cnicas para dise  nar estructuras fot  nicas 1D. Una de ellas es apilar un conjunto de espejos sintonizados en diferentes  $\lambda_0$  (Agarwal and R  o, 2003). Otra t  cnica es aquella donde la distribuci  n de los per  odos es modulada por una funci  n creciente, obteniendo una estructura tipo chirped. En trabajos anteriores, Castillo-Gallardo (Castillo-Gallardo *et al.*, 2021) demostr   que la optimizaci  n de funciones

paramétricas tienen perfiles similares independientemente del contraste de porosidad. Sin embargo, el número de periodos de una estructura aumenta al reducir el contraste de porosidad. Teniendo esto en cuenta, se decidió diseñar una estructura tipo chirped. Así, el diseño del  $j$ -ésimo periodo de la estructura fotónica está modulado por la  $j$ -ésima longitud de onda,  $\lambda_j$ , dada por

$$\lambda_j = \lambda_{\min} + (\lambda_{\max} - \lambda_{\min}) (\xi)^\alpha, \quad (57)$$

donde  $\xi = \frac{j-1}{N_p-1}$  es la normalización del  $j$ -ésimo periodo en el número de períodos  $N_p$ ,  $\lambda_{\min}$  y  $\lambda_{\max}$  son las longitudes de onda mínima y máxima de diseño, y  $\alpha$  es un parámetro de optimización. El proceso de optimización se llevó a cabo utilizando el módulo PDL Minuit para calcular la reflectancia media máxima en el menor espesor.

### V.3. Resultados

En esta sección se presenta el análisis de la respuesta óptica de dos estructuras fotónicas. La primera fue diseñada a incidencia normal (aplicado a la ec. (56)), la cual se identifica con S-A antes del proceso de oxidación y S-A' después del proceso de oxidación. La otra estructura se diseñó a  $45^\circ$  de incidencia, que se identifica con S-B antes de la oxidación y con S-B' después de la OT.

Los parámetros a optimizar (considerando una oxidación completa) de las estructuras son  $\alpha$  y  $N_p$  (número de periodos), que varían de 0.4 a 1.6 y de 200 a 600 periodos, respectivamente. La reflectancia se calcula de 250 a 1400 nm en el rango angular de  $0^\circ$  a  $90^\circ$  para luz no polarizada. Los resultados indican que las estructuras con mayor reflectancia son aquellas con 550 períodos y están moduladas con funciones que tienen su  $\alpha$  en la vecindad de 1, como se muestra en las figs. 20(a) y 20(d). El espesor físico de las estructuras optimizadas es superior a  $190 \mu\text{m}$ . Esto representa un inconveniente

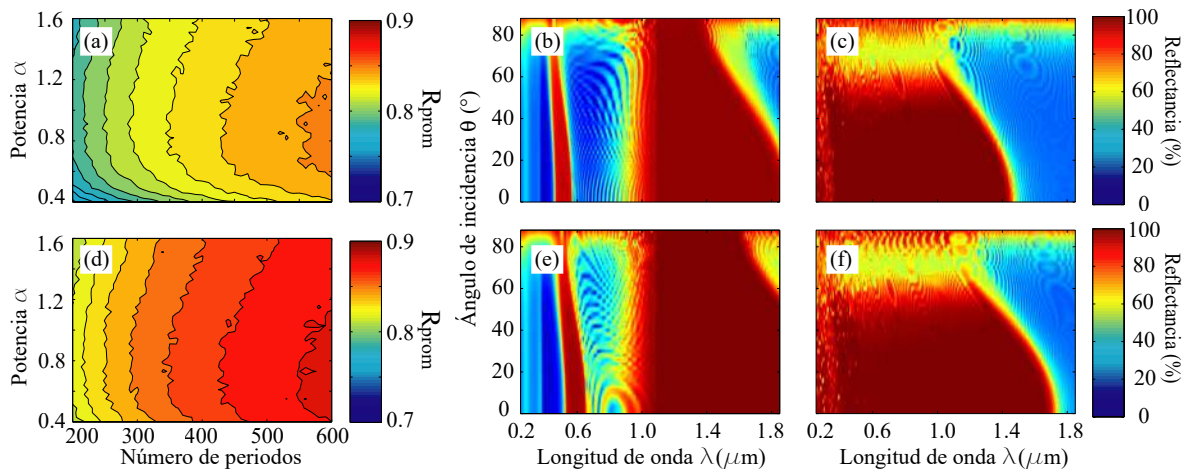


Figura 20. Reflectancia promedio calculada a partir de estructuras que tienen de 200 a 600 períodos. Su distribución está modulada por la ec. (57) y los valores de  $\alpha$  van desde 0.4 hasta 1.6, diseñados para (a) incidencia normal y (d) incidencia de  $45^\circ$  (cada contorno representa 1%, siendo los valores máximos obtenidos con 84% y 87% , respectivamente). Mapeo de la reflectancia de las estructuras (b) [(e)] S-A [S-B] y (c) [(f)] S-A' [S-B']. Las líneas punteadas indican el gap OD o cuasi OD. Los cálculos que se muestran son para luz no polarizada.

ya que, debido al contraste de porosidad utilizado, la estructura tiene una estabilidad mecánica muy baja y tiende a fracturarse en la etapa final de la síntesis. Por este motivo, se decidió estudiar estructuras con 400 períodos distribuidos homogéneamente de 380 a 1400 nm; es decir, con  $\alpha = 1.0$ .

La estructura S-A tiene un espesor físico de  $114.85 \mu\text{m}$ . El cálculo de reflectancia indica que esta estructura, antes de la oxidación, tiene una banda OD localizada de 1080 a 1370 nm y una banda cuasi-OD ( $R > 80\%$ ) que va de 470 a 510 nm en el rango angular de  $0^\circ$  a  $50^\circ$  (fig. 20(b)). La fig. 20(c) muestra la reflectancia calculada considerando los índices de refracción del silicio poroso completamente oxidado y sin deformación de las capas de baja porosidad. Estos espectros tienen una banda cuasi-OD ( $R > 80\%$ ) ubicado de 360 a 1160 nm en el rango espectral de  $0^\circ$  a  $50^\circ$ . Si el ángulo de incidencia se cambia durante el diseño de la estructura, la respuesta óptica cambiará. La estructura S-B fue diseñada para  $\theta_i = 45^\circ$  y las reflectancias calculadas

se mapean en las figs. 20(e) y 20(f), que muestran espectros similares a la estructura S-A. El espesor de este es de  $141.5 \mu\text{m}$ .

La comparación de los espectros de reflectancia medidos en diferentes ángulos de S-A se muestran en la fig. 21(a). Estos espectros son muy similares, por ejemplo, la estructura sintetizada tiene dos gaps cuasi-OD ( $R > 80\%$ ) de 40 y 405 nm, ubicados de 465 a 505 nm y de 1040 a 1445 nm, respectivamente, en el rango angular medido. Después de oxidar S-A, se obtiene la estructura S-A'. En la fig. 21(b) se comparan los

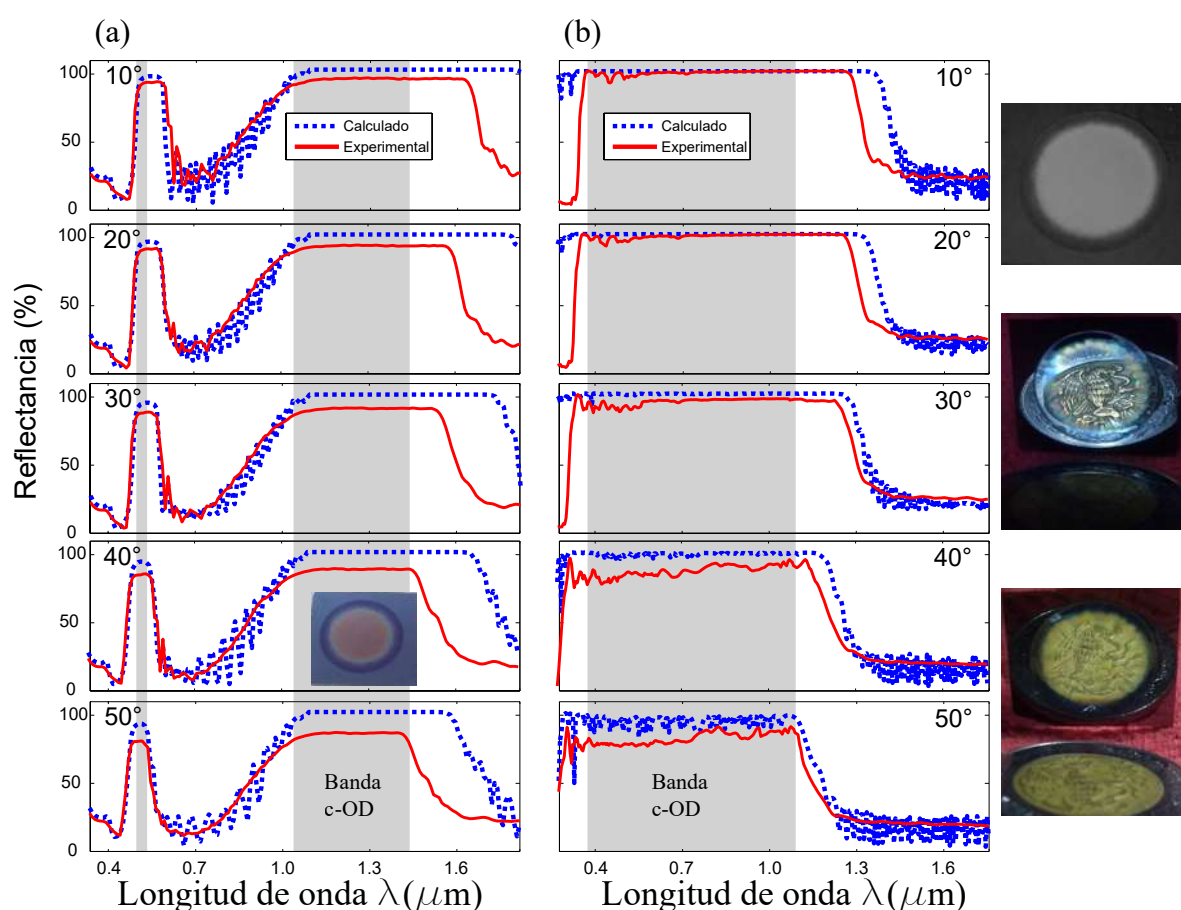


Figura 21. Espectros de reflectancia calculados y medidos a diferentes ángulos de incidencia, (a) antes y (b) después del proceso de oxidación de la estructura diseñada a incidencia normal. Los espectros son obtenidos para luz no polarizada. El área sombreada indica el gap cuasi-OD. En la columna de la derecha se muestran fotografías de la estructura reflejando un objeto a diferentes ángulos.

espectros de reflectancia de S-A' medidos en diferentes ángulos y se observa que esta

estructura tiene una banda cuasi-OD ubicado de 385 a 1140 nm en el rango espectral de  $10^\circ$  a  $50^\circ$ .

Como se mencionó anteriormente, aumentar el ángulo de incidencia durante la etapa de diseño de la estructura fotónica también aumenta su espesor. Sin embargo, la condición de Bragg (ec. (54)) todavía se cumple ya que la componente normal del vector de onda disminuye. El aumento del grosor de la estructura produce una ampliación y un desplazamiento del espectro de reflectancia hacia el IR, como se muestra en las figs. 20(e) y 20(f). Esto también se verifica con los espectros de reflectancia medidos en el rango angular de  $10^\circ$  a  $50^\circ$  de las estructuras S-B (fig. 22(a)) y S-B' (fig. 22(b)). Por ejemplo, antes del proceso de oxidación, la banda cuasi-OD se ubicó de 525 a 580 nm y la BOD obtuvo un ensanchamiento, localizado de 1090 a 1635 nm. Después del proceso de oxidación, la banda cuasi-OD de los espectros de reflectancia también muestran un ensanchamiento y desplazamiento ya que se ubica de 430 a 1260 nm.

Con estos resultados se concluye la primera parte de esta tesis, que abarcó el análisis teórico y experimental de estructuras fotónicas 1D. Recapitulando, en esta parte se desarrolló un nuevo formalismo de la matriz de transferencia que logra la estabilidad numérica en los cálculos de las propiedades ópticas de sistemas multicapa que presentan absorción. Asimismo, se expuso una rutina adecuada para sintetizar estructuras con capas múltiples de SP. De igual forma, se maximizó la reflectancia de varias estructuras fotónicas de SP en dos regiones del espectro electromagnético (la primera de 350 a 1400 nm y la otra de 400 a 3000 nm) y se sintetizaron las estructuras que mostraron el menor espesor. Estas estructuras poseen BOD de diferente tamaño y están localizadas en el NIR. Adicionalmente, estas estructuras tienen menos de 100 pares de capas de SP. Finalmente, se diseñaron, sintetizaron y caracterizaron dos estructuras fotónicas multicapa de SP completamente oxidadas. Su diseño fue en la región de 250 a 1400

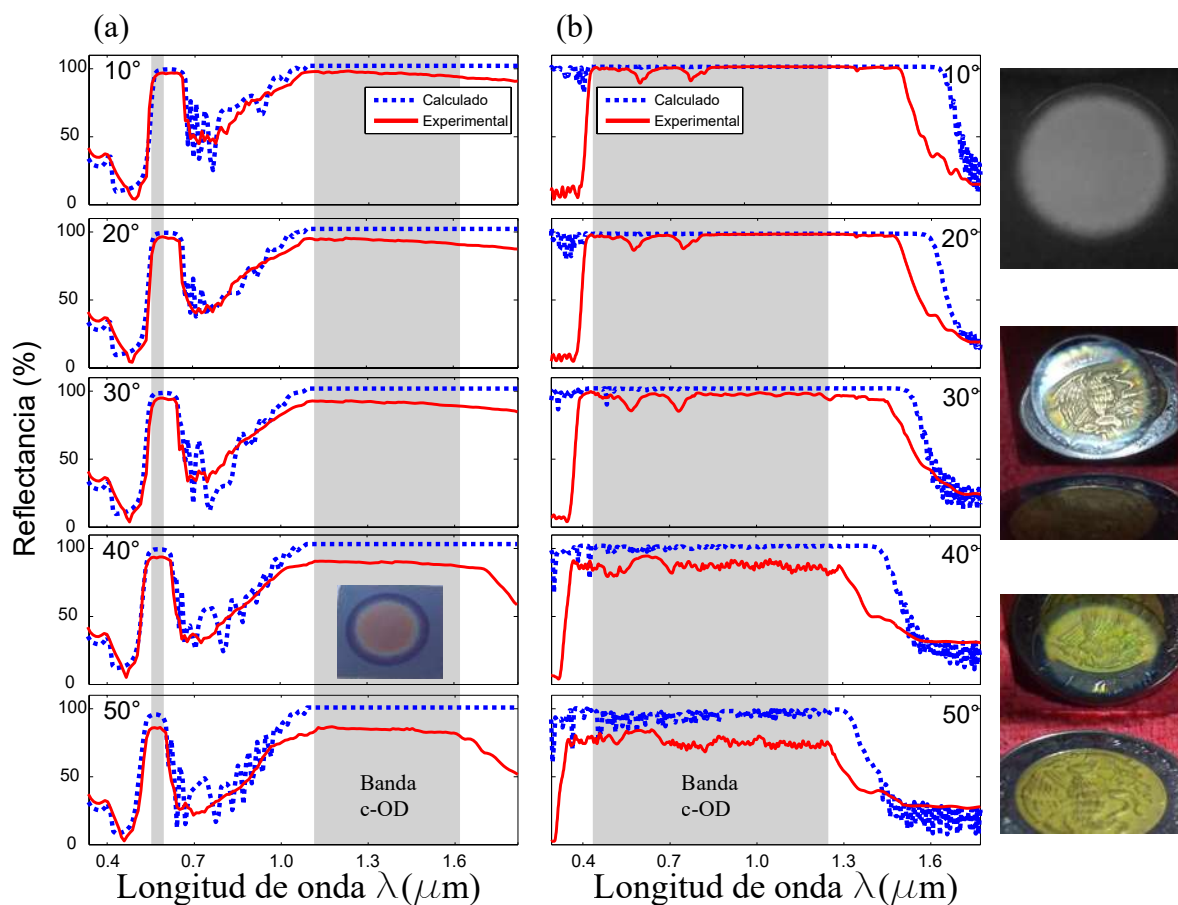


Figura 22. Espectros de reflectancia calculados y medidos a diferentes ángulos de incidencia, (a) antes y (b) después del proceso de oxidación de la estructura diseñada a  $45^\circ$  de incidencia. La reflectancia mostrada es para luz no polarizada. El área sombreada indica el gap cuasi-OD. En la columna de la derecha se muestran fotografías de la estructura reflejando un objeto a diferentes ángulos.

nm, utilizando estructuras tipo chirped con 400 pares de capas. Estas estructuras tienen una banda cuasi-OD de 755 nm y 830 nm cada una, localizadas en el Vis con un rango angular de  $10^\circ$  a  $50^\circ$ . Cabe mencionar que estas estructuras no se deformaron después de la OT. Más del 90% de la radiación solar que llega a la superficie terrestre está contenida en las regiones espectrales analizadas. Por lo tanto, una aplicación directa de las estructuras obtenidas en estas regiones son los concentradores solares o lentes de enfoque planas.

La segunda parte de esta tesis consiste en calcular la respuesta óptica de estruc-

turas fotónicas 2D, empleando un método numérico riguroso. El análisis se realiza en dos etapas. En la primera etapa, se calculan las estructuras de bandas de diferentes CF2Ds de red hexagonal con inclusiones cilíndricas. En la segunda etapa, se calcula la reflectancia de estructuras fotónicas en 2D que tienen un patrón de periodicidad hexagonal con inclusiones cilíndricas. Las paredes de las inclusiones cilíndricas pueden ser lisas o rugosas. Las estructuras fotónicas pueden ser de materiales dieléctricos o incluir metamateriales. Esta parte se desarrolla en el siguiente capítulo.

## Capítulo VI

---

# MÉTODO DE LA ECUACIÓN INTEGRAL

---

En este capítulo se describe una técnica rigurosa para modelar la interacción de la luz con un CF2D. La técnica se conoce como el Método de la Ecuación Integral (IEM<sup>1</sup>). Se presenta un planteamiento teórico que permite calcular la estructura de bandas para un CF2D infinito. Así mismo se consideran estructuras fotónicas con dimensiones finitas y con inclusiones circulares que tienen paredes lisas o rugosas para calcular sus propiedades ópticas. Los materiales de las estructuras pueden ser dieléctricos o metamateriales. La estructura cristalina de los CF2D que se estudia son de red hexagonal, aunque el IEM también se puede aplicar a otros tipos de redes cristalinas.

### VI.1. Descripción de la metodología

El IEM está basado en la solución numérica de la ecuación de Helmholtz usando ecuaciones integrales (Mendoza-Suárez *et al.*, 2006, 2007). Este método parte del segundo teorema integral de Green obteniendo ecuaciones integrales acopladas que involucran, como incógnitas el modo del campo y su derivada normal evaluados en las fronteras o

---

<sup>1</sup>Por sus siglas en inglés, Integral Equation Method.

contornos involucrados. La discretización del sistema resulta en una ecuación matricial homogénea cuya solución determina las funciones fuente, con las que se puede calcular la estructura de bandas.

El IEM se aplica para resolver la ecuación de Helmholtz independiente del tiempo sobre los contornos de las fronteras involucradas en la geometría del problema de estudio. Esto presenta algunas ventajas en comparación con otros métodos, ya que sólo toma en cuenta un número finito de puntos de muestreo a lo largo de los contornos de la celda unitaria para cuando el sistema es de longitud infinita, permitiendo así una menor cantidad de recursos computacionales.

