

CENTRO DE INVESTIGACIÓN EN MATERIALES AVANZADOS, S.C DEPARTAMENTO DE ESTUDIOS DE POSGRADO

TÍTULO: ESTUDIO DE PROPIEDADES ÓPTICAS Y ACÚSTICAS DE CRISTALES FOXÓNICOS

TESIS QUE PARA OBTENER EL GRADO DE DOCTROE EN CIENCIAS DE MATERIALES PRESENTA:

DAMIÁN MOCTEZUMA ENRÍQUEZ

DIRECTORES DE TESIS:

DIRECTOR INTERNO: DR. ALFREDO MORALES SÁNCHEZ DIRECTOR EXTERNO: DR. JESÚS MANZANARES MARTÍNEZ

MONTERREY, NUEVO LEÓN, MÉXICO.

10 de junio de 2015

Resumen

Resumen de la tesis de Damián Moctezuma Enriquez, presentada como requisito parcial para la obtención del grado de DOCTOR EN CIENCIA EN MATERIALES. Monterrey, Nuevo León, México, Junio de 2015.

Propiedades acústicas y ópticas de cristales foxónicos

Resumen aprobado por:

Dr. Jesús Manzanares Martinez Director externo Dr. Alfredo Morales Sánchez Director interno

Los cristales foxónicos son estructuras periódicas en las cuales pueden inhibirse energias de tipo fotónico y fonónico al mismo tiempo. Esta propiedad, ha sido el objeto de estudio que llevo a la creación de una nueva linea de investigación que no lleva mas de 5 años de vigencia, y cuyos resultados pueden ser prometedores para la constitucion de dispositivos que permitirian resolver problemas complicados en la industria utilizando solamente la luz y el sonido como variables de control. En este trabajo, se presentan las principales aportaciones realizadas por nuestro grupo de investigación, en las cuales a partir del estudio de la propagación electromagnética y mecánica en estructuras periódicas, se pueden encontrar propiedades dentro de la estructura de bandas prohibidas, que permiten encontrar los *gaps* que constituyen una estructura de tipo foxónica.

Agradecimientos

Quiero agradecer y dedicar el siguiente trabajo en primer lugar a mis padres Pedro y Guadalupe quienes han mantenido su paciencia y apoyo para un servidor a fin de alcanzar esta nueva meta. A mis hermanas lsidra, Ariana y Grecia, quienes con su alegría y compañía, me daban la inspiración para seguir adelante a pesar de todas las dificultades que les hice pasar. Agradezco a la Dra. María Betzabé Manzanares Martínez por el apoyo recibido gracias a su proyecto de investigación CONACYT durante el semestre Septiembre-Diciembre 2014, pués me permitió salir adelante a finales de ese año. También al Dr. Morales de la unidad CIMAV Monterrey, quien fungió como co-director en este trabajo, y auxilió muchas de las peticiones que realicé en CIMAV. Agradezco a mis compañeros Doctorados, Iván Ham y Yohan Rodríguez cuya amistad y ánimo me ha permitido aligerar la carga de trabajo que he llevado desde hace varios años.

Finalmente, y el más importante agradecimiento, al Dr. Jesús Manzanares Martínez, con quien llevo mas de 8 años colaborando, quién me ha permitido formar parte de su selecto grupo de investigación, participar en la publicación de los trabajos mas importantes del mismo, los cuales me permitieron acceder al Primer nivel dentro del Sistema Nacional de Investigadores. Su paciencia, consejo, apoyo y sobre todo amistad, fueron el motor principal que permitió culminar esta meta que ha llevado cuatro años alcanzar.