Adicionalmente, las funciones fuente calculadas nos permiten modelar la propagación de ondas electromagnéticas a través de sistemas periódicos finitos, calculando la reflectancia y/o transmitancia de las estructuras fotónicas. Siendo esto, uno de los objetivos de este trabajo de investigación. Por lo tanto, el IEM se describe en dos partes. Primero se analizan las estructuras de bandas y posteriormente, la reflectancia como función de la frecuencia y del ángulo de incidencia. Un análisis detallado del método integral aplicado a sistemas infinitos se encuentra en la ref. (Centeno, 2014). Los CF2D con periodicidad cuadrada han sido analizados ampliamente en la ref. (Mendoza-Suárez *et al.*, 2006). En este trabajo de investigación se extiende el análisis a CF2D con periodicidad hexagonal formados por dieléctricos o metamateriales.

### VI.1.1. Ecuación de Helmholtz

Consideremos que los materiales involucrados en el CF2D no tienen densidad de carga ni de corriente ( $\rho = 0$ ,  $\mathbf{J} = 0$ ), de tal forma que las ecuaciones de Maxwell están dadas por

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0, \quad (58)$$

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

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\mu \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} \quad (60)$$

y

$$\nabla \times \mathbf{H} = \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}. \quad (61)$$

Si, además, los materiales son isotrópicos, se pueden emplear las siguientes relaciones constitutivas para los campos eléctrico y magnético

$$\mathbf{D} = \varepsilon \mathbf{E} \quad (62)$$

y

$$\mathbf{B} = \mu \mathbf{H}, \quad (63)$$

donde  $\varepsilon$  es la permitividad eléctrica y  $\mu$  es la permeabilidad magnética.

Aplicando el rotacional a la ec. (60) y sustituyendo las ecs. (59), (61) y (62), se obtiene la ecuación de onda para el campo eléctrico

$$\nabla^2 \mathbf{E} - \mu \varepsilon \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} = 0 \quad (64)$$

y similarmente para el campo magnético

$$\nabla^2 \mathbf{H} - \mu \varepsilon \frac{\partial^2 \mathbf{H}}{\partial t^2} = 0, \quad (65)$$

donde  $\mu \varepsilon = 1/v^2$ , siendo  $v$  la velocidad de la onda dentro del medio.

Por otra parte, si los campos  $\mathbf{E}$  y  $\mathbf{H}$  tienen una dependencia temporal armónica, es decir

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}(\mathbf{r}) e^{-i\omega t} \quad (66)$$

y

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{H}(\mathbf{r}) e^{-i\omega t}, \quad (67)$$

las ecuaciones de onda adquieren la forma de la ecuación de Helmholtz

$$\nabla^2 \mathbf{E}(\mathbf{r}) + k^2 \mathbf{E}(\mathbf{r}) = 0 \quad (68)$$

y

$$\nabla^2 \mathbf{H}(\mathbf{r}) + k^2 \mathbf{H}(\mathbf{r}) = 0, \quad (69)$$

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

Las ecs. (68) y (69) se pueden expresar en términos de una función  $\Psi$  que representa a cualquiera de los campos  $\mathbf{E}$  y  $\mathbf{H}$ ,

$$\nabla^2 \Psi(\mathbf{r}) + k^2 \Psi(\mathbf{r}) = 0. \quad (70)$$

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

Al estudiar sistemas fotónicos en 2D, la ecuación de Helmholtz se puede expresar como

$$\nabla^2 \Psi^j(\mathbf{r}) + k_j^2 \Psi^j(\mathbf{r}) = 0, \quad (71)$$

donde  $j = 1, 2, \dots$  indica el  $j$ -ésimo medio. Para resolver la ecuación anterior, se puede asociar una función de Green para el  $j$ -ésimo medio del sistema propuesto

$$\nabla^2 G^j(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + k_j^2 G^j(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -4\pi\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (72)$$

donde  $G^j(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  representa el propagador del campo debido a una fuente de luz puntual que emite a la frecuencia  $\omega$  en la posición  $\mathbf{r}'$  correspondiente a cada medio y  $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$  es la delta de Dirac. Para un medio homogéneo, el campo producido por un fuente puntual localizada en  $\mathbf{r}'$  posee simetría radial en  $R = |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$ , cuya solución 2D está dada por

$$G^j(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = i\pi H_0^{(1)}(k_j R) = i\pi H_0^{(1)}(k_j |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|), \quad (73)$$

siendo  $H_0^{(1)}(\zeta)$  la función de Hankel de primera especie y orden cero,  $\mathbf{r} = x\hat{i} + y\hat{j}$  y  $\mathbf{r}' = x'\hat{i} + y'\hat{j}$ .

### VI.1.3. Segunda identidad de Green

Del teorema de la divergencia se puede mostrar que si se tienen dos campos escalares  $\phi$  y  $\psi$  cualesquiera que sean continuos en el espacio definido por el volumen  $V$ , se obtiene la segunda identidad de Green

$$\int_V [\psi \nabla^2 \phi - \phi \nabla^2 \psi] dV = \oint_s [\psi \nabla \phi - \phi \nabla \psi] \cdot \hat{\mathbf{n}} dA. \quad (74)$$

Si los campos son invariantes de la variable  $z$ , la ec. (74) se puede reescribir como

$$\int_{-L/2}^{L/2} \oint_s [\psi \nabla^2 \phi - \phi \nabla^2 \psi] dA dz = \int_{-L/2}^{L/2} \oint_{\Gamma} [\psi \nabla \phi - \phi \nabla \psi] \cdot \hat{\mathbf{n}} ds dz, \quad (75)$$

por lo que la segunda identidad de Green se transforma en

$$\oint_s [\psi \nabla^2 \phi - \phi \nabla^2 \psi] dA = \oint_{\Gamma} [\psi \nabla \phi - \phi \nabla \psi] \cdot \hat{\mathbf{n}} ds, \quad (76)$$

para el caso 2D. Por convención la normal a la superficie se define hacia afuera. En caso de estar dirigida hacia adentro se introduce un signo negativo en la integral de contorno.

### VI.1.4. Representación integral

Multiplicando la ecuación de Helmholtz (ec. (71)) por  $G^j(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  y la ecuación asociada con la función de Green (ec. (72)) por  $-\Psi(\mathbf{r})$

$$G^j(\mathbf{r}, \mathbf{r}') [\nabla^2 \Psi^j(\mathbf{r}) + k^2 \Psi^j(\mathbf{r}) = 0] \quad (77)$$

y

$$-\Psi^j(\mathbf{r}) [\nabla^2 G^j(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + k_j^2 G^j(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -4\pi \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')], \quad (78)$$

que sumando e integrando el resultado en una superficie cerrada, se tiene que

$$\oint_S [G^j(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \nabla^2 \Psi^j(\mathbf{r}) - \Psi^j(\mathbf{r}) \nabla^2 G^j(\mathbf{r}, \mathbf{r}')] dA = 4\pi \oint_S \Psi^j(\mathbf{r}) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') dA. \quad (79)$$

Aplicando la segunda identidad de Green (ec. (76)), el lado izquierdo se puede reescribir como

$$\oint_{\Gamma} [G^j(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \nabla \Psi^j(\mathbf{r}) - \Psi^j(\mathbf{r}) \nabla G^j(\mathbf{r}, \mathbf{r}')] \cdot \hat{\mathbf{n}} ds = 4\pi \oint_S \Psi^j(\mathbf{r}) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') dA, \quad (80)$$

o bien, en términos de la derivada normal,  $\partial \Psi^j / \partial n' \equiv \hat{\mathbf{n}} \cdot \nabla \Psi^j(\mathbf{r})$ ,

$$\oint_{\Gamma_j} \left[ G^j(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \frac{\partial \Psi_j^j(\mathbf{r})}{\partial n'} - \Psi^j(\mathbf{r}') \frac{\partial G^j(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{\partial n'} \right] ds' = 4\pi \Psi^j(\mathbf{r}) \Theta(\mathbf{r}), \quad (81)$$

donde la integral de superficie se puede representar mediante el producto del campo por la función escalón:

$$\Theta(\mathbf{r}') = \begin{cases} 1 & \text{si } \mathbf{r}' \in S \\ 0 & \text{si } \mathbf{r}' \notin S, \end{cases} \quad (82)$$

y se ha intercambiado las variables  $\mathbf{r}$  y  $\mathbf{r}'$  para continuar con la convención de que  $\mathbf{r}$  representa la posición del observador (donde se mide el campo) y  $\mathbf{r}'$  representa la variable de integración que se desplaza sobre los contornos. En la ec. (81) la superficie  $S_j$  está limitada por el contorno cerrado  $\Gamma_j$  correspondiente y la normal (involucrada en las derivadas normales) va hacia afuera del contorno cerrado  $\Gamma_j$ .

### VI.1.5. Discretización de la ecuación integral

Las ecuaciones integrales que se han obtenido son integrales de línea cuya variable de integración es el parámetro de longitud de arco  $s$ . En la ec. (81) hay dos integrales de contorno, las cuales se etiquetan como

$$I_G = \frac{1}{4\pi} \oint_{\Gamma_j} G^j(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \frac{\partial \Psi^j(\mathbf{r})}{\partial n'} ds' \quad (83)$$

y

$$I_\Psi = \frac{1}{4\pi} \oint_{\Gamma_j} \Psi^j(\mathbf{r}') \frac{\partial G^j(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{\partial n'} ds'. \quad (84)$$

Para resolver numéricamente las ecs. (83) y (84) se realiza una discretización, ya que en el formalismo general, las integrales no se pueden resolver de manera exacta. Para

tal efecto, se divide el contorno  $\Gamma$  en  $n$  pequeños segmentos de longitud de arco  $\Delta s$ , por lo que

$$I_G = \frac{1}{4\pi} \sum_n \int_{s_n - \Delta s/2}^{s_n + \Delta s/2} G^j(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \frac{\partial \Psi^j(\mathbf{r})}{\partial n'} ds' \quad (85)$$

y

$$I_\Psi = \frac{1}{4\pi} \sum_n \int_{s_n - \Delta s/2}^{s_n + \Delta s/2} \Psi^j(\mathbf{r}') \frac{\partial G^j(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{\partial n'} ds'. \quad (86)$$

Si  $\Delta s$  es lo suficientemente pequeño para un muestreo finito, entonces se puede considerar que el campo  $\Psi^j$  y su derivada normal  $\partial \Psi^j / \partial n'$  son aproximadamente constantes.

Así que las ecuaciones integrales se pueden reescribir como

$$I_G = \frac{1}{4\pi} \sum_n \Phi_n^j \int_{s_n - \Delta s/2}^{s_n + \Delta s/2} G^j(\mathbf{r}, \mathbf{r}') ds' \quad (87)$$

y

$$I_\Psi = \frac{1}{4\pi} \sum_n \Psi_n^j \int_{s_n - \Delta s/2}^{s_n + \Delta s/2} \frac{\partial G^j(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{\partial n'} ds', \quad (88)$$

donde se ha llamado

$$\Psi_n^j = \Psi^j(\mathbf{r}') \Big|_{\mathbf{r}' = \mathbf{r}_n} \quad (89)$$

y

$$\Phi_n^j = \frac{\partial \Psi^j(\mathbf{r}')}{\partial n'_j} \Big|_{\mathbf{r}' = \mathbf{r}_n}. \quad (90)$$

Evaluando las integrales de las ecs. (87) y (88) en el punto de observación  $\mathbf{r} = \mathbf{r}_m$ , además, definiendo los elementos de matriz

$$L_{mn} = \frac{1}{4\pi} \int_{s_n - \Delta s/2}^{s_n + \Delta s/2} G^j(\mathbf{r}_m, \mathbf{r}') ds' \quad (91)$$

y

$$N_{mn} = \frac{1}{4\pi} \int_{s_n - \Delta s/2}^{s_n + \Delta s/2} \frac{\partial G^j(\mathbf{r}_m, \mathbf{r}')}{\partial n'} ds', \quad (92)$$

donde el subíndice  $m$  denota el punto de observación y el subíndice  $n$  al punto de integración. Sustituyendo la ec. (73) en las ecs. (91) y (92) cuando  $\Delta s$  es muy pequeño,

se tiene que

$$L_{mn} \approx \frac{i\Delta s}{4} H_0^{(1)}(k_j R_{mn}) \quad (93)$$

y

$$N_{mn} \approx \frac{i\Delta s}{4} k_j \hat{\mathbf{n}}_n \cdot \frac{\mathbf{R}_{mn}}{R_{mn}} H_1^{(1)}(k_j R_{mn}), \quad (94)$$

siendo

$$\hat{\mathbf{n}}_n \cdot \mathbf{R}_{mn} = -y'(s)(x_m - x_n) + x'(s)(y_m - y_n), \quad (95)$$

$$R_{mn} = \sqrt{(x_m - x_n)^2 + (y_m - y_n)^2}, \quad (96)$$

y  $H_1^{(1)}(x)$  es la función de Hankel de primera especie y primer orden. Como toda función de Green posee una singularidad en  $\mathbf{r} = \mathbf{r}'$ , en el caso de la función de Green en 2D, la singularidad es removible y las integrales pueden ser calculadas si se aplica un proceso de límite, es decir:

$$L_{mn} = \frac{1}{4\pi} \lim_{\zeta \rightarrow 0} \int_{s_n - \Delta s/2}^{s_n + \Delta s/2} G^j(\mathbf{r}_m + \zeta \hat{\mathbf{n}}_m, \mathbf{r}') ds' \quad (97)$$

y

$$N_{mn} = \frac{1}{4\pi} \lim_{\zeta \rightarrow 0} \int_{s_n - \Delta s/2}^{s_n + \Delta s/2} \frac{\partial G^j(\mathbf{r}_m + \zeta \hat{\mathbf{n}}_m, \mathbf{r}')}{\partial n'} ds', \quad (98)$$

siendo  $\zeta$  una cantidad infinitesimal.

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

$$L_{mn}^{(j)} = \frac{i\Delta s}{4} H_0^{(1)}(k_j R_{mn}) \quad (99)$$

y

$$N_{mn}^{(j)} = \frac{i\Delta s}{4} k_j \hat{\mathbf{n}}_n \cdot \frac{\mathbf{R}_{mn}}{R_{mn}} H_1^{(1)}(k_j R_{mn}). \quad (100)$$

Para el caso de los elementos de la diagonal ( $m = n$ ), el integrando tiene una singularidad en el punto medio del intervalo de integración. Afortunadamente, la singularidad es integrable (el procedimiento detallado se encuentra en (Centeno, 2014)) y los resultados son:

$$L_{mn}^{(j)} = \frac{i\Delta s}{4} H_0^{(1)} \left( k \frac{\Delta s}{2e} \right) \quad (101)$$

y

$$N_{mn}^{(j)} = \frac{1}{2} + \frac{\Delta s}{4\pi} \hat{\mathbf{n}}_n \cdot \hat{\mathbf{t}}'_n, \quad (102)$$

siendo

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

De manera general, los elementos de matriz se reescriben como:

$$L_{mn}^{(j)} = [1 - \delta_{mn}] \frac{i\Delta s}{4} H_0^{(1)}(k_j R_{mn}) + \left[ \frac{i\Delta s}{4} H_0^{(1)} \left( k \frac{\Delta s}{2e} \right) \right] \delta_{mn} \quad (104)$$

y

$$N_{mn}^{(j)} = [1 - \delta_{mn}] \frac{i\Delta s}{4} k_j \frac{\mathbf{R}_{mn}}{R_{mn}} H_1^{(1)}(k_j R_{mn}) + \left[ \frac{1}{2} + \frac{\Delta s}{4\pi} \hat{\mathbf{n}}_n \cdot \hat{\mathbf{t}}'_n \right] \delta_{mn}. \quad (105)$$

Por lo tanto, la ecuación integral (ec. (81)) se puede resolver mediante una ecuación algebraica

$$\sum_{n=1}^N L_{mn}^{(j)} \Phi_n^{(j)} - \sum_{n=1}^N N_{mn}^{(j)} \Psi_n^{(j)} = \Psi_n^{(j)} \Theta(\mathbf{r}), \quad (106)$$

siendo  $N$  el número total de puntos de discretización.

## VI.2. Estructuras de bandas de CF2Ds de red hexagonal

Consideremos una celda unitaria hexagonal compuesta por dos materiales con diferentes funciones dieléctricas,  $\varepsilon_1$  y  $\varepsilon_2$ , como se muestra en la fig. 23. La inclusión puede ser de geometría arbitraria. En este desarrollo se utilizará la inclusión circular.

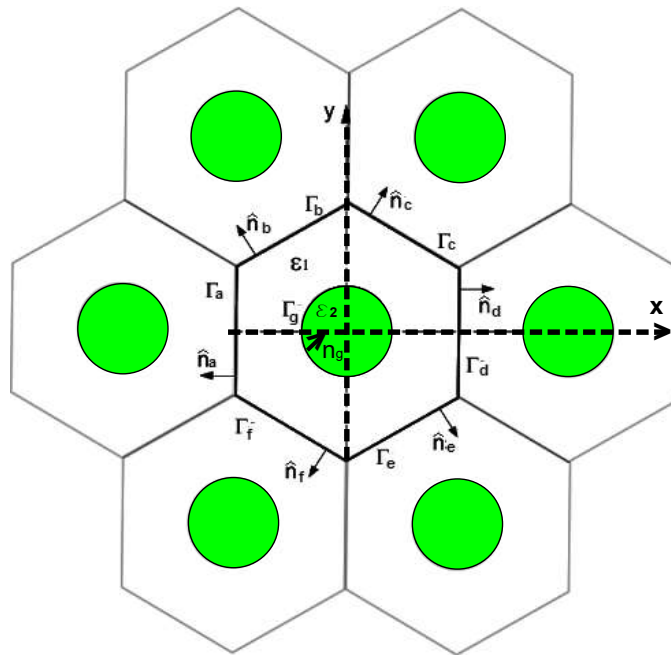


Figura 23. Celda unitaria de un CF2D con una red hexagonal y una inclusión circular con su vector normal  $\hat{\mathbf{n}}$  perpendicular al contorno  $\Gamma_j$ .

La región 1 está delimitada por los contornos  $s_1 = \Gamma_a + \Gamma_b + \Gamma_c + \Gamma_d + \Gamma_e + \Gamma_f$  y  $s_2 = \Gamma_e$ . El contorno  $s_2$  también actúa como límite de la región 2. Los vectores normales  $\hat{\mathbf{n}}_j$  están directamente asociados a los contornos  $\Gamma_j$  y van hacia afuera de cada región.

Al aplicar la ecuación algebraica general (ec. (106)) a la celda unitaria hexagonal, se obtiene un conjunto de  $N_{abcdef} + 2N_g$  ecuaciones algebraicas homogéneas, donde cada contorno es representado por un número finito de puntos (igualmente espaciados)  $N_a$  para  $\Gamma_a$ ,  $N_b$  para  $\Gamma_b$  y así sucesivamente, por lo que  $N_{abcdef} = N_a + N_b + N_c + N_d + N_e + N_f$ .

Así, las ecuaciones discretizadas están representadas por:

$$\begin{aligned}
& \sum_{n=1}^{N_a} N_{mn}^{(1)} \Psi_a^{jn} - \sum_{n=1}^{N_a} L_{mn}^{(1)} \Phi_a^n + \sum_{n=1+N_a}^{N_{ab}} N_{mn}^{(1)} \Psi_b^{jn} - \sum_{n=1+N_a}^{N_{ab}} L_{mn}^{(1)} \Phi_b^n \\
& + \sum_{n=1+N_{ab}}^{N_{abc}} N_{mn}^{(1)} \Psi_c^{jn} - \sum_{n=1+N_{ab}}^{N_{abc}} L_{mn}^{(1)} \Phi_c^n + \sum_{n=1+N_{abc}}^{N_{abcd}} N_{mn}^{(1)} \Psi_d^{jn} - \sum_{n=1+N_{abc}}^{N_{abcd}} L_{mn}^{(1)} \Phi_d^n \\
& + \sum_{n=1+N_{abcd}}^{N_{abcde}} N_{mn}^{(1)} \Psi_e^{jn} - \sum_{n=1+N_{abcd}}^{N_{abcde}} L_{mn}^{(1)} \Phi_e^n + \sum_{n=1+N_{abcde}}^{N_{abcdef}} N_{mn}^{(1)} \Psi_f^{jn} \\
& - \sum_{n=1+N_{abcde}}^{N_{abcdef}} L_{mn}^{(1)} \Phi_f^n + \sum_{n=1+N_{abcdef}}^{N_{abcdef+N_g}} N_{mn}^{(1)} \Psi_g^{jn} - \sum_{n=1+N_{abcdef}}^{N_{abcdef+N_g}} L_{mn}^{(1)} \Phi_g^n \\
& = 0
\end{aligned} \tag{107}$$

y

$$\sum_{n=1+N_{abcdef+N_g}}^{N_{abcdef+2N_g}} N_{mn}^{(2)} \Psi_g^{jn} - \sum_{n=1+N_{abcdef+N_g}}^{N_{abcdef+2N_g}} L_{mn}^{(2)} \tilde{\Phi}_g^n = \Psi_g^{jn}. \tag{108}$$

A partir de las ecuaciones de Maxwell (ecs. (58-61)) se puede probar que las condiciones de continuidad para el contorno  $\Gamma_g$  se denotan por:

$$\tilde{\Psi}_g^{jn} = \Psi_g^{jn} \tag{109}$$

y

$$\tilde{\Phi}_g^n = \frac{f_2}{f_1} \Phi_g^n, \tag{110}$$

siendo  $f_j = \mu_j$  para la polarización TE y  $f_j = \varepsilon_j$  para la polarización TM con  $j = 1$  y 2.

Debido a que el sistema es periódico e infinito podemos aplicar el teorema de Bloch para obtener

$$\Psi^j(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = \Psi^j(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{R}}, \tag{111}$$

donde  $\mathbf{K}$  es el vector de Bloch bidimensional y  $\mathbf{R} = D_x \hat{i} + D_y \hat{j}$  con  $D_x$  y  $D_y$  representan las dimensiones de la celda unitaria. Las condiciones de periodicidad para un CF2D de

red hexagonal son

$$\Psi_d^{jn} = e^{ik_x D} \Psi_a^{jn}, \quad (112)$$

$$\Psi_e^{jn} = e^{-iD\frac{1}{2}(k_x - \sqrt{3}k_y)} \Psi_b^{jn}, \quad (113)$$

$$\Psi_f^{jn} = e^{iD\frac{1}{2}(k_x + \sqrt{3}k_y)} \Psi_c^{jn}, \quad (114)$$

$$\Phi_d^n = -e^{ik_x D} \Phi_a^n, \quad (115)$$

$$\Phi_e^n = -e^{-iD\frac{1}{2}(k_x - \sqrt{3}k_y)} \Phi_b^n \quad (116)$$

y

$$\Phi_f^n = -e^{iD\frac{1}{2}(k_x + \sqrt{3}k_y)} \Phi_c^n \quad (117)$$

Ahora aplicando las condiciones de continuidad (ecs. (109) y (110)) y de periodicidad (ecs. (112)-(117)), a las ecuaciones discretizadas (ecs. (107) y (108)), se tiene

$$\begin{aligned} & \sum_{n=1}^{N_a} N_{mn}^{(1)} \Psi_a^{jn} - \sum_{n=1}^{N_a} L_{mn}^{(1)} \Phi_a^n + \sum_{n=1+N_a}^{N_{ab}} N_{mn}^{(1)} \Psi_b^{jn} - \sum_{n=1+N_a}^{N_{ab}} L_{mn}^{(1)} \Phi_b^n \\ & + \sum_{n=1+N_{ab}}^{N_{abc}} N_{mn}^{(1)} \Psi_c^{jn} - \sum_{n=1+N_{ab}}^{N_{abc}} L_{mn}^{(1)} \Phi_c^n + e^{ik_x D} \sum_{n=1+N_{abc}}^{N_{abcd}} N_{mn}^{(1)} \Psi_a^{jn} \\ & + e^{ik_x D} \sum_{n=1+N_{abc}}^{N_{abcd}} L_{mn}^{(1)} \Phi_a^n + e^{-iD\frac{1}{2}(k_x - \sqrt{3}k_y)} \sum_{n=1+N_{abcd}}^{N_{abcde}} N_{mn}^{(1)} \Psi_b^{jn} \\ & + e^{-iD\frac{1}{2}(k_x - \sqrt{3}k_y)} \sum_{n=1+N_{abcd}}^{N_{abcde}} L_{mn}^{(1)} \Phi_b^n + e^{iD\frac{1}{2}(k_x + \sqrt{3}k_y)} \sum_{n=1+N_{abcde}}^{N_{abcdef}} N_{mn}^{(1)} \Psi_c^{jn} \\ & + e^{iD\frac{1}{2}(k_x + \sqrt{3}k_y)} \sum_{n=1+N_{abcde}}^{N_{abcdef}} L_{mn}^{(1)} \Phi_c^n + \sum_{n=1+N_{abcdef}}^{N_{abcdef}+N_g} N_{mn}^{(1)} \Psi_g^{jn} - \sum_{n=1+N_{abcdef}}^{N_{abcdef}+N_g} L_{mn}^{(1)} \Phi_g^n \\ & = 0 \end{aligned} \quad (118)$$

y

$$\sum_{n=1+N_{abcdef}}^{N_{abcdef}+2N_g} (N_{mn}^{(2)} - \delta_{mn}) \Psi_e^{jn} - \frac{f_2}{f_1} \sum_{n=1+N_{abcdef}}^{N_{abcdef}+2N_e} L_{mn}^{(2)} \Phi_e^n = 0. \quad (119)$$

Estas ecuaciones constituyen un sistema lineal  $M(\omega)F(\omega) = 0$  que tiene una matriz cuadrada  $M$  de dimensión  $N_{abcdef} + 2N_e$ , que depende de la frecuencia  $\omega$  y el vector

de Bloch  $\mathbf{K}$ . Dado que el sistema es homogéneo, una solución no trivial se obtiene si el determinante de tal matriz es cero. Para determinar la frecuencia  $\omega$ , se define la función

$$D(K, \omega) = \ln |\det(M)|, \quad (120)$$

que obtiene los puntos mínimos locales. Estos mínimos locales representan la relación de dispersión numérica  $\omega = \omega(K)$  que determina la estructura de bandas.

### VI.2.1. CF2D formado por dieléctricos

En la ref. (Mendoza-Suárez *et al.*, 2006) se hizo un amplio estudio de la estructura de bandas para un CF2D infinito de periodicidad cuadrada con diferentes inclusiones utilizando el IEM. En la fig. 24 se muestran la estructura de bandas para un par de CF2D publicada por Plihal y Maradudin (Plihal and Maradudin, 1991), las cuales fueron obtenidas utilizando el método de ondas planas (PWM<sup>2</sup>) y se comparan con las obtenidas con el método descrito anteriormente. La fig. 24(a) muestra la estructura de bandas de un CF2D que consiste de un arreglo periódico de cilindros con una constante dieléctrica  $\varepsilon_2 = 5$  embebidos en el vacío  $\varepsilon_1 = 5$  y con una fracción de llenado de  $f = 0.169$  o radio de la inclusión  $r_c = 0.2158$ , las cuales son obtenidas bajo polarización TE. La segunda estructura consiste en un arreglo periódico de huecos cilíndricos maquinados en una matriz dieléctrica. La fig. 24(b) se presenta la estructura de bandas con las constantes dieléctricas de  $\varepsilon_1 = 12.5$  y  $\varepsilon_2 = 1$  para una fracción de llenado de  $f = 0.6$  o radio de las inclusiones de  $r_c = 0.4067$ , las cuales están bajo polarización TM. El cálculo de la estructura de bandas está en términos de la frecuencia reducida  $\bar{\omega} = \omega D / 2\pi c$  y la magnitud del vector de onda reducido  $\bar{k} = kD / 2\pi$  en la primera zona de Brillouin. El parámetro de red fue tomado como  $D = 1$  (en unidades arbitrarias, u.a.). En las

---

<sup>2</sup>Por sus siglas en inglés, Plane Wave Method.

figs. 24(a) y 24(b) se puede observar que las estructuras de bandas obtenidas con nuestro método numérico muestran buena concordancia con los resultados obtenidos con el PWM; por lo tanto, el IEM constituye una herramienta numérica confiable para obtener la estructura de bandas de los CF2D.

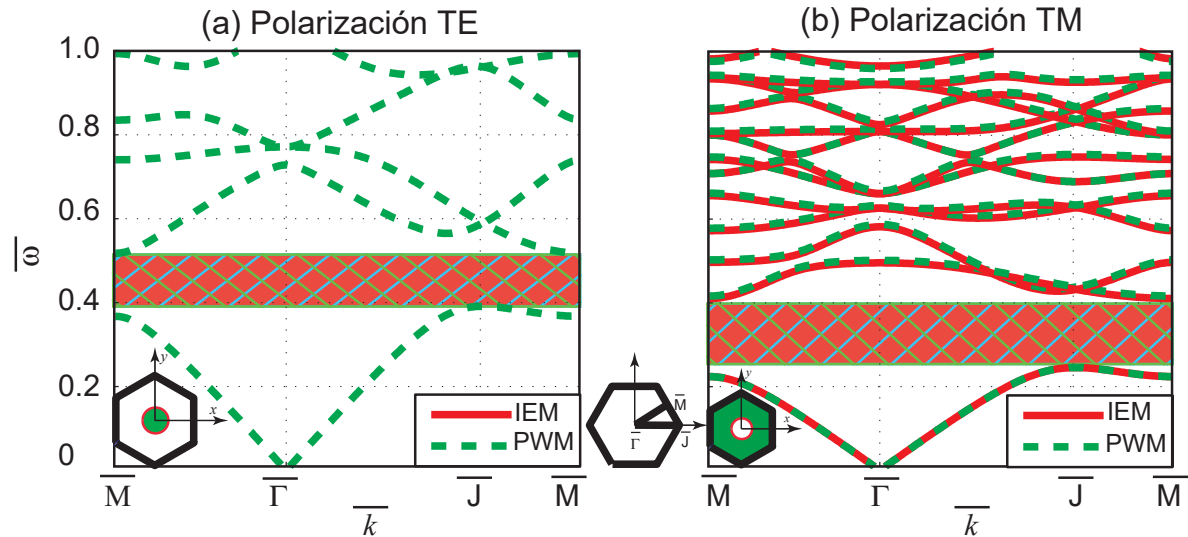


Figura 24. Estructuras de bandas fotónicas de un CF2D de red hexagonal para (a)  $\varepsilon_1 = 1$  y  $\varepsilon_2 = 5$  con  $f = 0.169$  bajo polarización TE y (b)  $\varepsilon_1 = 12.5$  y  $\varepsilon_2 = 1$  con  $f = 0.6$  para polarización TM.

### Efecto de la rugosidad en la estructura de bandas

A menudo ocurre que las estructuras fotónicas utilizadas en los experimentos de difracción presentan una rugosidad en la escala de la longitud de onda. Por tanto, es de interés explorar las consecuencias de tener rugosidades en las paredes que definen las inclusiones de un CF2D. El perfil de la superficie rugosa en la pared de la inclusión de sección circular se obtiene mediante la realización de un proceso aleatorio de correlación gaussiano que obedece a una función de densidad de probabilidad exponencial negativa (PDF) (Maradudin *et al.*, 1990). Este es un modelo determinista que siempre producirá el mismo perfil de superficie irregular a partir de una condición o estado inicial dado. Lo

cual es necesario para mantener la condición de perfecta periodicidad ya que nuestro estudio se basa en un CF2D.

En la fig. 25, se presentan los cálculos de las estructuras de bandas para dos arreglos periódicos diferentes. El primero corresponde a cilindros dieléctricos infinitamente largos embebidos en aire, mientras que el segundo está formado por orificios perforados en una matriz dieléctrica de sección transversal arbitraria. En ambas estructuras, sus intersecciones con un plano perpendicular forman una red hexagonal. Las curvas discontinuas mostradas corresponden a una realización independiente de la rugosidad con una longitud de correlación de  $\delta = 0.05$  y una desviación estándar de alturas de  $\sigma = 0.02$  y las curvas sólidas para un perfil liso de la sección transversal de inclusiones. Las secciones lisas y rugosas se muestrearon a intervalos  $\Delta s = 1/30$ . Las estructuras de banda para el caso de cilindros dieléctricos ( $\varepsilon_2 = 8.9$ ) embebidos en aire ( $\varepsilon_1 = 1$ ) con fracción de llenado  $f = 0.12$  o el radio de inclusiones cilíndricas circulares  $r_c = 0.1954$ , bajo ambos tipos de polarizaciones se muestran en las figs. 25(a) y (b). Para el segundo caso de una matriz periódica de orificios cilíndricos perforados ( $\varepsilon_2 = 1$ ) en una placa dieléctrica ( $\varepsilon_1 = 8,9$ ) con el mismo valor de las fracciones de llenado, las estructuras de las bandas se muestran en las figs. 25(c) y (d) para ambos tipos de polarizaciones.

Es importante mencionar que se ha elegido una rugosidad relativamente pequeña y que, por lo tanto, no se han mostrado cambios significativos en las estructuras analizadas. Sin embargo, hay sistemas en los cuales existe una ligera variación en la posición de algunas secciones de las bandas debido a la rugosidad. Por ejemplo, las estructuras de bandas de CF2Ds de red cuadrada mostradas en (Castillo-Gallardo *et al.*, 2019) tienen una nueva brecha de banda fotónica estrecha en el rango de frecuencia entre 0.9625 y 0.9670. También, en el caso de los 2DPC que incluyen LHM, como se verá a continuación, es importante considerar los efectos de la rugosidad en las superficies de

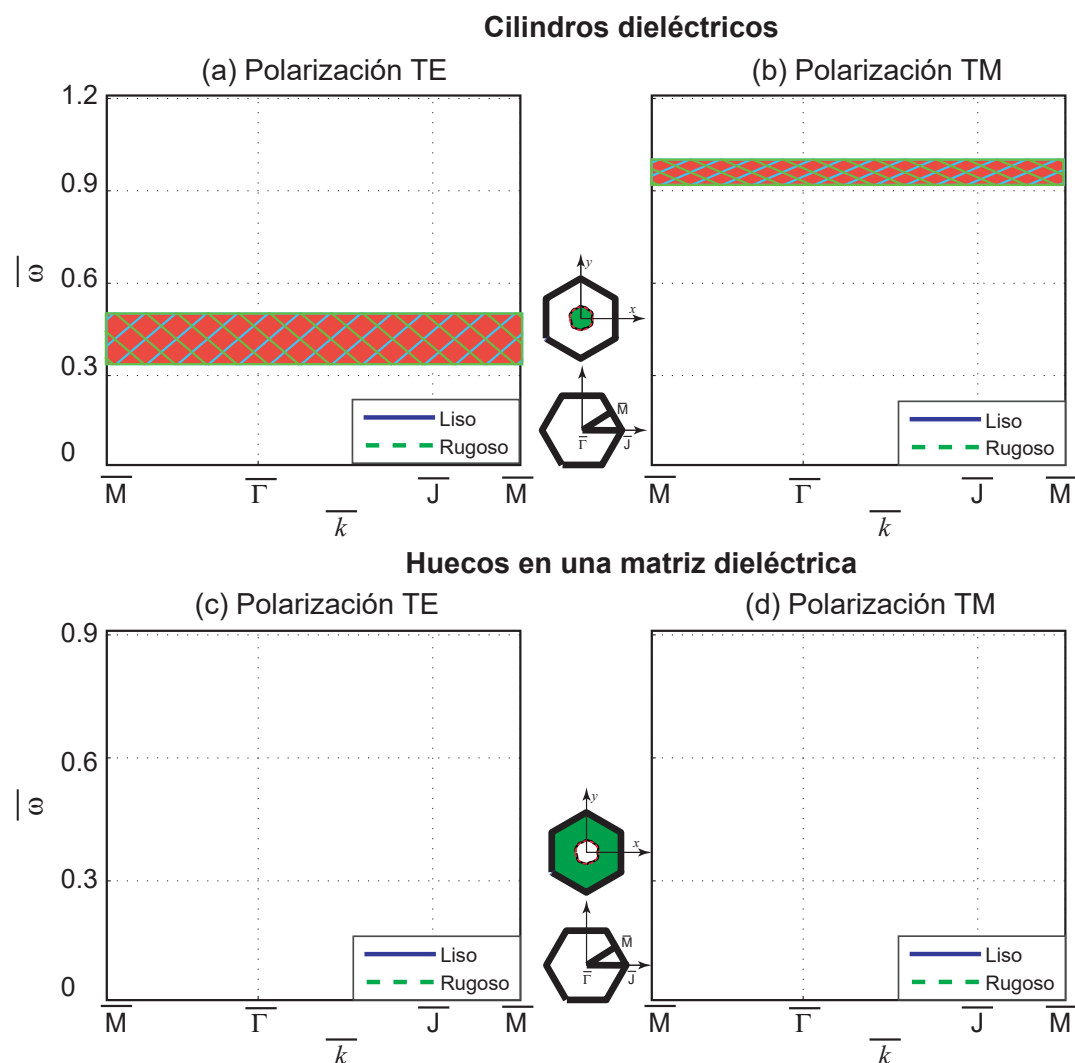


Figura 25. Estructuras de bandas fotónicas de CF2Ds dieléctricos de red hexagonal con fracción de llenado  $f = 0.12$  y constantes dieléctricas  $\varepsilon_1 = 1$  y  $\varepsilon_2 = 8.9$  bajo (a) polarización TE y (b) polarización TM, y  $\varepsilon_1 = 8.9$  y  $\varepsilon_2 = 1$  para (c) polarización TE y (d) polarización TM. El recuadro muestra la celda unitaria en el espacio real y la primera zona de Brillouin para la estructura periódica estudiada. Las curvas sólidas corresponden a superficies de inclusión lisas y las líneas discontinuas representan superficies de inclusión rugosas.

las inclusiones.

### VI.2.2. CF2D formado por metamateriales

Para modelar el LHM dispersivo, las propiedades ópticas están dadas por la función dieléctrica

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

y la permeabilidad magnética

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

Estas funciones se muestran en la fig. 26 con los parámetros  $\omega_p = 10c/D$ ,  $\omega_0 = 4c/D$  y  $F = 0.56$ , siendo  $c$  la velocidad de la luz en el vacío y  $D$  el parámetro de red (Bria *et al.*, 2004). La región donde este LHM presenta índice de refracción negativo es en el rango de frecuencias comprendido de  $\omega_0 < \omega < \omega_{LH}$ , aquí  $\omega_{LM} = \omega_0/\sqrt{1-F}$ . En nuestros análisis, se consideró  $D = 1 \mu\text{m}$ . Con esto, las frecuencias de plasma y de resonancia en unidades reducidas son  $\bar{\omega}_p = 1.592$  y  $\bar{\omega}_0 = 0.637$ , respectivamente.

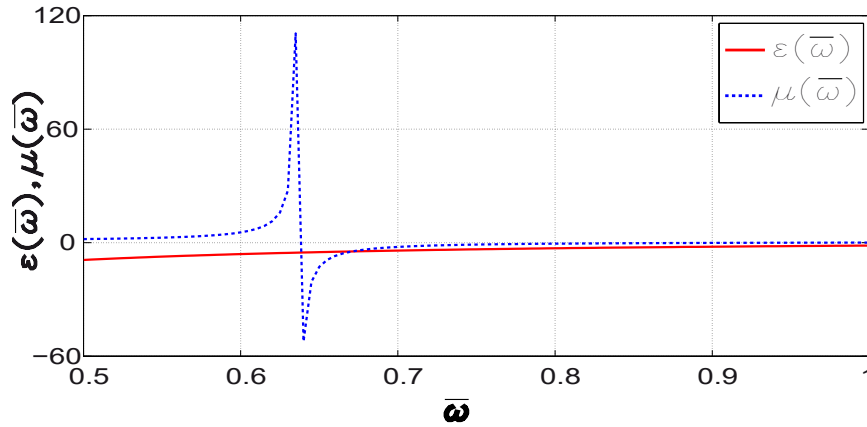


Figura 26. Función dieléctrica relativa y permeabilidad magnética relativa de un LHM dispersivo en función de la frecuencia.