Publicaciones relacionadas con esta tesis

- "Omnidirectional Mirror in Bragg Stacks with a Periodic Gain-Loss Modulation", J. Manzanares-Martinez, C. I. Ham-Rodriguez, D. Moctezuma-Enriquez, B. Manzanares-Martinez, AIP Advances 4, 017136 (2014)
- "Experimental evidence of the non-transmission range enlargement in phononic heterostructures", D. Moctezuma-Enriquez, Y. Rodriguez-Viveros, B. Manzanares-Martinez, C. I. Ham-Rodriguez, J. Manzanares-Martinez, Adv. Studies Theor. Phys., 24, 1195 â 1204 (2013).
- "Phoxonic band gaps in porous silicon multilayers at frequencies of the visible and hypersound", D. Moctezuma-Enriquez, P. Castro-Garay, Y. Rodriguez-Viveros, J. Manzanares-Martinez, B. Manzanares-Martinez, *Adv. Studies Theor. Phys.*, 7, no. 19, 907â914 (2013).
- "Modification of the radiation of a luminescent dye embedded in a finite onedimensional photonic crystal", D. Moctezuma-Enriquez, P. Castro-Garay, Y. Rodriguez-Viveros, J. Manzanares-Martinez, Adv. Studies Theor. Phys., 7, no. 15, 707â716 (2013).
- "Non-perpendicular hypersonic and optical stop-bands in porous silicon multilayers", J. Manzanares-Martinez, D. Moctezuma-Enriquez, Y. J. Rodriguez-Viveros, B. Manzanares-Martinez, and P. Castro-Garay *Applied Physics Letters*, **101**, 261902 (2012).
- "Existence of a giant hypersonic elastic mirror in porous silicon superlattices", J. Manzanares-Martinez, P. Castro-Garay, E. Urrutia-Banuelos, Y. J. Viveros-Rodriguez, D. Moctezuma-Enriquez, and M. B. Manzanares-Martinez Applied Physics Letters, 99, 171901 (2011).
- 7. "*Heteroestructuras de Cristales Fotónicos*", J. Manzanares-Martínez, P. Castro-Garay, R. Archuleta-García, D. Moctezuma-Enríquez. *Epistemus*, **9**, 5-9 (2010).
- "One-dimensional photonic heterostructure with broadband omnidirectional reflection", J. Manzanares-Martínez, R. Archuleta-García, P. Castro-Garay, D. Moctezuma-Enríquez, and E. Urrutia-Bañuelos. *Progress In Electromagnetics Research (PIER)*, **111**, 105-107 (2011).
- "Large Frequency Range of Photonic Band Gaps on Porous Silicon Heterostructures for Infrared Applications," J. Manzanares-Martínez, P. Castro-Garay, R. Archuleta-García, and D. Moctezuma-Enríquez, Advanced Studies in Theoretical Physics, 5, 327-335 (2011).
- "Enlargement of elastic stop bands in one-dimensional phononic heterostructures," J. Manzanares-Martínez, B. Manzanares-Martínez, D. Moctezuma-Enríquez, R. Archuleta-García y P. Castro-Garay. Enviado a *Journal of Electromagnetics Waves and Applications* 24,351-361 (2010).

Índice de figuras

2.1.	(a) Geometría de una multicapa infinita. (b) Celda unitaria de periódo $d = d_H + d_L$.	8
2.2.	a) Estructura de banda fotonica para un caso unidimensional. D/Reflexion de la luz para el caso de una multicapa compuesta por 14 períodos	9
2.3.	a) Geometría de una multicapa infinita periódica, b) celda unitaria de anchura $d = d_{II} + d_{I}$	10
2.4.	En panel (a) se presenta la estructura de bandas para un cristal fonónico infinito y el panel (b) presenta la transmision para la estructura finita de cuatro períodos.	12
2.5.	(a) Variación de los límites del gap como una función del período d . (b) Re- flexión de la luz para un cristal fotónico de períodos d_I (Cuadrados) , d_{II} (Cir- culos) y d_{III} (Triángulos)' respectivamente	13
2.6.	(a). Ilustración de la Heteroestructura del espejo compuesta por tres subespejos de diferentes períodos. (b) Reflexión de la hetero-estructura para el rango del visible.	13
3.1.	Mapa de bandas como una función del factor de llenado f_a . En las zonas grises y con patrones de línea se presentan las bandas permitidas transversales y	15
3.2.	Variación del gap absoluto como función del período. El gap está delimitado	15
3.3.	por las curvas γ^+ y γ^-	16
3.4.	períodos y parámetros de red d_1 y d_2 , respectivamente	17
	respectivamente.	18
4.1.	Mapa de gaps como función de la fracción de llenado f en incidencia normal. En la región grís, se presenta el gap electromagnético. Con las las regiónes con lneas azules y rojas, se presentan los gaps elásticos. Para la fracción de llena-	
4.2.	do $f = 0.2$ (línea con puntos) todos los gaps coinciden en el rango [0.45:0.47]. Mapa de bandas prohibidas como una función de la fracción de llenado f en in- cidencia normal. En la región grís, se presenta la PtBG en unidades reducidas, Ω . Con las líneas enguionadas azules y rojas, se presenta la PnBG longitudinal y Transversal en las unidades reducidas Ξ . Para la fracción de llenado $f = 0.2$ (línea con puntos). El PtBG y ambos PnBG longitudinales y Transversales co-	23
	inciden en el Esquema de frecuencia reducida en el rango [0.45:0.47]	24