### Estructuras de bandas y el efecto de la rugosidad

En la fig. 27 se muestran los cálculos de la estructura de bandas para varios CF2D que incluyen LHM dispersivo. Los CF2D pueden ser cilindros infinitamente largos y

paralelos embebidos en aire o huecos perforados en una matriz de LHM dispersivo de sección transversal arbitraria, cuyas intersecciones con un plano perpendicular forman una red hexagonal. Los parámetros de la longitud de correlación y la desviación estándar de las alturas son los mismos que se emplearon en los CF2D dieléctricos. Los contornos

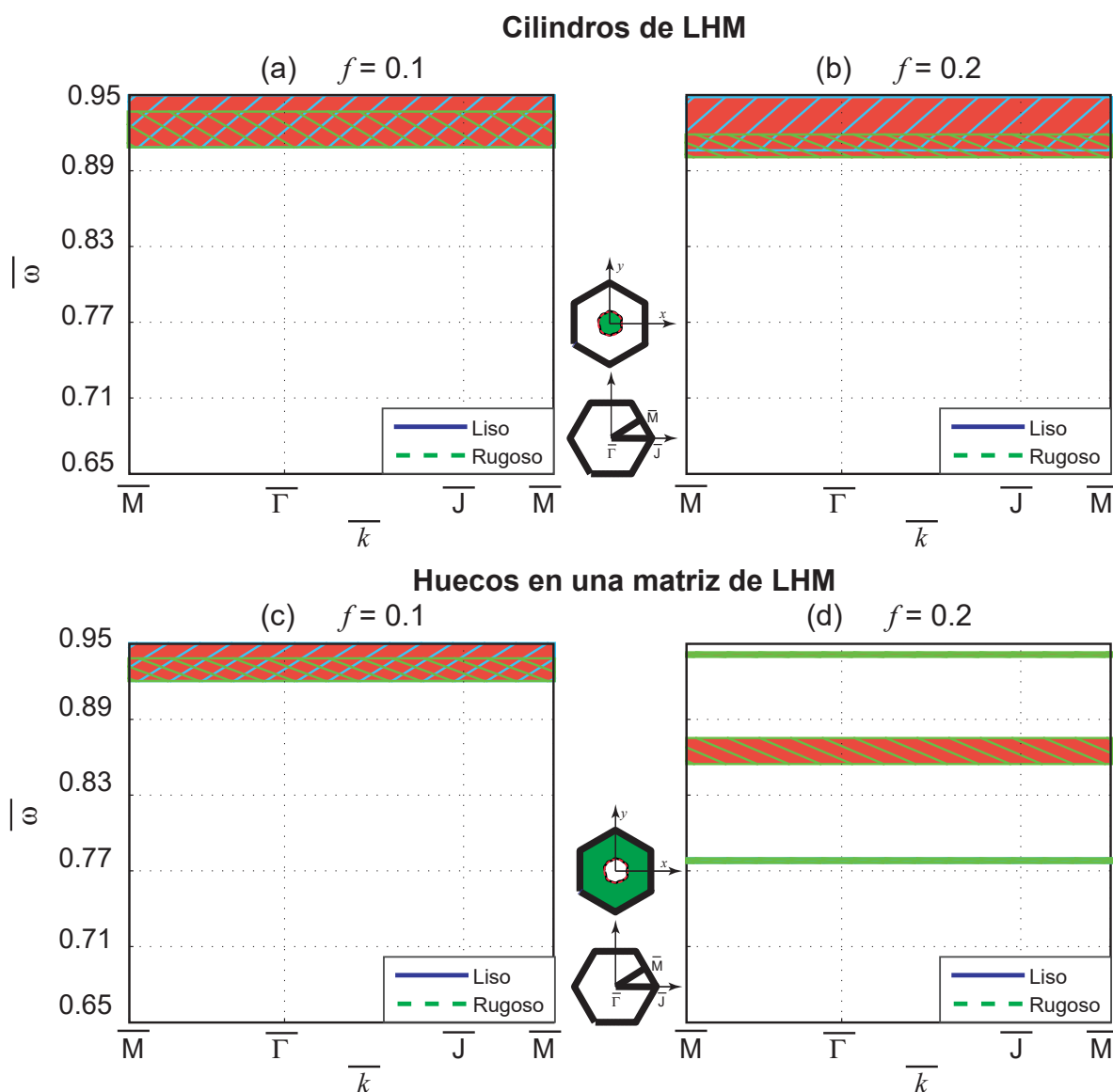


Figura 27. Estructuras de bandas fotónicas de un CF2D de red hexagonal con cilindros de LHM dispersivos embebidos en aire con (a)  $f = 0.1$  y (b)  $f = 0.2$ , y agujeros cilíndricos perforados en una placa de LHM dispersivo con (c)  $f = 0.1$  y (d)  $f = 0, 2$ , bajo polarización TM. Las curvas continuas corresponden al caso liso y las líneas discontinuas representan el caso rugoso.

lisos y rugosos se muestrearon a intervalos  $\Delta s = 1/60$ . En las figs. 27(a) y (b) se muestran las estructuras de banda para el caso de cilindros de LHM con fracción de llenado de  $f = 0.1$  ( $r_c = 0.1660$ ) y  $f = 0.2$  ( $r_c = 0.2347$ ), bajo polarización TM, respectivamente. Para el segundo caso de una serie periódica de orificios cilíndricos perforados ( $\varepsilon_1 = 1$ ) en una placa de LHM dispersivo, las estructuras de las bandas se ilustran en las figs. 27(c) y 27(d) para  $f = 0.1$  y  $f = 0.2$ , respectivamente, bajo polarización TM. En estas gráficas, las curvas discontinuas corresponden a un perfil rugoso y las curvas sólidas corresponden a un perfil liso de las secciones transversales de las inclusiones.

Para ambos tipos de estructuras analizadas se observa que, al tomar en cuenta la rugosidad en las superficies de inclusión, surgen bandas fotónicas en regiones donde no las había cuando la superficie fue lisa y/o que el gap fotónico disminuye. Por ejemplo, en las figs. 27(a) y 27(c) el gap fotónico disminuye en los rangos de frecuencias  $[0.90, 0.95]$  y  $[0.92, 0.95]$ , respectivamente. En la estructura de bandas de la fig. 27(d) se observa que surgen nuevos gaps fotónicos en los rangos de frecuencia de  $[0.85, 0.88]$  y  $[0.93, 0.94]$ , debido a la rugosidad de las paredes de las inclusiones.

Es importante señalar que al cambiar la forma del perfil rugoso mediante otro valor de la semilla generadora, se modifica el efecto de la rugosidad en las paredes de inclusión. A modo de ejemplo, en la fig. 28(a) se muestra la estructura de banda fotónica obtenida bajo la polarización de TM con diferente realización de un proceso aleatorio de correlación gaussiana. Los parámetros de las longitudes de correlación y las desviaciones estándar de las alturas son los mismos que los utilizados para la fig. 27(b). Los resultados numéricos muestran que si se considera una nueva realización, la nueva estructura de bandas cambia ligeramente. Otro ejemplo, es el caso en el que el perfil se modela con un proceso aleatorio rectangular. En la fig. 28(b) se muestra la estructura

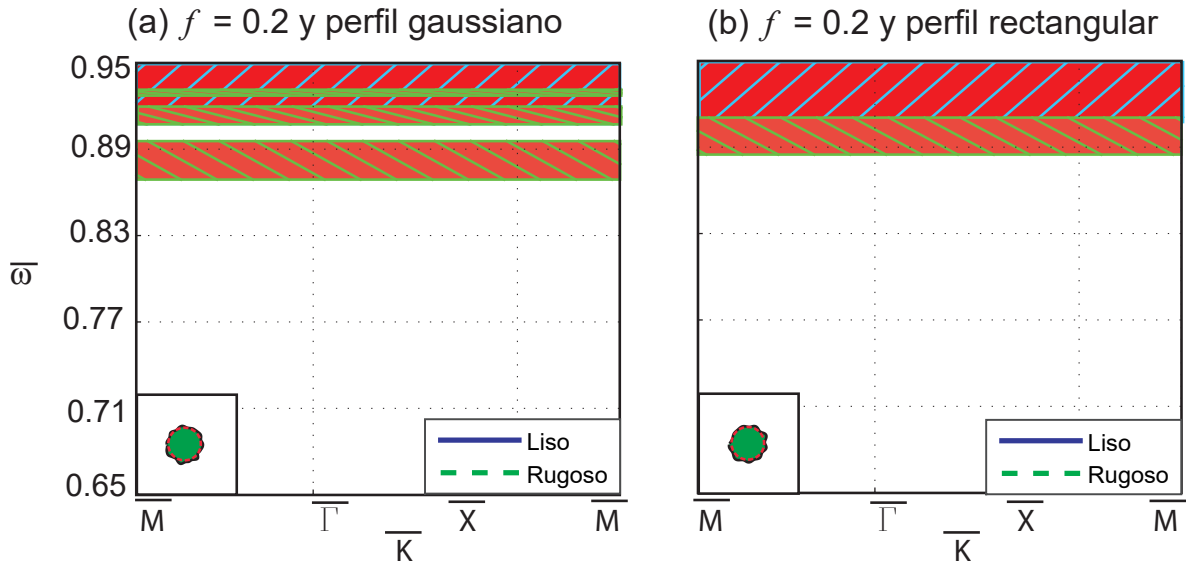


Figura 28. (a) Estructura de bandas fotónicas de un CF2D con cilindros de LHM dispersivo y  $f = 0.2$  obtenidas con diferentes realizaciones de un proceso aleatorio gaussiano, bajo polarización TM. (b) De manera similar, la estructura de banda obtenidas con un proceso aleatorio rectangular. Las curvas sólidas corresponden al caso liso y las curvas discontinuas al caso rugoso.

de bandas con los mismos parámetros de rugosidad correspondientes a la fig. 27(b). Además, se observa que el gap fotónico asociado al CF2D con superficies lisas cambia su posición en frecuencia, haciéndose más estrecho o generando otros gaps en las mismas regiones. Por lo tanto, las posiciones de los gaps fotónicos y los detalles de la estructura de la banda dependen de la realización particular del perfil de la superficie rugosa, pero no del proceso aleatorio utilizado para generarlo.

Los cálculos de las estructuras de bandas, bajo la polarización TE, muestran resultados similares. Concretamente, en la fig. 29(a) se muestra la estructura de bandas para un CF2D con cilindros de LHM y en la fig. 29(b) se mapea la estructura de bandas para una placa infinita de LHM con agujeros cilíndricos. En estos sistemas, la sección rugosa se muestreó a intervalos  $\Delta s = 1/38$  y la sección lisa con  $\Delta s = 1/19$ . Se consideraron los parámetros de la longitud de correlación  $\delta = 0.15$  y la desviación estándar de alturas  $\sigma = 0.03$ . El radio de los cilindros y/o huecos es de  $r_c = 0.373$  ( $f = 0.5$ ). En

ambos casos, las curvas discontinuas corresponden a una superficie con rugosidad y las curvas sólidas corresponden al caso liso. Los otros casos tomados en cuenta en las figs. 27–29 se han estudiado, pero no se presentan aquí porque los resultados no aportan mucho a las conclusiones.

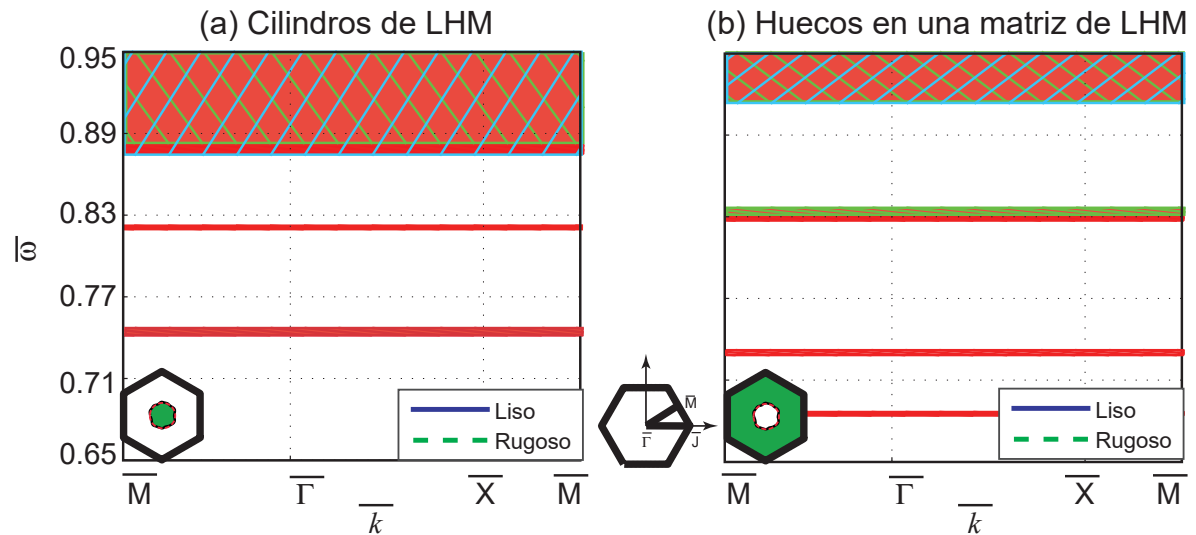


Figura 29. Estructuras de bandas fotónicas de un par de CF2Ds de red hexagonal con (a) cilindros de LHM dispersivo embebidos en aire, y (b) orificios perforados en una matriz de LHM con  $f = 0.5$ , que se obtienen bajo polarización TE. Las curvas sólidas corresponden al caso liso y las curvas discontinuas al caso rugoso.

De las figs. 27–29 se observa que las estructuras de las bandas son más sensibles a la rugosidad de la superficie a pequeña escala cuando los sistemas incluyen LHM. Para tener una interpretación física, se considera que la refracción de la luz por una onda plana incidente en un límite plano que separa dos medios (aire-LHM) puede producir una desviación de un haz de luz estrecho mucho mayor que la desviación debida a una interfaz entre dos medios dieléctricos (para incidencia oblicua). Debido a este hecho, la dispersión difusa de la luz por las superficies rugosas de los LHMs puede ser mucho más intensa que la debida a las superficies rugosas del material dieléctrico. El fenómeno de la dispersión difusa de la luz es un obstáculo para transmitir una onda electromagnética a través del cristal fotónico y, por lo tanto, contribuye a la presencia

de un gap fotónico. Además, parece que en las figs. 27–29 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 de la microscopía, estas longitudes de onda pueden ver una pequeña estructura de las superficies rugosas. En consecuencia, la dispersión debida a este tipo de estructura es importante y las bandas se ven afectadas de tal manera que podrían aparecer brechas de banda estrechas. 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 muestra en las figs. 27–29 representado por las curvas punteadas, en lugar del comportamiento de la CF2D perfecto representada por las curvas sólidas.

## **VI.3. Respuesta óptica de una estructura fotónica**

El IEM también es adecuado para calcular la distribución del campo electromagnético en la región cercana y lejana para un CF de dimensiones finitas. A continuación se obtiene el sistema de ecuaciones matricial necesario para calcular las propiedades ópticas del sistema fotónico.

### **VI.3.1. El IEM aplicado a un sistema finito**

En esta sección se desarrolla la teoría necesaria para obtener las propiedades ópticas de una estructura fotónica.

### Sistema de ecuaciones

Considérese un sistema como el mostrado en la fig. 30 al cual se le aplicará la ecuación algebraica general (ec. (106)). En la región  $R_1$  hay una onda que incide sobre la interfaz  $\Gamma_1$ , entonces la ecuación discretizada es

$$\Psi_{inc}(\mathbf{r}) + \sum_{\Gamma_1} L_{mn}^{(1)} \Phi_n^{(1)} - \sum_{\Gamma_1} N_{mn}^{(1)} \Psi_n^{(1)} = \Psi_n^{(1)} \Theta(\mathbf{r}), \quad (121)$$

donde  $\Psi_{inc}^j(\mathbf{r})$  representa el campo incidente. En la región  $R_2$  no hay fuentes externas,

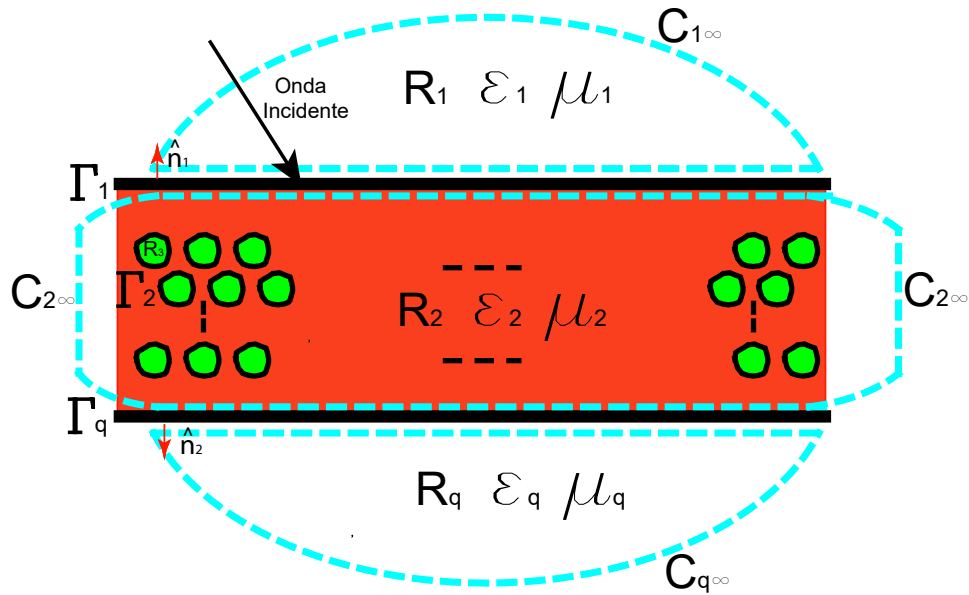


Figura 30. Esquema de un CF2D finito. Los contornos de integración están indicados por las curvas punteadas.  $R_1$  y  $R_q$  representan las regiones donde se refleja y transmite la onda electromagnética, respectivamente.

por lo tanto, le corresponde la siguiente ecuación

$$\sum_{s_2} L_{mn}^{(2)} \Phi_n^{(2)} - \sum_{s_2} N_{mn}^{(2)} \Psi_n^{(2)} = 0, \quad (122)$$

donde  $s_2 = \Gamma_1 + \Gamma_2 + \dots + \Gamma_q$  representa la suma de los contornos que delimitan a la región  $R_2$ . Similarmente, a cada una de las regiones  $j$ -ésima restantes, se les asigna la siguiente expresión

$$\sum_{\Gamma_j} L_{mn}^{(j)} \Phi_n^{(j)} - \sum_{\Gamma_j} N_{mn}^{(j)} \Psi_n^{(j)} = \Psi_j^{(j)}(\mathbf{r}). \quad (123)$$

Considerando las condiciones de continuidad del campo y su derivada normal (ecs. 109 y 110, respectivamente) a lo largo de los diferentes contornos  $\Gamma_q$ , el sistema de ecuaciones para la estructura fotónica 2D se pueden expresar como

$$\sum_{n=1}^{N_a} \left( \delta_{mn(1)} - N_{mn(1)}^{(1)} \right) \Psi_{n(1)}^j + \frac{f_1}{f_2} \sum_{n=1}^{N_a} L_{mn(1)}^{(1)} \Phi_{n(1)} = \Psi_m^{jinc}, \quad (124)$$

$$\begin{aligned} & - \sum_{n=1}^{N_a} N_{mn(1)}^{(2)} \Psi_{n(1)}^j + \sum_{n=1}^{N_a} L_{mn(1)}^{(2)} \Phi_{n(1)} - \sum_{n=1}^{N_b} N_{mn(2)}^{(2)} \Psi_{n(2)}^j + \\ & \sum_{n=1}^{N_b} L_{mn(2)}^{(2)} \Phi_{n(2)} + \dots - \sum_{n=1}^{N_q} N_{mn(q)}^{(2)} \Psi_{n(q)}^j + \sum_{n=1}^{N_q} L_{mn(q)}^{(2)} \Phi_{n(q)} \\ = & 0, \end{aligned} \quad (125)$$

$$\sum_{n=1}^{N_b} \left( \delta_{mn(2)} - N_{mn(2)}^{(3)} \right) \Psi_{n(2)}^j + \frac{f_3}{f_2} \sum_{n=1}^{N_b} L_{mn(2)}^{(3)} \Phi_{n(2)} = 0, \quad (126)$$

$$\sum_{n=1}^{N_c} \left( \delta_{mn(3)} - N_{mn(3)}^{(3)} \right) \Psi_{n(3)}^j + \frac{f_3}{f_2} \sum_{n=1}^{N_b} L_{mn(3)}^{(3)} \Phi_{n(3)} = 0, \quad (127)$$

...

$$\sum_{n=1}^{N_{q-1}} \left( \delta_{mn(q-1)} - N_{mn(q-1)}^{(3)} \right) \Psi_{n(q-1)}^j + \frac{f_3}{f_2} \sum_{n=1}^{N_{q-1}} L_{mn(q-1)}^{(3)} \Phi_{n(q-1)} = 0 \quad (128)$$

y

$$\sum_{n=1}^{N_q} \left( \delta_{mn(q)} - N_{mn(q)}^{(4)} \right) \Psi_{n(q)}^j + \frac{f_4}{f_2} \sum_{n=1}^{N_q} L_{mn(q)}^{(4)} \Phi_{n(q)} = 0. \quad (129)$$

Aquí se han tomado las siguientes consideraciones:

- Los contornos  $C_{1\infty}$ ,  $C_{2\infty}$  y  $C_{q\infty}$  están lo suficientemente alejados cuya perturbación de los campos es nula.
- El medio de incidencia (región  $R_1$ ) tiene propiedades ópticas dadas por la permitividad eléctrica  $\varepsilon_1$  y permeabilidad magnética  $\mu_1$ .
- El medio que contiene las inclusiones tiene propiedades  $\varepsilon_2$  y  $\mu_2$ .

- Las inclusiones tienen las propiedades  $\varepsilon_3$  y  $\mu_3$  si cada una de ellas son del mismo material y  $\varepsilon_3, \mu_3, \dots, \varepsilon_{q-1}, \mu_{q-1}$  si son de diferente material.
- Las propiedades del medio de transmisión están dadas por  $\varepsilon_q$  y  $\mu_q$ , que para nuestro caso corresponden a  $\varepsilon_1$  y  $\mu_1$ .

Las ecs. (124)-(129) constituyen un sistema no homogéneo de  $2 \sum_{p=1}^q N_p$  ecuaciones lineales, el cual se puede resolver de manera numérica para determinar las funciones fuente (el campo y su derivada normal) a lo largo de los contornos  $\Gamma_j$ . Con estas funciones es posible obtener el campo esparcido.

### El campo incidente

Para abordar la propagación de la luz a través de una estructura fotónica 2D se debe iluminar con algún tipo de onda electromagnética. En trabajos previos se han desarrollado los formalismos para ondas planas y ondas gaussianas. Aquí, se describirá brevemente la metodología usando ondas gaussianas. Al utilizar este tipo de ondas se evitan los efectos de borde, ya que la intersección del haz con la interfaz tiene un ancho  $g$  y este parámetro debe ser menor que la longitud total del sistema (como se muestra en la fig. 31).

Un haz gaussiano se puede describir como una forma funcional del campo incidente en términos de su espectro angular  $A(q, k_1)$ :

$$f(x, z) = \int_{-n_0(\frac{\omega}{c})}^{n_0(\frac{\omega}{c})} \frac{1}{2\pi} A(q, k_1) e^{iqx - i\alpha_0(q)z} dq, \quad (130)$$

donde  $\alpha_0(q) = \left[ \left( n_0 \left( \frac{\omega}{c} \right) \right)^2 - q^2 \right]^{\frac{1}{2}}$ , con  $\text{Re}\{\alpha_0(q)\} > 0$  e  $\text{Im}\{\alpha_0(q)\} > 0$ . Así, el campo incidente se puede describir como

$$\Psi_{inc}^0(x, z) = \Psi_0 f(x, z), \quad (131)$$

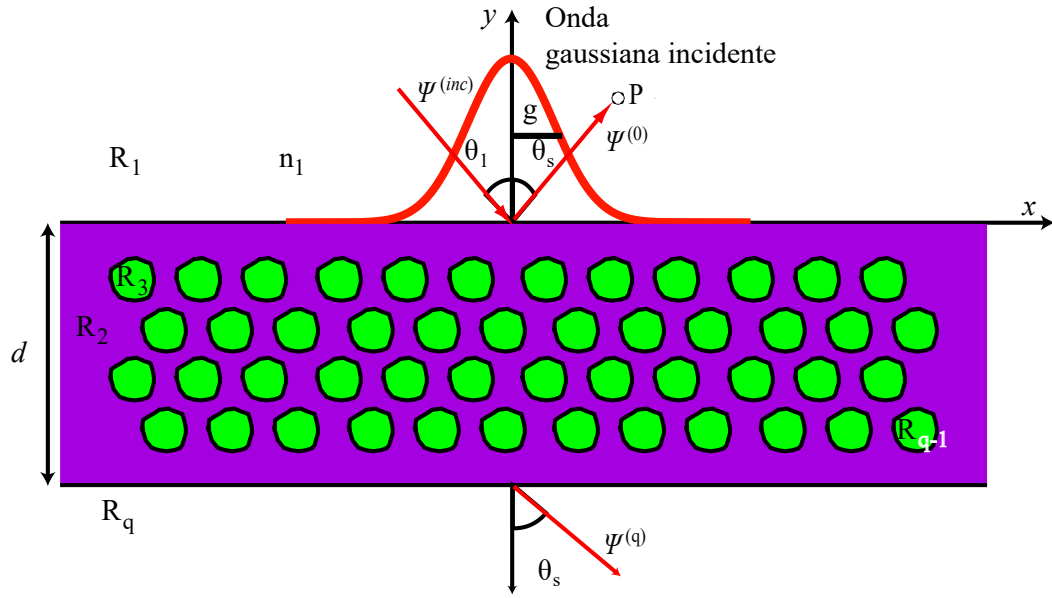


Figura 31. Diagrama de una estructura fotónica con inclusiones cuasi-circulares. El haz que incide sobre el sistema es un haz gaussiano con un semi-ancho  $g$ . Los ángulos  $\theta_1$  y  $\theta_s$  corresponden a los ángulos de incidencia y esparcimiento (para reflexión y transmisión), respectivamente.  $R_1$  y  $R_q$  corresponden a las regiones que contienen a los medios de incidencia y de transmisión, mientras que  $R_2$  y  $R_3 - R_{q-1}$  representan la región que contiene a las inclusiones y las regiones correspondientes a cada inclusión.

tal que  $\Psi_0$  es una constante con sus unidades apropiadas. En este caso, se propone que la función del espectro angular sea

$$A(q, k_1) = \sqrt{\pi} g e^{-\frac{g^2(q-k_1)^2}{4} + i\alpha_0(q)d}, \quad (132)$$

siendo  $d$  el espesor de la estructura fotónica.

Sustituyendo la ec. (132) en la ec. (130) y evaluando en  $z = d$ , se obtiene el campo incidente sobre dicho plano; es decir,

$$\Psi_{inc}^0(x, z) = \Psi_0 e^{ik_1 x} e^{-\frac{x^2}{g^2}}, \quad (133)$$

donde  $k_1 = n_1 \left(\frac{\omega}{c}\right) \sin \theta_1$  y  $\theta_1$  es el ángulo de incidencia correspondiente. Esta ecuación muestra que sobre el plano  $z = d$ , el campo incidente tiene una modulación gaussiana y una fase que es la de una onda plana con un ángulo de incidencia  $\theta_1$ . En el sistema propuesto (fig. 31), el campo incidente está sobre el plano  $y = 0$ .

## La potencia incidente

A partir de la ecuación del campo incidente, dada por

$$\Psi_{inc}^0(x, z) = \Psi_0 \int_{-n_0(\frac{\omega}{c})}^{n_0(\frac{\omega}{c})} \frac{\sqrt{\pi}}{2\pi} g e^{-\frac{g^2(q-k_1)^2}{4}} e^{iqx - i\alpha_0(q)(d-z)} dq, \quad (134)$$

se tiene

$$\frac{\partial \Psi_{inc}^0}{\partial z} = -i\alpha_0(k_1) \Psi_{inc}^0(x, z). \quad (135)$$

Aquí se ha supuesto que la exponencial en el integrando es relativamente angosta y que está centrada en  $q = k_1$ , de manera que se puede considerar que  $\alpha_0(q)$  es una constante sobre el rango en el cual el integrando es significativo. Al evaluar la derivada del campo incidente en  $z = d$ , se obtiene la siguiente expresión

$$\frac{\partial \Psi_{inc}^0(x, d)}{\partial z} = -ik_1 \cos \theta_1 \Psi_{inc}^0(x, d), \quad (136)$$

donde  $\Psi_{inc}^0(x, d)$  está dada por la ec. (133) y se ha utilizado  $\alpha_0(k_1) = k_1 \cos \theta_1$ .

Por otra parte, para determinar la potencia total incidente de una onda electromagnética se toma en cuenta que existen dos tipos de estados de polarización complementarios. Para la polarización TE, se asume que el campo eléctrico está dado por

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

y

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

En el caso de la polarización TM, se empleará el campo magnético

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}) = \hat{\mathbf{k}} H_z(x, y) \quad (139)$$

y

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \hat{i} E_x(x, y) + \hat{j} E_y(x, y). \quad (140)$$

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

$$\mathbf{S} = \mathbf{E} \times \mathbf{H}^*. \quad (141)$$

El promedio temporal del vector de Poynting de una onda representa la potencia media que la onda transporta por unidad de área transversal a la propagación y se conoce como densidad de potencia o irradiancia. Para el caso de la polarización TE, sólo la componente  $\hat{j}$  de la ec. (141) contribuye al flujo de energía sobre la interfaz. Entonces, la irradiancia puede ser escrita como

$$\begin{aligned} P_{TE}^{(inc)} &= \frac{1}{2} \left| \text{Re} \left[ E_z \left( \frac{-i}{\omega\mu} \right) \frac{\partial E_z^*}{\partial x} \right] \right|, \\ &= \frac{k_1 \cos \theta_1}{2\omega\mu_1} |E_z^{inc}|^2, \end{aligned}$$

donde se ha utilizado una de las ecuaciones de Maxwell ( $\frac{\partial E_z}{\partial y} = i\omega\mu H_x$ ) y se aplicó el resultado de la ec. (135).

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

$$P_{TE}^{(inc.Tot)} = \int_{-\frac{L_x}{2}}^{\frac{L_x}{2}} \int_{-\frac{L_z}{2}}^{\frac{L_z}{2}} P_{TE}^{(inc)} dz dx, \quad (142)$$

$$= \frac{k_1 \cos \theta_1}{2\omega\mu_1} |E_z^{(inc)}|^2 L_z \int_{-\frac{L_x}{2}}^{\frac{L_x}{2}} e^{-2\frac{x^2}{g^2}} dx, \quad (143)$$

$$= \frac{\sqrt{2\pi}}{4c\mu_1} n_1 \cos \theta_1 g L_z, \quad (144)$$

donde se ha considerado que  $|E_z^{(inc)}|^2 = 1$  y que  $L_z$  es muy grande ( $L_z \rightarrow \infty$ ).

Para el caso de la polarización TM, la potencia total incidente está dada por la siguiente expresión

$$P_{TM}^{(inc.Tot)} = \frac{\sqrt{2\pi}}{4c\varepsilon_1} n_1 \cos \theta_1 g L_z. \quad (145)$$

En las ecs. (144) - (145), las siglas TE y TM denotan las polarizaciones transversal eléctrica y transversal magnética, respectivamente.

### El campo y potencia esparcida

Ahora vamos a calcular el campo lejano y tomando en cuenta que los elementos de matriz  $L_{mn}^{(j)}$  y  $N_{mn}^{(j)}$ , ecs. (93) y (94), dependen de las funciones de Hankel de primera especie, de orden cero y uno respectivamente, se hará una aproximación asintótica cuando el argumento es muy grande. Así las funciones de Hankel en el límite asintótico, se escriben como

$$H_0^{(1)}(z) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi}} e^{-i\frac{\pi}{4}} \frac{e^{iz}}{\sqrt{z}} \quad (146)$$

y

$$H_1^{(1)}(z) \approx -i\sqrt{\frac{2}{\pi}} e^{-i\frac{\pi}{4}} \frac{e^{iz}}{\sqrt{z}}. \quad (147)$$

Si el campo esparcido tiene la forma

$$\Psi_j^j(\mathbf{r}) = \int_{\Gamma_j} [L_{mn}^{(j)} \Phi_n^{(j)} - N_{mn}^{(j)} \Psi_n^{j(j)}(\mathbf{r})] ds' \quad (148)$$

y empleando las funciones de Hankel en el límite asintótico bajo la suposición de que  $|\mathbf{r}| \gg |\mathbf{R}|_{\max}$ , el campo esparcido se puede reescribir como:

$$\Psi_j^j(\mathbf{r}) = i\sqrt{\frac{1}{8k\pi}} e^{-i\frac{\pi}{4}} \frac{e^{ikr}}{\sqrt{r}} \times \sum_n \Delta s \left[ \Phi_{n(q)}^{(j)} - ik \hat{\mathbf{n}}_{n(q)} \cdot \hat{\mathbf{R}} \Psi_{n(q)}^{j(j)} \right] e^{-ik \frac{|\mathbf{r}-\mathbf{R}|}{r}}, \quad (149)$$

donde  $\mathbf{r} = r \sin \theta_s \hat{i} + r \cos \theta_s \hat{j}$  es el punto de observación,  $\hat{\mathbf{n}}_n \cdot \hat{\mathbf{R}} = (y'_n \sin \theta_s - x'_n \cos \theta_s)$  y  $\frac{\mathbf{r}-\mathbf{R}}{r} = x_n \sin \theta_s + y_n \cos \theta_s$  es la relación entre el punto de observación y de integración.

Es fácil ver que la ec. (149) es función de dos variables independientes,  $\mathbf{r}$  y  $\theta_s$ , por lo que podemos escribir al campo en términos de su producto. Consideremos el campo eléctrico (ec. (149)) dado por

$$\mathbf{E}_s(\mathbf{r}, \theta_s) = I_s(\mathbf{r}) \sigma_R(\theta_s), \quad (150)$$

donde

$$\sigma_R(\theta_s) = \sum_n \Delta_s \left[ \Phi_{n(q)}^{(j)} - ik \hat{\mathbf{n}}_{n(q)} \cdot \hat{\mathbf{R}} \Psi_{n(q)}^{(j)} \right] e^{-ik \frac{|\mathbf{r}-\mathbf{R}|}{r}} \quad (151)$$

es la sección eficaz de esparcimiento e  $I_s(\mathbf{r}) = i \sqrt{\frac{1}{8\pi k}} e^{-\frac{i\pi}{4}} \frac{e^{ikr}}{\sqrt{r}}$ .

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

$$P_R = \int (\mathbf{E}_s \times \mathbf{H}_s) \cdot \hat{\mathbf{n}} da, \quad (152)$$

donde, a partir de las ecuaciones de Maxwell, es posible escribir

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_s \times \mathbf{H}_s &= \frac{1}{\mu_1 c} |\mathbf{E}_s|^2 \\ &= \frac{1}{\mu_1 c} |I_s|^2 |\sigma_R|^2. \end{aligned} \quad (153)$$

Considerando el sistema con simetría cilíndrica y sustituyendo las ecs. (150) y (153) en la ec. (152), obtenemos

$$P_R = \frac{n_1}{16\pi k_1 \mu_1 c} \int_0^{L_z} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \frac{1}{r_m} |\sigma_R(\theta_s)|^2 dz r_m d\theta_s, \quad (154)$$

$$= \frac{n_1 L_z}{16\pi k_1 \mu_1 c} \sum_{i=1}^{N_{\theta_s}} |\sigma_R(\theta_s)|^2 \Delta\theta_s. \quad (155)$$

donde  $\sigma(\theta_s)$  también representa la sección eficaz de un material. Para un material real es

$$\begin{aligned} \sigma_R(\theta_s) &= \sum_n \Delta_s \Phi_n e^{-ik(\sin\theta_s x_n + \cos\theta_s y_n)} \\ &\quad - \sum_n ik \Delta_s \Psi_n^j (\sin\theta_s y'_n - \cos\theta_s x'_n) e^{-ik(\sin\theta_s x_n + \cos\theta_s y_n)}. \end{aligned} \quad (156)$$

Dividendo las ecs. (155) y (144), se obtiene el diferencial de la reflectancia

$$dR(\theta_s) = \frac{P_R}{P_{inc}} = \frac{1}{2(2\pi)^{3/2} g k_1 \cos \theta_1} |\sigma_R(\theta_s)|^2 \Delta \theta_s. \quad (157)$$

Al integrar sobre el intervalo  $[-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}]$ , se obtiene la expresión para la reflectancia

$$R(\theta_s) = \frac{1}{2(2\pi)^{3/2} g k_1 \cos \theta_1} \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} |\sigma_R(\theta_s)|^2 d\theta_s. \quad (158)$$

Por otro lado, la potencia esparcida en transmisión correspondiente es

$$P_T = \frac{n_2 L_z}{16\pi k_2 \mu_2 c} \sum_{i=1}^{N_{\theta_s}} |\sigma_T(\theta_s)|^2 \Delta \theta_s. \quad (159)$$

Con un procedimiento similar, se obtiene el diferencial de transmitancia  $dT(\theta_s)$ :

$$dT(\theta_s) = \frac{P_T}{P_{inc}} = \frac{1}{2(2\pi)^{3/2} g k_2 \left(\frac{\mu_2}{\mu_1}\right) \left(\frac{n_1}{n_2}\right) \cos \theta_1} |\sigma_T(\theta_s)|^2 \Delta \theta_s. \quad (160)$$

Al integrar sobre el intervalo  $[-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}]$ , se obtiene la expresión para la reflectancia

$$T(\theta_s) = \frac{1}{2(2\pi)^{3/2} g k_2 \left(\frac{\mu_2}{\mu_1}\right) \left(\frac{n_1}{n_2}\right) \cos \theta_1} \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} |\sigma_T(\theta_s)|^2 d\theta_s. \quad (161)$$

En la ecuación anterior se debe considerar que si los medios que conforman el sistema de una interfaz son dieléctricos, entonces a frecuencias ópticas (i.e. espectro visible) se cumple que  $\mu_1 \approx \mu_2$ .

Si se procede similarmente al caso de la polarización TE, se pueden obtener las expresiones para la reflectancia y transmitancia bajo la polarización TM:

$$R(\theta_s) = \frac{1}{2(2\pi)^{3/2} g k_1 \cos \theta_1} \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} |\sigma_R(\theta_s)|^2 d\theta_s, \quad (162)$$

y

$$T(\theta_s) = \frac{1}{2(2\pi)^{3/2} g k_2 \left(\frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_1}\right) \left(\frac{n_1}{n_2}\right) \cos \theta_1} \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} |\sigma_T(\theta_s)|^2 d\theta_s.$$

Cabe recordar que dichas expresiones, en ambas polarizaciones, deben a su vez obedecer la ley conservación de la energía dada por  $R + T = 1$ .

## Validación del IEM

Las pruebas para verificar el IEM aplicado a sistemas finitos consistieron en calcular la reflectancia y la transmitancia de una placa (o lámina) con diferentes espesores y longitudes. Los cálculos también se realizaron con diferentes longitudes de onda del haz incidente. El índice de refracción de la placa se consideró mayor que el índice de refracción del medio en el que está embebida. Aquí se utilizaron las curvas teóricas obtenidas de la interferencia de múltiples haces (Hecht and Zajac, 2002) para comparar los resultados obtenidos con el IEM. En las figs. 32(a) y 32(b) se muestran los espectros de reflectancia (R) y transmitancia (T) en función del ángulo de incidencia de una lámina con índice de refracción  $n = 5.33$  embebida en aire, bajo las polarizaciones TE y TM, respectivamente. El espesor y la longitud de la placa son de  $10 \mu\text{m}$  y  $60 \mu\text{m}$ . Las curvas obtenidas con el IEM se traslapan con las curvas obtenidas con las ecuaciones de Fresnel; con esto, queda validada la teoría desarrollada.