Índice general

Resumen		II	
Ag	Agradecimientos		
Índice de figuras			
1.	Introducción 1.1. Antecedentes 1.1.1. Los cristales fotónicos 1.1.2. Los cristales fonónicos 1.1.3. Los cristales foxónicos 1.1.4. Las hetero-estructuras 1.1.5. Sobre nuestra investigación en cristales fotónicos y fonónicos 1.2. Objetivos 1.3. Distribución de temas de esta tesis	1 2 3 4 5 5 6	
2.	Teoría 2.1. La estructura de bandas 2.1.1. Caso electromagnético 2.1.2. Caso elástico 2.2. Ensanchamiento del gap	7 7 9 11	
3.	Espejo hiper-sónico gigante en hetero-estructuras3.1. Introducción3.2. Teoría3.3. Resultados numéricos3.4. Conclusiones	14 14 16 17 19	
4.	Propagación con variación de ángulo en hetero-estructuras foxónicas4.1. Introducción4.2. Teoría4.3. La estructura de bandas proyectadas4.4. Conclusiones	20 22 23 24	
5.	Conclusiones	26	

Capítulo 1 Introducción

En las últimas décadas hemos sido testigos de una evolución tecnológica que ha transformado nuestra vida diaria y la sociedad en que vivimos. Esta evolución tecnológica está relacionada en gran medida con el desarrollo de la Ciencia de Materiales. Esta serie de innovaciones técnicas han sido posibles gracias al conocimiento de las propiedades físicas de materiales que permiten manipular a dos partículas: el electrón y el fotón. Por una parte, el control de electrones en materiales semiconductores ha dado lugar a la tecnología electrónica, permitiendo el desarrollo de computadoras, teléfonos móviles, cámaras digitales y una muy extensa serie de dispositivos electrónicos de uso común en nuestros días. Por otra parte, existe también un gran desarrollo para controlar los fotones, es decir la radiación electromagnética. Actualmente se tiene un notable avance en las telecomunicaciones gracias a la manipulación del flujo electromagnético, tanto en guías de luz como en la transmisión inalámbrica de la radiación. Un ejemplo de guías es la transmisión de luz por fibras ópticas utilizada para internet, y un ejemplo de transmisión inalámbrica es el uso de la tecnología bluetooth. Actualmente es posible controlar campos electromagnéticos en un amplio rango de frecuencias, el cual se extiende sobre 14 rangos de magnitud; desde la emisión electromagnética para tomografía a una frecuencia $f \simeq 10^{20}$ Hz hasta la amplitud de modulación de los radios de amplitud modulada a una frecuencia $f \simeq 10^6$ Hz.

Ademas de los electrones y fotones, existe otra partícula que es muy importante en nuestra vida diaria y a partir de la cual todavía la *Ciencia de Materiales* no ha desarrollado una tecnología basada en la comprensión de sus características físicas. Esta partícula es el fonón, el cual es responsable de la transmisión del sonido y el calor en un medio material. Los electrones, los fotones y los fonones comparten muchas caracteristicas físicas. En particular, cada una de estas tres partículas es al mismo tiempo una onda; son una dualidad onda-partícula. Las matemáticas que describen el movimiento ondulatorio de estas tres entidades físicas es similar. De esta manera, debido al gran éxito que se ha logrado en la manipulación de los electrones y los fotones, recientemente ha comenzado a desarrollarse una intensa investigación sobre la propagación de fonones.

La comprensión y el control de las propiedades fonónicas de materiales da lugar a posibilidades impresionantes tales como el aislamiento térmico de autos, casas y edificios, la reducción del ruido ambiental, la transformación del calor de disipación en electricidad y el desarrollo de protección contra terremotos [1]. El desarrollo de estas nuevas ideas que pueden desarrollarse por medio del conocimiento de la física de los fonones se extienden sobre rangos de frecuencias que no son accesibles a los electrones y en un gran rango, tampoco a los a los fotones. El espectro de energía de los fonones se extiende sobre 14 rangos de magnitud; el cual comienza en el infrasonido a una frecuencia $f \simeq 1$ Hz y termina en la propagación del calor a una frecuencia $f \simeq 10^{14}$ Hz. Para ilustrar la importancia del conocimiento sobre los fonones, basta mencionar que hoy en día existen algunas aplicaciones sónicas bien conocidas tales como el desarrollo de imagenes pre-natales a partir de ultra-sonido.