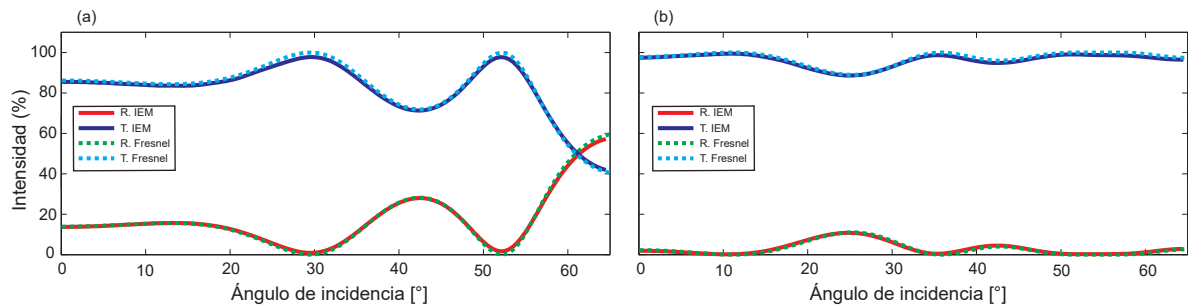


Figura 32. Reflectancia (R) y Transmitancia (T) como función del ángulo de incidencia de una lámina de vidrio ( $\varepsilon_2 = 2.31$ ) bajo polarización (a) TE y (b) TM. La longitud de onda del haz de iluminación fue de 632 nm. Las líneas sólidas corresponden a la respuesta óptica obtenida con el IEM y las líneas punteadas corresponden a la respuesta óptica obtenida con las ecuaciones de Fresnel.

### VI.3.2. Estructuras fotónicas formadas por dieléctricos

Una vez obtenido la  $R$  y  $T$  de una placa de material dieléctrico y validado el IEM, se calcularon las propiedades ópticas de diferentes sistemas fotónicos. Un sistema fotónico consistió en cilindros dieléctricos infinitamente largos embebidos en aire. El arreglo de los cilindros siguen un patrón de red hexagonal. Los cálculos se realizaron para paredes lisas y paredes rugosas. La rugosidad se modeló con un perfil gaussiano donde la longitud de correlación y la desviación estándar de alturas fueron  $\delta = 0.05\lambda$  y  $\sigma = 0.02\lambda$ , respectivamente. Las secciones lisas y rugosas se muestrearon a intervalos  $\Delta s = (1/30)D$ , siendo  $D$  la longitud de la celda unitaria. En todos los cálculos,  $D = 1 \mu\text{m}$ . También, se consideró el sistema inverso; es decir, una placa dieléctrica infinitamente larga con huecos de aire.

En las figs. 33(a) y (b) se muestran los espectros de  $R$  y  $T$  para el primer sistema fotónico que consistió en 360 cilindros dieléctricos ( $\varepsilon = 2.31$ ) embebidos en aire bajo las polarizaciones TE y TM, respectivamente. Los cilindros se acomodaron de 3 filas por 120 columnas siguiendo un patrón de red hexagonal. La fracción de llenado ( $f$ ) de la celda unitaria es de 0.1. La longitud de onda del haz incidente es de 850 nm. En estas figuras se observa que la respuesta óptica del sistema fotónico con rugosidad no cambia al compararlo con el sistema fotónico liso. Ocurre algo similar en el caso de la placa dieléctrica ( $\varepsilon = 2.31$ ) con 360 huecos llenos de aire. Esto se observa en las figs. 33(c) y 33(d). La fracción de llenado se mantuvo con  $f = 0.1$ .

Es interesante ver que sólo con variar el contraste de índice de refracción, la respuesta óptica de algunos sistemas fotónicos con inclusiones lisas cambia al compararlos con sus equivalentes que incluyen inclusiones rugosas. Por ejemplo, en la placa dieléctrica del caso anterior se cambió su constante dieléctrica a  $\varepsilon = 4$ . En la fig. 34(c) se muestra que los espectros de  $R$  y  $T$  se modifican al considerar huecos con paredes rugosas.  $R$

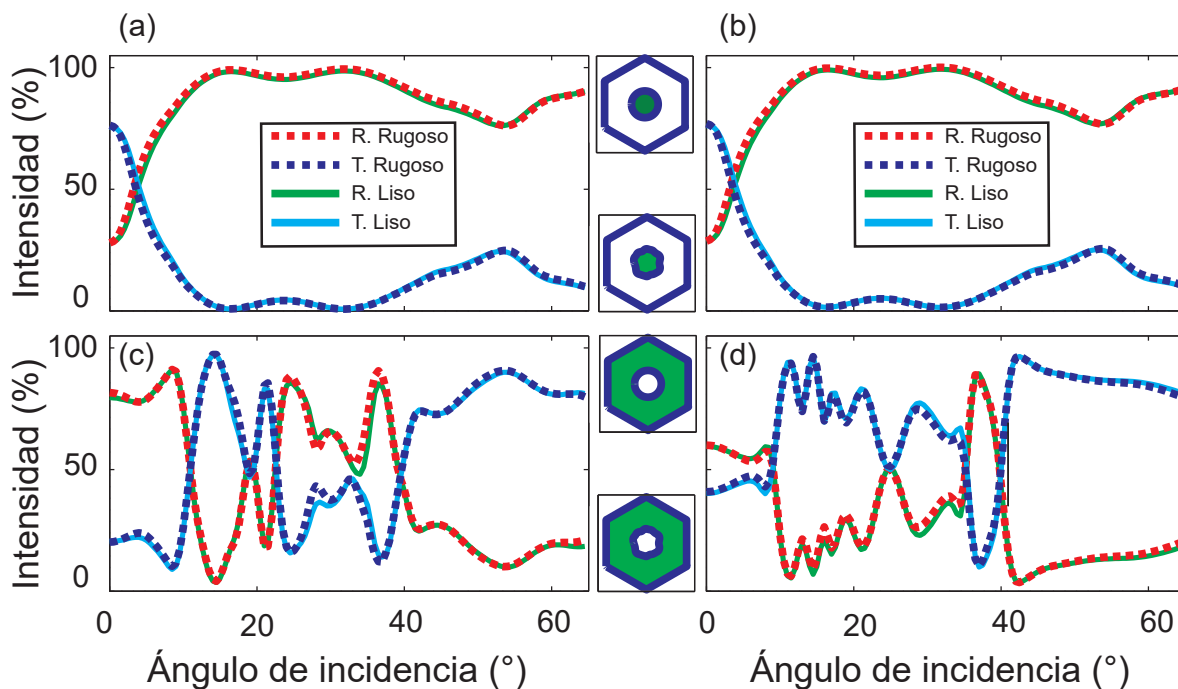


Figura 33. Reflectancia (R) y transmitancia (T) como función del ángulo de incidencia de una estructura fotónica de 360 cilindros dieléctricos ( $\varepsilon = 2.31$ ) inmersos en aire ( $\varepsilon = 1$ ) con una fracción de llenado  $f = 0.1$  bajo la polarización (a) TE y (b) TM. R y T de una placa dieléctrica ( $\varepsilon = 2.31$ ) con 360 huecos llenos de aire con una fracción de llenado  $f = 0.1$  bajo la polarización (c) TE y (d) TM. Las líneas sólidas corresponden a paredes de las inclusiones lisas y las líneas punteadas corresponden a paredes con rugosidad. La longitud de onda del haz de iluminación es de 850 nm.

y T cambian en diferentes rangos angulares, además estos cambios son más notables para ángulos de incidencia superiores a  $50^\circ$ . La longitud de onda del haz incidente es de 850 nm y tiene una polarización TE. Para el caso de la polarización TM también se presentan cambios, aunque en menor medida, como se puede en la fig. 34(d).

Al cambiar el número de cilindros dieléctricos o huecos llenos de aire en una matriz dieléctrica, la respuesta óptica de sistemas lisos también cambia comparados con el mismo sistema pero considerando sus características rugosas. Como un ejemplo, consideremos los mismos parámetros de los sistemas anteriores con  $\varepsilon = 4$  y la nueva distribución de las inclusiones será de 6 filas y 100 columnas, es decir, 600 inclusiones con periodicidad hexagonal. La respuesta óptica para el caso de cilindros dieléctricos

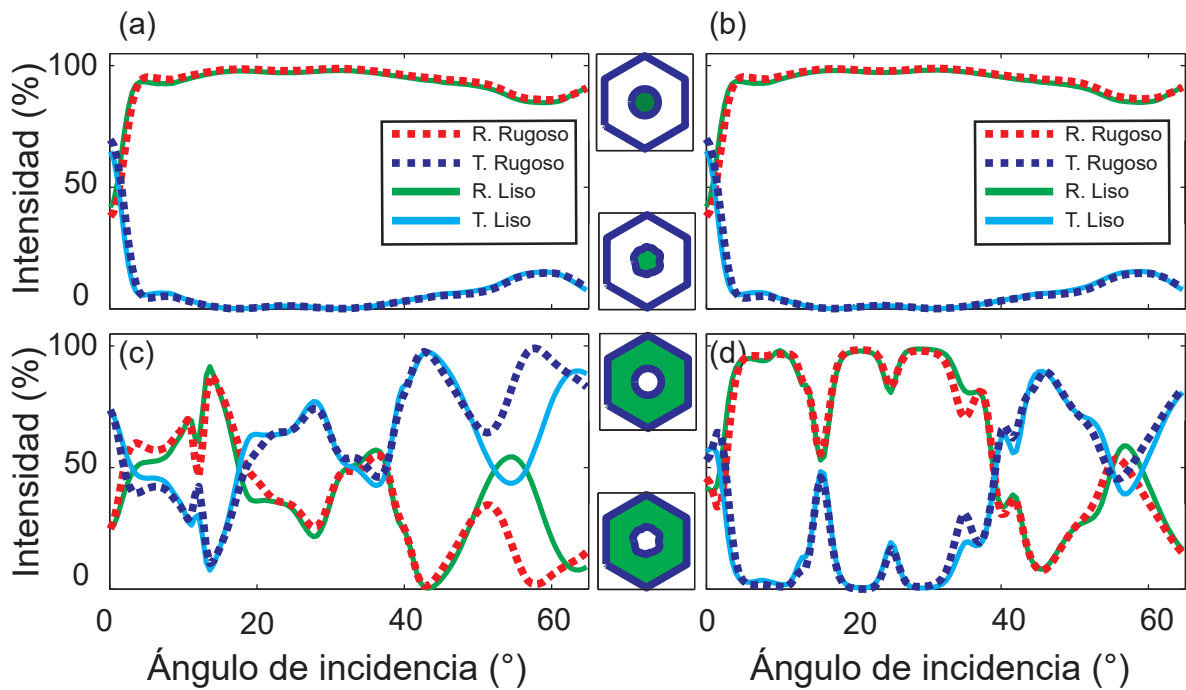


Figura 34. Reflectancia (R) y transmitancia (T) como función del ángulo de incidencia de una estructura fotónica de 360 cilindros dieléctricos ( $\varepsilon = 4$ ) inmersos en aire ( $\varepsilon = 1$ ) con una fracción de llenado  $f = 0.1$  bajo la polarización (a) TE y (b) TM. R y T de una placa dieléctrica ( $\varepsilon = 4$ ) con 360 huecos llenos de aire con una fracción de llenado  $f = 0.1$  bajo la polarización (c) TE y (d) TM. Las líneas sólidas corresponden a paredes de las inclusiones lisas y las líneas punteadas corresponden a paredes con rugosidad. La longitud de onda del haz de iluminación es de 850 nm.

bajo las polarizaciones TE y TM se muestran en las figs. 35(a) y (b), respectivamente. En estas figuras se observa que los espectros cambian en los rangos angulares donde la reflectancia es menor al 100%. Además los espectros de R y T tienen las mismas características para ambas polarizaciones. Para el caso de los huecos en una matriz dieléctrica también hay rangos angulares donde la respuesta óptica se modifica y son diferentes para cada estado de polarización. Esto se puede ver en las figs. 35(c) y (d). La longitud de onda del haz incidente sigue siendo 850 nm.

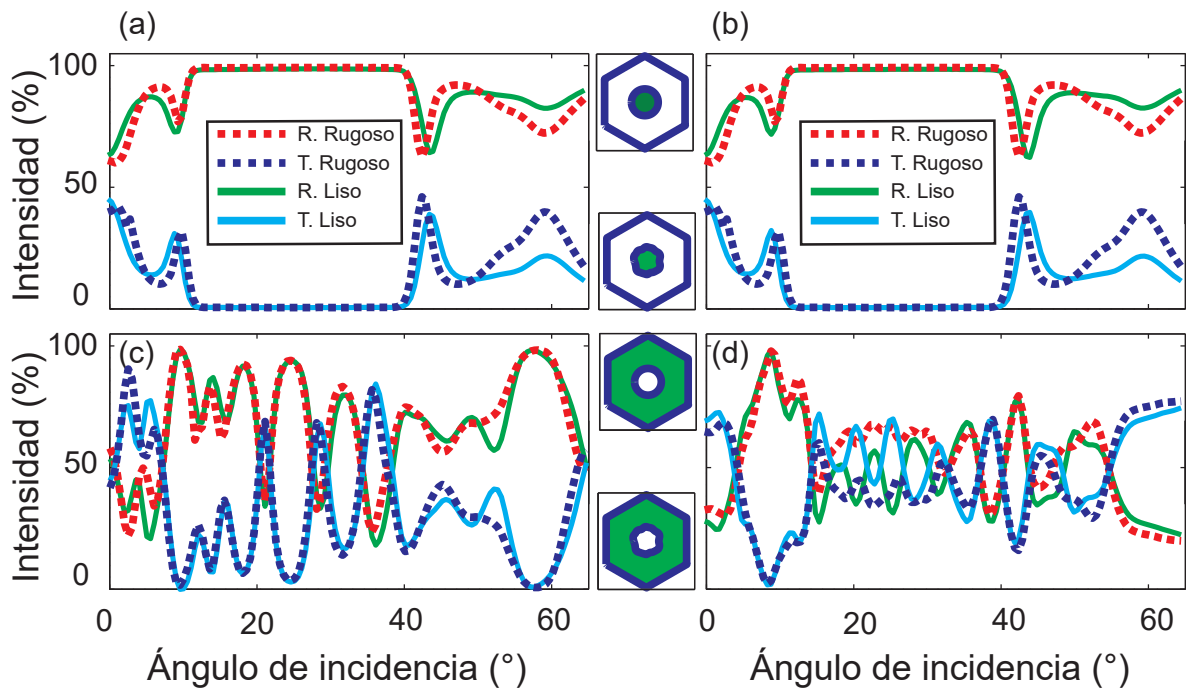


Figura 35. Reflectancia (R) y transmitancia (T) como función del ángulo de incidencia de una estructura fotónica de 600 cilindros dieléctricos ( $\varepsilon = 4$ ) inmersos en aire ( $\varepsilon = 1$ ) con una fracción de llenado  $f = 0.1$  bajo la polarización (a) TE y (b) TM. R y T de una placa dieléctrica ( $\varepsilon = 4$ ) con 600 huecos llenos de aire con una fracción de llenado  $f = 0.1$  bajo la polarización (c) TE y (d) TM. Las líneas sólidas corresponden a paredes de las inclusiones lisas y las líneas punteadas corresponden a paredes con rugosidad. La longitud de onda del haz de iluminación es de 850 nm.

### VI.3.3. Estructuras fotónicas que incluyen LHM

En las estructuras de bandas de los CF2D que incorporan LHM se mostró que las paredes rugosas de las inclusiones modifican la posición de los gaps fotónicos o incluso surgen nuevos gaps. Estos cambios son más visibles a altas frecuencias que corresponden a pequeñas longitudes de onda. Una consecuencia implícita de esto es que la respuesta óptica también deberá cambiar.

En las siguientes estructuras fotónicas se analizaron los efectos de la rugosidad en la respuesta óptica, cuando se iluminan con haces gaussianos con frecuencias intermedias ( $\bar{\omega} = 0.82$  y  $\bar{\omega} = 0.85$ ). En las figs. 36(a) y (b) se exhiben los espectros de R y T de 360 cilindros de LHM (3 filas por 120 columnas con red hexagonal) embebidos en aire

bajo las polarizaciones TE y TM, respectivamente. En las figs. 36(a) y (b) se exponen

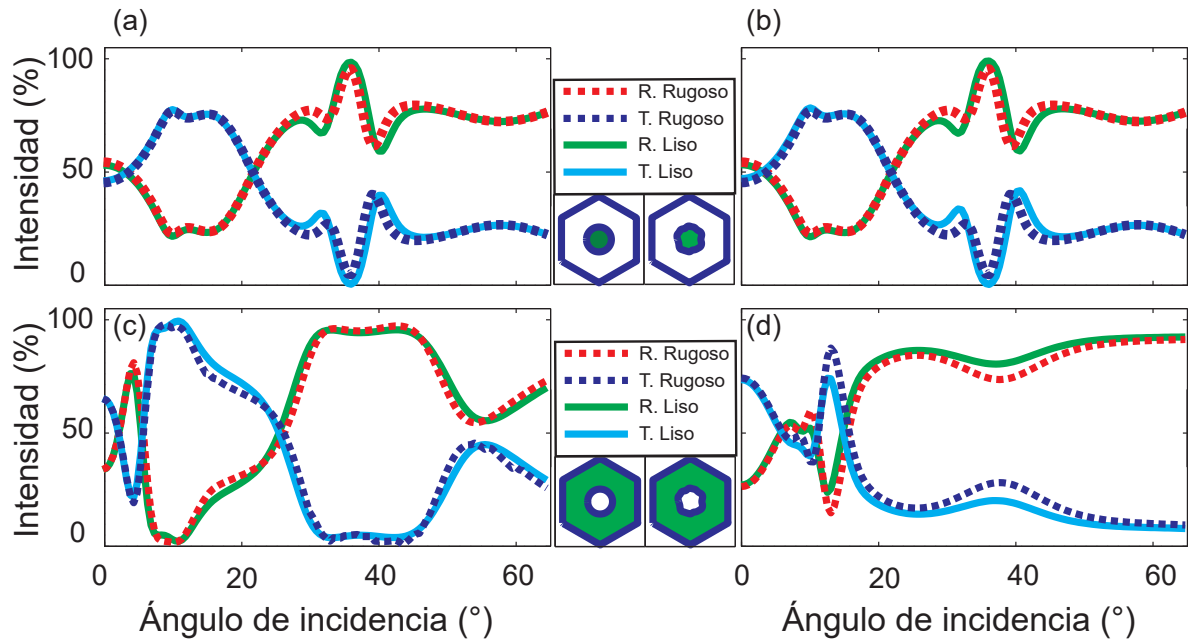


Figura 36. Reflectancia (R) y transmitancia (T) como función del ángulo de incidencia de una estructura fotónica de 360 cilindros de LHM inmersos en aire ( $\varepsilon = 1$ ) con una fracción de llenado  $f = 0.1$  bajo la polarización (a) TE y (b) TM. R y T de una placa de LHM con 360 huecos llenos de aire con una fracción de llenado  $f = 0.1$  bajo la polarización (c) TE y (d) TM. Las líneas sólidas corresponden a paredes de las inclusiones lisas y las líneas punteadas corresponden a paredes con rugosidad. La frecuencia reducida del haz de iluminación es de  $\bar{\omega} = 0.82$ .

los espectros de R y T de una placa de LHM con 360 huecos llenos de aire bajo las polarizaciones TE y TM, correspondientemente. En estos casos, la rugosidad se modeló con un perfil gaussiano y los valores de los parámetros son  $\delta = 0.05\lambda$  y  $\sigma = 0.01\lambda$  para una fracción de llenado  $f = 0.10$ . La frecuencia reducida del haz incidente es  $\bar{\omega} = 0.82$  ( $\lambda = 1.21 \mu\text{m}$ ). En estas figuras se observa que la respuesta óptica de los sistemas con rugosidad bajo polarización TM tienen un ligero cambio, respecto a los sistemas sin rugosidad, en algunos rangos angulares. El rango angular más notable es de  $32$  a  $45^\circ$ .

En el otro conjunto de estructuras fotónicas analizadas, se modificaron algunos parámetros. Por ejemplo, la rugosidad se modeló con un perfil gaussiano con  $\delta = 0.08\lambda$  y  $\sigma = 0.02\lambda$ ; las inclusiones tienen una fracción de llenado  $f = 0.10$ . La longitud de

onda del haz incidente usada fue  $\lambda = 1.17 \mu\text{m}$  ( $\bar{\omega} = 0.85$ ). Los espectros de R y T para el caso de los cilindros de LHM sumergidos en aire bajo las polarizaciones TE y TM están graficados en las figs. 37(a) y (b). En estos cálculos se observa que la respuesta óptica de la estructura fotónica que incluye la rugosidad cambia en comparación de la estructura lisa. Estos se presentan en la mayor parte del rango angular considerado. Para el caso de la placa de LHM con huecos, los espectros no cambian. Aquí, la reflectancia calculada es del 100% para el sistema con y sin rugosidad bajo los dos estados de polarización. Esto se muestra en las figs. 37(c) y (d). Esto indica que esta frecuencia no se puede propagar a través de la estructura, lo cual concuerda con la estructura de bandas mostrada en la fig. 27(d).

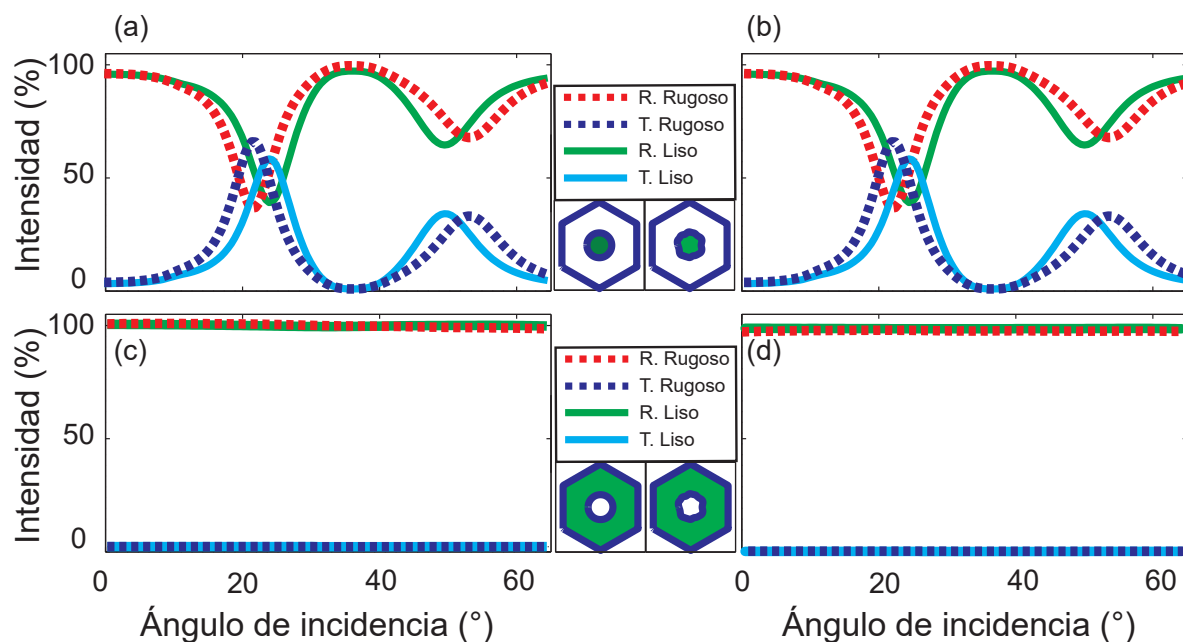


Figura 37. Reflectancia (R) y transmitancia (T) como función del ángulo de incidencia de una estructura fotónica de 360 cilindros de LHM inmersos en aire con una fracción de llenado  $f = 0.2$  bajo la polarización (a) TE y (b) TM. R y T de una placa de LHM con 360 huecos llenos de aire con una fracción de llenado  $f = 0.2$  bajo la polarización (c) TE y (d) TM. Las líneas sólidas corresponden a paredes de las inclusiones lisas y las líneas punteadas corresponden a paredes con rugosidad. La longitud de onda del haz de iluminación es  $\lambda = 1.17 \mu\text{m}$  ( $\bar{\omega} = 0.85$ ).

Es importante mencionar que al incrementar las dimensiones del sistema estudiado,

el uso de recurso computacional (tiempo de cómputo y memoria utilizada) para obtener la respuesta óptica como función del ángulo de incidencia, para una determinada frecuencia del haz incidente, aumenta exponencialmente. Para reducir el tiempo de cómputo, surgió la necesidad de implementar la programación en paralelo a través del protocolo MPI<sup>3</sup> y de la biblioteca de ScaLAPACK<sup>4</sup>. La paralelización consiste en la subdivisión de un problema, en subproblemas, cada uno de los cuales es resuelto de forma simultánea y por separado, reduciendo el tiempo de ejecución. ScaLAPACK es una biblioteca de alto rendimiento diseñada para la computación heterogénea. Sus rutinas son un rediseño de LAPACK<sup>5</sup> para computadoras paralelas de memoria distribuida. Resuelve sistemas lineales densos, problemas de mínimos cuadrados, problemas de valores propios y de valores singulares entre otros, todo esto haciendo uso de la distribución cíclica en bloques y algoritmos de bloque dividido. Esto nos garantiza que el programa se ejecuta tan rápido como sea posible y que funcionará en cualquier máquina donde BLAS<sup>6</sup>, LAPACK y BLACS<sup>7</sup> estén disponibles.

Por otra parte, el objetivo de calcular las propiedades ópticas de estructuras fotónicas que tengan el mayor número de inclusiones posible, es comparar la reflectancia con su respectiva estructura de bandas. Sin embargo, al aumentar el número de inclusiones contenidas en la estructura fotónica incrementa la cantidad de memoria necesaria para realizar los cálculos. Por ejemplo, la memoria necesaria para calcular las propiedades ópticas de las estructuras mostradas fue de 60 GB. Estos cálculos se realizaron en una computadora cuyo límite físico son 64 GB. Posteriormente, se tuvo el acceso a un nodo. Aquí, el recurso computacional disponible son 2 tarjetas de 64 GB y 1 de 32 GB, que

---

<sup>3</sup>Por sus siglas en inglés, Message Passing Interface.

<sup>4</sup>Por sus siglas en inglés, Scalable Linear Algebra PACKage.

<sup>5</sup>Por sus siglas en inglés, Linear Algebra PACKage.

<sup>6</sup>Por sus siglas en inglés, Basic Linear Algebra Subprograms.

<sup>7</sup>Por sus siglas en inglés, Basic Linear Algebra Communication Subprograms.

sumadas dan 160 GB de memoria física. Con este nuevo recurso, fue posible modelar estructuras con ancho de casi 3 veces mayor al analizado previamente; es decir, estructuras con 8 filas y 120 columnas de inclusiones, como se observa en la tabla V. En la tabla V, se muestra el requerimiento de memoria para diferentes sistemas fotónicos 2D.

Tabla V. Memoria necesaria para realizar el cálculo numérico de la reflectancia de diferentes estructuras fotónicas. La distribución de las inclusiones ( $N_{inc}$ ) es de  $n$  filas por  $m$  columnas. También se incluye la longitud de la estructura ( $L_x$ ) y el número total de puntos de la discretización ( $N_p$ ).

| Estructura | Diseño ( $n,m$ ) | $N_{inc}$ | $L_x$ | $N_p$ (x1000) | Memoria (GB) |
|------------|------------------|-----------|-------|---------------|--------------|
| A          | 7x80             | 560       | 84    | 40.88         | 56           |
| B          | 8x80             | 640       | 84    | 46.00         | 72           |
| C          | 9x80             | 720       | 84    | 51.12         | 87           |
| D          | 7x110            | 770       | 114   | 56.12         | 104          |
| E          | 9x90             | 810       | 94    | 57.48         | 108          |
| F          | 7x120            | 840       | 124   | 61.20         | 123          |
| G          | 8x110            | 880       | 114   | 63.16         | 130          |
| H          | 9x100            | 900       | 104   | 63.84         | 133          |
| I          | 8x120            | 960       | 124   | 68.88         | 154          |
| J          | 9x110            | 990       | 114   | 70.20         | 162          |
| K          | 10x100           | 1000      | 104   | 70.24         | 163          |
| L          | 9x120            | 1080      | 124   | 76.56         | 191          |

El uso de la memoria física del disco duro y memoria virtual no es aconsejable ya que el tiempo de cómputo crece exponencialmente: una simulación que dura un par de días puede tardar varias semanas. Por ejemplo, el tiempo de cálculo de la reflectancia

de la estructura J fue de 3 semanas y el espectro obtenido fue muy similar al calculado de la estructura E, y su tiempo de cómputo fue menor a 2 días. Aquí no se muestran estos espectros porque su contenido no aporta información nueva que influya en las conclusiones. En otras palabras, se requieren estructuras más extensas para tener un comparativo con sus respectivas estructuras de bandas.

## Capítulo VII

---

# CONCLUSIONES

---

En este capítulo se mencionan las conclusiones más sobresalientes de esta tesis y se menciona parte del trabajo futuro.

### VII.1. Conclusiones generales

Con base a los resultados mostrados, a continuación se mencionan las conclusiones más importantes de este trabajo.

En el capítulo II, se demostró que el enfoque de matriz de transferencia habitual para el cálculo de las propiedades ópticas de sistemas multicapa puede fallar en sistemas grandes en presencia de absorción. Sin embargo, la estabilidad numérica se puede lograr usando un método, alternativo, basado en la excitación de modos tipo Bloch. Se aplicaron estos métodos al cálculo del espectro de reflectancia de un espejo omnidireccional de amplio espectro que consiste en una gran estructura multicapa tipo chirped hecha de SP. 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 multicapa que podrían estar hechas de repeticiones periódicas de una sola unidad o completamente aperiódicas. Por lo tanto, se llega a la conclusión de que el enfoque

aquí empleado es útil para el cálculo, diseño y análisis de las propiedades ópticas de sistemas multicapa muy grandes.

En el capítulo III, se presentó una metodología óptima para la síntesis de estructuras fotónicas a base de SP. Esta metodología resultó ser de gran utilidad para obtener estructuras reproducibles.

En el Capítulo IV, se han diseñado, fabricado y caracterizado estructuras multicapa cuasi omnidireccionales (rango angular de  $0 - 60^\circ$ ), con un amplio rango espectral, se optimizaron a través de dos técnicas: tipo chirped y apilamiento de espejos tipo Bragg. Para el método tipo chirped, se fabricaron un par de estructuras, una con espesores de  $21.6 \mu\text{m}$  y otra con un espesor de  $60.4 \mu\text{m}$ , resultando en bandas cuasi omnidireccionales de  $360 \text{ nm}$  y  $1800 \text{ nm}$ , centradas en  $1160 \text{ nm}$  y  $1925 \text{ nm}$ , respectivamente. Para la técnica de apilamiento de espejos, se obtuvo una estructura de  $41.5 \mu\text{m}$  de espesor, con un ancho de banda cuasi omnidireccional de  $1800 \text{ nm}$  centrada en  $1850 \text{ nm}$ . Por lo tanto, se encontró que esta segunda técnica es mejor ya que produce estructuras de menor espesor y una mejora notable de la reflectancia promedio. Además, las técnicas de análisis desarrolladas aquí se pueden utilizar para optimizar la reflectancia con otros contrastes de índice de refracción en multicapas de SP o incluso en sistemas compuestos por otros tipos de materiales. Tales estructuras propuestas podrían usarse como espejos para concentradores solares, reflectores de enfoque plano, reguladores térmicos o, si se incluyen defectos, como filtros o químicos/biosensores remotos con una amplia respuesta angular independiente.

En el Capítulo V, se demostró que para obtener una estructura fotónica plana cuasi omnidireccional, en la región visible y NIR, es necesario tener capas de silicio poroso con porosidades superiores al 56% y aplicarles un proceso de oxidación completo. Además, se encontró que la reflectancia promedio aumenta al incrementar el número

de períodos de la estructura de sílice porosa, debido al bajo contraste del índice de refracción. Por otra parte, un pseudo ángulo de Brewster surge en la vecindad de  $70^\circ$  de incidencia. Adicionalmente, al aumentar el ángulo de incidencia en la etapa de diseño de la estructura, su ancho de banda tiene un ensanchamiento y un desplazamiento hacia el IR. Este estudio puede resultar útil para diseñar las estructuras con bandas cuasi omnidireccionales necesarias para aplicaciones fotónicas como lentes planas o espejos para concentradores solares.

Finalmente, en el Capítulo VI, se desarrolló el método de ecuación integral para el cálculo de estructuras de bandas de un CF2D compuesto de inclusiones cilíndricas que tienen superficies rugosas. Los materiales de la estructura fotónica pueden ser dieléctricos o de metamaterial dispersivo. También se ha descubierto que para sistemas puramente dieléctricos con una rugosidad relativamente pequeña en comparación con la longitud de onda, las estructuras de las bandas permanecen casi inalteradas en comparación con las estructuras de banda del cristal fotónico bidimensional con superficies lisas bajo polarizaciones transversal eléctrico y magnético. Sin embargo, cuando se consideran las estructuras fotónicas bidimensionales que incluyen LHM dispersivos, las estructuras de bandas se ven fuertemente afectadas debido a que surgen nuevas bandas fotónicas prohibidas. Además, en algunos casos, un intervalo de banda cambia su posición en frecuencia, haciéndose 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 del CF2D. Por tanto, podemos concluir que es muy importante tener en cuenta la rugosidad de las superficies que estarán presentes en los sistemas reales con el fin de obtener una mejor concordancia entre teoría y medida para aplicaciones tecnológicas.

## VII.2. Trabajo futuro

Como parte del trabajo a futuro se proponen dos actividades. La primer actividad, es la síntesis de estructuras multicapa de SP autosostenidas para oxidarlas completamente. El reto es obtener espejos autosostenidos de silica porosa completamente planos. La segunda actividad corresponde a la síntesis de estructuras fotónicas 2D (pilares dieléctricos) a través de la técnica de grabado electroquímico asistido por metal (MACE<sup>1</sup>) para hacer un comparativo teórico-numérico de sus propiedades ópticas.

MACE es un método novedoso de nanofabricación descubierto por Li *et al.* (Li and Bohn, 2000) originalmente para producir silicio poroso y luego desarrollado para producir nanoestructuras semiconductoras de relación de aspecto extremadamente alta que incluyen homo y heterouniones de Si, Ge, GaAs, InGaAs, InP, SiC, GaN, Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. Además, utiliza un metal noble (como Au, Pt y Ag) depositado en la superficie de un semiconductor (por ejemplo, Si) como catalizador para catalizar la generación de huecos (h<sup>+</sup>) a partir de un oxidante (como H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>) en una solución ácida (o básica), por ejemplo HF, para inducir reacciones locales de oxidación ( $\text{Si} + 4\text{h}^+ \rightarrow \text{Si}^{4+}$ ) y reducción ( $2\text{H}^+ + 2\text{e}^- \rightarrow \text{H}_2$ ). Esto da como resultado la eliminación de materiales semiconductores sin un consumo neto del metal. En condiciones controladas de grabado, las reacciones ocurren sólo en la interfaz entre el metal y el semiconductor. Como resultado, el metal desciende hacia el semiconductor a medida que el semiconductor se graba justo debajo, actuando como una máscara de grabado de resistencia negativa. Cuando el metal del catalizador se modela en cualquier forma y dimensión, el patrón se puede grabar en el semiconductor para producir micro y nanoestructuras que incluyen matrices de pilares para la recolección y almacenamiento de energía (Chern *et al.*, 2010), vías para cristales fotónicos (DeJarld *et al.*, 2011; Kim *et al.*, 2017), sensores ópticos (Balderas-Valadez

---

<sup>1</sup>Por sus siglas en inglés, Metal Assited Chemical Etching.

*et al.*, 2016), formas y patrones arbitrarios para aplicaciones que incluyen metamateriales (Kim *et al.*, 2019). MACE es esencialmente un método de grabado en húmedo, pero produce micro y nanoestructuras anisotrópicas de semiconductores de alta relación de aspecto sin incurrir en daños en la red.

La síntesis de los pilares de silicio (incluso pueden ser de SP) se lleva a cabo mediante la combinación de litografía coloidal y MACE. Esta técnica se basa únicamente en reacciones químicas, por lo tanto, es rápido, rentable y sencillo de realizar (Pacholski, 2011; Balderas-Valadez *et al.*, 2018). En resumen, microesferas de poli N-iso-propilacrilamida (poli-NIPAM) se depositan sobre una oblea de Si y posteriormente se deposita una fina capa de oro por pulverización catódica. Después de eliminar las microesferas de poli-NIPAM, se hace crecer la capa con patrón de oro mediante deposición de oro no electrolítico. Finalmente, el MACE se realiza empleando una solución de grabado de etanol (99,9%), HF (48%) y H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> (30%) en una relación volumétrica de 1:1:1, respectivamente.

## Referencias

- Agarwal, V. and Río, J. A. D. (2003). Tailoring the photonic band gap of a porous silicon dielectric mirror. *App. Phys. Lett.*, **82**(10): 1512–1514.
- Ahmed, K., Khan, A., Rauf, A., and Gul, A. (2014). Multilayer dielectric narrow band mangin mirror. *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*, **60**: 012016.
- Anderson, R. C., Muller, R. S., and Tobias, C. W. (1989). Investigation of porous silicon for vapor sensing. *Web*.
- Antunez, E., Estevez, J., Campos, J., Basurto-Pensado, M., and Agarwal, V. (2014). Formation of photoluminescent n-type macroporous silicon: Effect of magnetic field and lateral electric potential. *Physica B: Condensed Matter*, **453**: 34–39. Low-Dimensional Semiconductor Structures - A part of the XXII International Material Research Congress (IMRC 2013).
- Archuleta-Garcia, R., Manzanares-Martinez, M. B., and Manzanares-Martinez, J. (2014). Una descripción del método de ondas planas para el cálculo de bandas fotónicas. *Revista Boliviana de Física*, **13**: 79–87.
- 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., 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.
- Aspnes, D. E., Theeten, J. B., and Hottier, F. (1979). Investigation of effective-medium models of microscopic surface roughness by spectroscopic ellipsometry. *Phys. Rev. B*, **20**: 3292–3302.
- Assefa, S., McNab, S. J., and Vlasov, Y. A. (2006). Transmission of slow light through photonic crystal waveguide bends. *Opt. Lett.*, **31**(6): 745–747.
- Balderas-Valadez, R. and Agarwal, V. (2014). Porous silicon functionalization for possible arsenic adsorption. *Nanoscale Res Lett*, **9**: 508.
- Balderas-Valadez, R., Estévez-Espinoza, J., Salazar-Kuri, U., Pacholski, C., Mochán, W., 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. *Appl. Surf. Science*, **462**: 783–790.