La *Ciencia de Materiales* ha comenzado a explorar la manera de manipular el sonido, el hiper-sonido y el calor con una precisión que nunca antes había sido posible. Esta nueva forma de entender la propagación de los fonones en medios materiales se basa en una descripción ondulatoria de las vibraciones mecánicas en una red periódica. Los fonones al propagarse por una red periódica dan lugar a interacciones constructivas o destructivas que son determinadas por la energía de la onda. Las vibraciones permitidas se agrupan en bandas de energía, dando lugar a la existencia de gaps de energía prohibidas en donde los fonones no pueden propagarse. Este fenómeno es similar a las bandas de energía para electrones que existen en cristales semiconductores tales como germanio o el silicio. En forma análoga a la existencia de los cristales con difracción de Bragg para electrones, en las últimas tres décadas se han introducido los conceptos de cristales fonónicos y cristales fotónicos, los cuales presentan bandas de energía para fonones y fotones, respectivamente.

Es en este contexto que se ubican los resultados de esta investigación ya que por una parte, se han encontrado los parámetros estructurales que permiten encontrar un gap gigante en el rango hipersónico para una estructura cristalina de silicio poroso. Por otra parte, hemos encontrado los parámetros estructurales que permiten la existencia de un espejo con gaps simultaneos para la luz e hipersonido. En el resto de esta introducción presentamos los conceptos mas importantes para la descripción de nuestros resultados. De esta manera describimos en diferentes secciones los conceptos de cristal fotónico, cristal fonónico, y cristal foxónico. De la misma manera presentamos la idea de heteroestructuras en donde describimos una serie de publicaciones previas a esta tesis, en donde hemos exploramos la idea de superposición de gaps.

1.1. Antecedentes

1.1.1. Los cristales fotónicos

Los cristales fotónicos son estructuras que fueron propuestas en 1987 por E. Yablonovitch [2]. Los cristales fotónicos son nano-estructras con una función dieléctrica periódica la cual interacciona con en el movimiento de fotones dando lugar a interferencias del campo electromagnético que permiten la existencia de bandas de energía permitida o bien, gaps de energía prohibidos. Los cristales fotónicos consisten en la repetición periódica de una celda unitaria a traves de una red cristalina. La celda unitaria contiene un contraste en la función dieléctrica, determinado por un espacio con una alta función dieléctrica y otro espacio con baja función dieléctrica. La existencia de bandas fotónicas prohibidas da lugar a fenómenos tales como la inhibición de la emisión espontanea, la existencia de espejos omnidireccionales y la existencia de guías de ondas. La periodicidad del cristal debe de ser del orden de la longitud de orden de la luz visible. Se ha planteado por algunos autores la posibilidad de desarrollar en base a los cristales fotónicos una tecnología similar a la tecnología electrónica. De esta manera, se plantea la posibilidad de diseñar circuitos completamente ópticos para el control de la información [3]. Sin embargo, aún queda por lograr el diseño de transistores, diodos y otros dispositivos completamente ópticos.

La fabricación de cristales fotónicos en la escala de la luz visible es una tarea experimental sumamente complicada. Hasta el momento no se ha logrado contruir una estructura tri-dimensional que exhiba gaps de energía para todas las direcciones del espacio [4]. La dificultad en la fabricación de cristales fotónicos tri-dimensionales ha impedido en gran medida el desarrollo de la tecnología basada en cristales fotónicos. Lo que si ha sido posible es diseñar estructuras fotónicas bi-dimensionales, las cuales pueden soportar cavidades y guías en el orden del visible [4].

Los métodos computacionales para estudiar los cristales fotónicos son muy diversos y una buena revisión puede encontrase en la referencia [5]. Sin embargo, el primero en ser desarrollado y ademas el más popular a lo largo de los años es el método de ondas planas. En breve, este método encuentra los eigen-modos para la estructura cristalina para cada valor del vector de onda. El método de ondas planas permite calcular la estructura de bandas de un cristal fotónico mediante un análisis de Fourier del campo electromagnético y de los parámetros estructurales. De esta manera se plantea a partir de la ecuación de onda un problema de eigen-valores el cual determina las banda permitidas. Este trabajo se basa gran medida en el uso del método de ondas planas y en el segundo capítulo dedicado a la teoría, exponemos con detalle este método.