- Balderas-Valadez, R. F., Agarwal, V., and Pacholski, C. (2016). Fabrication of porous silicon-based optical sensors using metal-assisted chemical etching. *RSC Adv*, **6**: 121430–21434.
- Bernier, D., Roux, X. L., Lupu, A., Marris-Morini, D., Vivien, L., and Cassan, E. (2008). Compact, low cross-talk CWDM demultiplexer using photonic crystal superprism. *Opt. Express*, **16**(22): 17209–17214.
- Birchak, J. R., Gardner, C. G., Hipp, J. E., and Victor, J. M. (1974). High dielectric constant microwave probes for sensing soil moisture. *Proceedings of the IEEE*, **62**(1): 93–98.
- Bird, R., Hulstrom, R., and Lewis, L. (1983). Terrestrial solar spectral data sets. *Solar Energy*, **30**(6): 563–573.
- Bisi, O., Ossicini, S., and Pavesi, L. (2000). Porous silicon: a quantum sponge structure for silicon based optoelectronics. *Surf. Sci. Rep.*, **38**(1): 1–126.
- Bomchil, G., Halimaoui, A., and Herino, R. (1990). Porous silicon: The material and its applications in silicon-on-insulator technologies. *Applied Surface Science*, **41-42**: 604–613.
- Bria, D., Djafari-Rouhani, B., Akjouj, A., Dobrzynski, L., Vigneron, J. P., El Boudouti, E. H., and Nougouai, A. (2004). Band structure and omnidirectional photonic band gap in lamellar structures with left-handed materials. *Phys. Rev. E*, **69**: 066613.
- Bruggeman, D. A. (1935). Berechnung verschiedener physikalischer Konstanten von heterogenen Substanzen. *Annalen der Physik*, **416**(7): 636–664.
- Bruyant, A., Léron del, 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.
- Canham, L. (1997). *Properties of porous silicon, 1st edition*. DERA, Malvern, UK.
- Canham, L. (2018). *Handbook of Porous Silicon, 2nd edition*. Springer International Publishing AG, Gewerbestrasse 11, 6330 Cham, Switzerland.
- Canham, L. T. (1990). Silicon quantum wire array fabrication by electrochemical and chemical dissolution of wafers. *Applied Physics Letters*, **57**(10): 1046–1048.
- Castillo-Gallardo, V. (2016). *Estudio experimental y numérico de la dependencia angular de las propiedades ópticas reflectivas de estructuras fotónicas en 2D con periodicidad hexagonal, construidas sobre un sustrato de silicio*. Tesis de Maestría, Facultad de Ciencias Físico Matemáticas de la UMSNH.

- Castillo-Gallardo, V., Puente-Díaz, L. E., Pérez-Aguilar, H., Mendoza-Suárez, A., and Villa-Villa, F. (2019). Band structure of two-dimensional photonic crystals that include dispersive left-handed materials with rough surfaces in their lattice. *J. Opt. Soc. Am. 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). Thickness optimization in wide range quasi omnidirectional 1-d photonic structures. submitted.
- Centeno, 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.
- Charlton, M. D. B., Roberts, S. W., and Parker, G. J. (1997). Guided mode analysis, and fabrication of a 2-dimensional visible photonic band structure confined within a planar semiconductor waveguide. *Materials Science and Engineering: B*, **49**(2): 155–165.
- Chavez-Castillo, B. A., Pérez-Huerta, J. S., Madrigal-Melchor, J., Amador-Alvarado, S., Sustaita-Torres, I. A., Agarwal, V., and Ariza-Flores, D. (2020). A wide band porous silicon omnidirectional mirror for the near infrared range. *Journal of Applied Physics*, **127**(20): 203106.
- Chen, K. M., Sparks, A. W., Luan, H.-C., Lim, D. R., Wada, K., and Kimerling, L. C. (1999). SiO<sub>2</sub>/TiO<sub>2</sub> omnidirectional reflector and microcavity resonator via the sol-gel method. *Appl. Phys. Lett.*, **75**(24): 3805–3807.
- Cheng, Y.-C. and Staliunas, K. (2018). Near-field flat focusing mirrors. *Appl. Phys. Rev.*, **5**(1): 011101.
- Chern, W., Hsu, K., Chun, I. S., Azeredo, B. P. d., Ahmed, N., Kim, K.-H., Zuo, J.-m., Fang, N., Ferreira, P., and Li, X. (2010). Nonlithographic patterning and metal-assisted chemical etching for manufacturing of tunable light-emitting silicon nanowire arrays. *Nano Letters*, **10**(5): 1582–1588. PMID: 20423044.
- Dal Negro, L., Oton, C. J., Gaburro, Z., Pavesi, L., Johnson, P., Lagendijk, A., Righini, R., Colocci, M., and Wiersma, D. S. (2003). Light Transport through the Band-Edge States of Fibonacci Quasicrystals. *Phys. Rev. Lett.*, **90**: 055501.
- Dallessasse, J. M., Holonyak, N., Sugg, A. R., Richard, T. A., and El-Zein, N. (1990). Hydrolyzation oxidation of Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As-AlAs-GaAs quantum well heterostructures and superlattices. *Applied Physics Letters*, **57**(26): 2844–2846.
- DeCorby, R. G., Nguyen, H. T., Dwivedi, P. K., and Clement, T. J. (2005). Planar omnidirectional reflectors in chalcogenide glass and polymer. *Opt. Express*, **13**(16): 6228–6233.

- DeJarlid, M., Shin, J. C., Chern, W., Chanda, D., Balasundaram, K., Rogers, J. A., and Li, X. (2011). Formation of High Aspect Ratio GaAs Nanostructures with Metal-Assisted Chemical Etching. *Nano Letters*, **11**(12): 5259–5263.
- Dietsch, R., Braun, S., Holz, T., Mai, H., Scholz, R., and Bruegemann, L. (2000). Multilayer x-ray optics for energies  $E \leq 8$  keV and their application in x-ray analysis. En C. A. MacDonald and A. M. Khounsary, editores, *Advances in Laboratory-based X-Ray Sources and Optics*, Vol. 4144, páginas 137–147. International Society for Optics and Photonics, SPIE.
- Dragoman, M. and Dragoman, D. (2008). Plasmonics: Applications to nanoscale terahertz and optical devices. *Progress in Quantum Electronics*, **32**(1): 1–41.
- Ebbesen, T. W., Lezec, H. J., Ghaemi, H. F., Thio, T., and Wolff, P. A. (1998). Extraordinary optical transmission through sub-wavelength hole arrays. *Nature*, **391**: 667–669.
- Englund, D., Fattal, D., Waks, E., Solomon, G., Zhang, B., Nakaoka, T., Arakawa, Y., Yamamoto, Y., and Vuckovi, J. (2005). Controlling the spontaneous emission rate of single quantum dots in a two-dimensional photonic crystal. *Phys. Rev. Lett.*, **95**: 013904.
- 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. *Appl. Phys. Lett.*, **94**(6): 061914.
- Estrada-Wiese, D. and R  o, J. d. (2018). Refractive index evaluation of porous silicon using Bragg reflectors. *Revista Mexicana de f  sica*, **64**: 72–81.
- Estrada-Wiese, D., Del R  o, J., and del Rio-Chanona, E. (2018). Stochastic optimization of broadband reflecting photonic structures. *Scientific Reports*, **8**: 1193.
- Frohnhoff, S. and Berger, M. G. (1994). Porous silicon superlattices. *Advanced Materials*, **6**(12): 963–965.
- Frohnhoff, S., Berger, M., Th  nissen, M., Dieker, C., Vescan, L., M  hler, H., and L  th, H. (1995). Formation techniques for porous silicon superlattices. *Thin Solid Films*, **255**(1): 59–62. European Materials Research Society 1994 Spring Conference, Symposium F: Porous Silicon and Related Materials.
- Garnett, J. C. M. and Larmor, J. (1904). Xii. colours in metal glasses and in metallic films. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London A*, **203**(359-371): 385–420.
- Guernit, N., Remache, L., Lorrain, N., Guendouz, M., and Charrier, J. (2020). Theoretical and experimental study of fermi bragg reflector as application for thin silicon solar cells. *Optical Materials*, **100**: 109615.

- Hecht, E. and Zajac, A. (2002). *Optics, 3rd edition*. Addison-Wesley, Michigan.
- Hussell, C. P. and Ramaswamy, R. V. (1997). High-index overlay for high reflectance DBR gratings in LiNbO<sub>3</sub> channel waveguides. *IEEE Photonic Tech. L.*, **9**(5): 636–638.
- James, F. (1994). MINUIT Function Minimization and Error Analysis. *CERN Program Library Long Writeup D506*.
- Jena, S., Tokas, R. B., Tripathi, S., Rao, K. D., Udupa, D. V., Thakur, S., and Sahoo, N. K. (2019). Influence of oxygen partial pressure on microstructure, optical properties, residual stress and laser induced damage threshold of amorphous HfO<sub>2</sub> thin films. *J. Alloy Compd.*, **771**: 373–381.
- Jimenez Vivanco, M., García, G., Carrillo, J., Agarwal, V., Díaz-Becerril, T., Doti, R., Faubert, J., and Lugo, E. (2020). Porous Si-SiO<sub>2</sub> based UV Microcavities. *Sci. Rep.-UK*, **10**: 2220.
- Joannopoulos, J. D., Johnson, S. G., and Meade, R. D. (2008). *Photonic Crystals: Molding the Flow of Light*. Princeton University Press, New York, primero edición.
- Joo, J., Cruz, J. F., Vijayakumar, S., Grondek, J., and Sailor, M. J. (2014). Photoluminescent porous si/sio<sub>2</sub> core/shell nanoparticles prepared by borate oxidation. *Advanced Functional Materials*, **24**(36): 5688–5694.
- Ju, J., Jin, W., and Ho, H. L. (2008). Compact in-fiber interferometer formed by long-period gratings in photonic crystal fiber. *IEEE Photonics Technology Letters*, **20**(23): 1899–1901.
- Kane Yee (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.
- Karthik, T., Martinez, L., and Agarwal, V. (2018). Porous silicon ZnO/SnO<sub>2</sub> structures for CO<sub>2</sub> detection. *J. Alloy Compd.*, **731**: 853–863.
- Kellarev, A. and Ruschin, S. (2018). Modification of optical properties of oxidised porous silicon by pore filling. *Optical Materials*, **85**: 113–120.
- Kim, J. D., Mohseni, P. K., Balasundaram, K., Ranganathan, S., Pachamuthu, J., Coleman, J. J., and Li, X. (2017). Scaling the Aspect Ratio of Nanoscale Closely Packed Silicon Vias by MacEtch: Kinetics of Carrier Generation and Mass Transport. *Advanced Functional Materials*, **27**(12): 1605614.
- Kim, J. D., Kim, M., Chan, C., Draeger, N., Coleman, J. J., and Li, X. (2019). CMOS-Compatible Catalyst for MacEtch: Titanium Nitride-Assisted Chemical Etching in Vapor phase for High Aspect Ratio Silicon Nanostructures. *ACS Applied Materials & Interfaces*, **11**(30): 27371–27377.

- Kozar, A. V., Marchenko, S. V., and Shestakov, P. Y. (2017). *Focusing and defocusing of reflected light beams from chirped dielectric layered structure*. IEEE.
- 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.
- Krauss, T. F., De La Rue, R. M., and Brand, S. (1996). Two-dimensional photonic-bandgap structures operating at near-infrared wavelengths. *Nature*, **6602**(383): 699–702.
- Lehmann, V. and Gósele, U. (1991). Porous silicon formation: A quantum wire effect. *Applied Physics Letters*, **58**(8): 856–858.
- Li, J., Huang, W., and Han, Y. (2006). Tunable photonic crystals by mixed liquids. *Colloids and Surfaces A*, **279**(1): 213–217.
- Li, X. and Bohn, P. W. (2000). Metal-assisted chemical etching in hf/h<sub>2</sub>o<sub>2</sub> produces porous silicon. *Appl. Phys. Letter*, **77**(16): 2572–2574.
- Loni, A. (2014). *Porous Silicon Formation by Anodization*, páginas 1–12. Springer International Publishing, Cham. ISBN 978-3-319-04508-5.
- Looyenga, H. (1965). Dielectric constants of heterogeneous mixtures. *Physica*, **31**(3): 401–406.
- 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.
- Martínez, A., Piqueras, M. A., and Martí, J. (2006). Generation of highly directional beam by k-space filtering using a metamaterial flat slab with a small negative index of refraction. *Applied Physics Letters*, **89**(13): 131111.
- 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. *JOSA 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 left-handed materials and dielectrics in the unit cell. *J. Opt. Soc. Am. B*, **24**(12): 3091–3098.
- Missoni, L. L., Ortiz, G. P., Ricci, M. L. M., Toranzos, V. J., and Mochán, W. L. (2020). Rough 1D photonic crystals: A transfer matrix approach. *Optical Materials*, **109**: 110012.
- Mochán, W. L. and del Castillo Mussot, M. (1988). Optics of multilayered conducting systems: Normal modes of periodic superlattices. *Phys. Rev. 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. *Phys. Rev. B*, **35**(3): 1088–1098.
- Mulloni, V., Mazzoleni, C., and Pavesi, L. (1999). Elaboration, characterization and aging effects of porous silicon microcavities formed on lightly p-type doped substrates. *Semiconductor Science and Technology*, **14**(12): 1052–1059.
- Murillo, J. G., Carrillo-Vázquez, V. M., Castillo-Gallardo, V., Ángel Téllez-Villaseñor, M., Pérez-Aguilar, H., Medina-Vázquez, J. A., Ramírez, E. Y. G., Herrera, G., and Duarte-Moller, A. (2019). Angular dependence of the optical reflectance in two-dimensional si-ZnO photonic crystals. *Journal of Physics: Conference Series*, **1221**: 012042.
- Nellen, P. M., Strasser, P., Callegari, V., Wuest, R., Erni, D., and Robin, F. (2007). Focused ion beam modifications of indium phosphide photonic crystals. *Microelectronic Engineering*, **84**(5): 1244 – 1247. Proceedings of the 32nd International Conference on Micro- and Nano-Engineering.
- Pacholski, C. (2011). Fabrication of patterned porous silicon structures using a poly(N-isopropylacrylamide) microgel mask and catalytic etching. *Phys. Status Solidi C*, **8**(6): 1797–1800.
- Padrón-Godínez, A. (2017). Método de matrices de transferencia para análisis de películas delgadas con simetría. <https://www.researchgate.net/publication/337569821>.
- Pap, A. E., Kordás, K., George, T. F., and Leppávuori, S. (2004). Thermal oxidation of porous silicon: study on reaction kinetics. *The Journal of Physical Chemistry B*, **108**(34): 12744–12747.
- Pap, A. E., Kordás, K., Váhákangas, J., Uusimáki, A., Leppávuori, 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.
- Park, Y., Roh, Y.-G., Cho, C.-O., Jeon, H., Sung, M. G., and Woo, J. C. (2003). GaAs-based near-infrared omnidirectional reflector. *Appl. Phys. Lett.*, **82**(17): 2770–2772.
- Pavesi, L. (1997). Porous silicon dielectric multilayers and microcavities. *Riv. Nuovo Cim.*, **20**(1).
- Pavesi, L. and Turan, R. (2010). *Silicon Nanocrystals in Porous Silicon and Applications*, capítulo 1, páginas 349–393. John Wiley & Sons, Ltd. ISBN 9783527629954.
- 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.
- Pérez-Alvarez, R. and García-Moliner, F. (2004). *Transfer matrix, Green Function and related techniques: Tools for the study of multilayer heterostructures, 1st edition*. Universitat Jaume I, España. ISBN 978-84-8021-472-8.
- Pérez-Huerta, J. S., Ariza-Flores, D., Castro-García, R., Mochán, W. L., Ortiz, G. P., and Agarwall, V. (2018). Reflectivity of 1D photonic crystals: A comparison of computational schemes with experimental results. *Int. J. Mod. Phys. B*, **32**(11): 1850136.
- Plihal, M. and Maradudin, A. A. (1991). Photonic band structure of two-dimensional systems: The triangular lattice. *Physical Review*, **44**(16): 8565–8572.
- Poelman, D. and Smet, P. (2003). Methods for the determination of the optical constants of thin films from single transmission measurements: a critical review. *J. Phys. D*, **36**(15): 1850–1857.
- Polyanskiy, M. (15 de Enero de 2020). <http://refractiveindex.info>.
- 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.
- Rayleigh, J. W. S. (1888). On the remarkable phenomenon of cristaline reflexion described by Prof. Stokes. *Phil. Magazine*, **26**: 256–265.
- Reed, G. T. (2008). *Silicon Photonics: The state of the art, 1st edition*. Wiley, University of Surrey UK.
- Robbie, K., Beydaghyan, G., Brown, T., Dean, C., Adams, J., and Buzea, C. (2004). Ultrahigh vacuum glancing angle deposition system for thin films with controlled three-dimensional nanoscale structure. *Review of Scientific Instruments*, **75**(4): 1089–1097.
- Rowson, S., Chelnokov, A., Cuisin, C., and Lourtioz, J.-M. (1998). Three-dimensional characterisation of a two-dimensional photonic bandgap reflector at midinfrared wavelengths. *IEE Proceedings - Optoelectronics*, **145**: 403–408(5).
- Ruminski, A. M., Barillaro, G., Chaffin, C., and Sailor, M. J. (2011). Internally Referenced Remote Sensors for HF and Cl<sub>2</sub> Using Reactive Porous Silicon Photonic Crystals. *Advanced Functional Materials*, **21**(8): 1511–1525.
- Salonen, J. and Makila, E. (2014). 2 - thermal stabilization of porous silicon for biomedical applications. En H. A. Santos, editor, *Porous Silicon for Biomedical Applications*, páginas 21–34. Woodhead Publishing. ISBN 978-0-85709-711-8.

- Schurig, D., Mock, J. J., Justice, B. J., Cummer, S. A., Pendry, J. B., Starr, A. F., and Smith, D. R. (2006). Metamaterial electromagnetic cloak at microwave frequencies. *Science*, **314**(5801): 977–980.
- 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. *Phys. Rev. Lett.*, **84**: 4184–4187.
- Smith, R. L. and Collins, S. D. (1992). Porous silicon formation mechanisms. *Journal of Applied Physics*, **71**(8): R1–R22.
- Stomeo, T., Errico, V., Salhi, A., Passaseo, A., Cingolani, R., D’Orazio, A., Sario, M. D., Marrocco, V., Petruzzelli, V., Prudenziario, F., and Vittorio, M. D. (2006). Design and fabrication of active and passive photonic crystal resonators. *Microelectronic Engineering*, **83**(4): 1823–1825. Micro- and Nano-Engineering MNE 2005.
- Stroud, D. (1975). Generalized effective-medium approach to the conductivity of an inhomogeneous material. *Phys. Rev. B*, **12**: 3368–3373.
- Szipócs, R. and Kóházi–Kis, A. (1997). Theory and design of chirped dielectric laser mirrors. *Appl Phys B*, **65**(1): 115–135.
- 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.
- Tinga, W. R., Voss, W. A. G., and Blossey, D. F. (1973). Generalized approach to multiphase dielectric mixture theory. *Journal of Applied Physics*, **44**(9): 3897–3902.
- Veselago, V. G. (1968). The Electrodynamics Of Substances With Simultaneously Negative Values Of  $\varepsilon$  And  $\mu$ . *Soviet Physics Uspekhi*, **10**(4): 509–514.
- Vincent, G. (1994). Optical properties of porous silicon superlattices. *Applied Physics Letters*, **64**(18): 2367–2369.
- Wolf, A., Terheiden, B., and Brendel, R. (2008). Light scattering and diffuse light propagation in sintered porous silicon. *Journal of Applied Physics*, **104**(3): 033106.
- Wu, F., Lyu, K., Hu, S., Yao, M., and Xiao, S. (2021). Ultra-large omnidirectional photonic band gaps in one-dimensional ternary photonic crystals composed of plasma, dielectric and hyperbolic metamaterial. *Optical Materials*, **111**: 110680.
- Xifré-Pérez, E., Marsal, L. F., Pallarés, J., and Ferré-Borrull, J. (2005). Porous silicon mirrors with enlarged omnidirectional band gap. *J. Appl. Phys.*, **97**(6): 064503.

- Xifré-Pérez, E., Marsal, L. F., Ferré-Borrull, J., and Pallarés, J. (2009). Low refractive index contrast porous silicon omnidirectional reflectors. *Applied Physics B*, **95**(1): 169–172.
- Xifré-Pérez, E., Ferré-Borrull, J., Pallarés, J., and Marsal, L. F. (2015). *Methods, Properties and Applications of Porous Silicon*. Springer Series in Materials Science. Springer International Publishing, Cham. ISBN 978-3-319-20346-1.
- Xu, J., Sun, Q., Wu, Z., Guo, L., Xie, S., Huang, Q., and Peng, Q. (2018). Development of broad-band high-reflectivity multilayer film for positron emission tomography system. *Journal of Instrumentation*, **13**(09): P09016–P09016.
- Yablonovitch, E., Gmitter, T. J., and Leung, K. M. (1991). Photonic band structure: The face-centered-cubic case employing nonspherical atoms. *Phys. Rev. Lett.*, **67**: 2295–2298.
- Yeh, P. (2005). *Optical Waves in Layered Media, 2nd edition*. Wiley, USA.