1.1.2. Los cristales fonónicos

Los cristales fonónicos son medios compositos que estan compuestos por una variación periódica de las propiedades acústicas tales como la elasticidad, la masa y la velocidad del sonido. El desarrollo de los cristales fonónicos se inspiro en gran medida en la física de los cristales fotónicos. El nacimiento de los cristales fonónicos se realizó en el año 1993 a partir de una publicación de M. Kushwaha y P. Halevi, dos investigadores mexicanos [6].

Un cristal fonónico con una periodicidad en sus parámetros constitutivos puede evitar que las vibraciones mecánicas se propaguen en los gaps. Al igual que en el caso de los cristales fotónicos, la teoría de Bloch se utiliza para obtener la estructura de bandas. Los métodos de cálculo de los cristales fonónicos son similares a los métodos de los cristales fotónicos. Para una revisión de los métodos de cálculo en cristales fonónicos se puede consultar la referencia [7].

Para el caso de ondas electromagnéticas, solo existen dos polarizaciones independientes, las cuales son perpendiculares a la dirección del vector de propagación. Para el caso de ondas mecánicas la cuestión es mas complicada, ya que existen dos tipos de ondas; longitudinales y transversales. La primera de estas polarizaciones tiene una dirección paralela al vector de onda. La segunda de estas polarizaciones es perpendicular al vector de onda. En un sólido existen ondas longitudinales y transversales, mientras que en un fluído sólo existen las ondas longitudinales. Como resultado, si es necesario diseñar un cristal fonónico tri-dimensional con bandas prohibidas absolutas es necesario proponer una estructura con gaps para ambas polarizaciones -longitudinales y transversales- a la misma frecuencia. Esto hace que los cristales fonónicos sean más dificiles de diseñar que los cristales fotónicos. Adicionalmente, la ecuación de onda elástica es mas complicada que la ecuación de onda electromagnética, dando lugar a un problema de eigen-valores mucho mas complejo.

La existencia de estructuras con gaps fonónicos completos tienen muchas aplicaciones. Por ejemplo, un cristal fonónico puede reflejar las vibraciones mecánicas en las frecuencias del gap y por lo tanto, servir como aislador de perturbaciones mecánicas, ya sea sonido o calor. Adicionalmente, si se introducen defectos en esta estructura, las ondas mecánicas con frecuencia en el gap podrian ser atrapadas al interior del cristal o bien, se pueden crear guías a los largo de una cadena de defectos.

1.1.3. Los cristales foxónicos

Los cristales foxónicos son unas estructuras que fueron introducidas en la literatura científica por S. Sadat-Saleh *et al.* en el año 2009 para definir una estructura que sea simultáneamente un cristal fotónico y un cristal fonónico [8]. Los cristales foxónicos permiten un control simultaneo de las ondas electromagnéticas y las ondas elásticas. De esta manera, en un cristal foxónico convergen los campos de la nano-fotónica y la nano-fonónica en la misma plataforma. Se espera que sea posible lograr un control sin precedente de la luz e hiper-sonido en estas estructuras estructuras nanometricas [1, 7].

La posibilidad de que en una misma estructura coexistan gaps fotónicos y fonónicos es posible debido a que los cristales fonónicos comenzaron a ser fabricados con dimensiones cada vez mas pequeñas en la busqueda de lograr el control de las ondas de hipersonido [9]. Un el año del 2009 fueron reportadas unas estructuras periodicas unidimensionales de silicio poroso con periodos en el rango de los 37-167 nm [10]. En este cristal fonónico unidimensional no se encontraron gaps, solo un comportanmiento dispersivo de la propagación de las de ondas elásticas en el rango del hipersónico.

En esta tesis nos dimos a la tarea de optimizar la estructura propuesta en la referencia [10] y en el año 2011 publicamos los parámetros estructurales que permiten la existencia de gaps fonońicos longitudinales y transversales en el rango del hipersonido [11]. El periódo de estas estructuras permite la existencia simultánea de gaps fotónicos y fonónicos, por lo tanto estas estructuras son cristales foxónicos. Para estas estructuras tambien demostramos en el 2012 la existencia simultánea de espejos para la luz y el hiper-sonido [12]

1.1.4. Las hetero-estructuras

Las hetero-estructuras consisten en la unión de dos o más cristales. La idea fundamental es que los gaps de cada una de los cristales se pueden superponer dando lugar a un gap mas grande para la hetero-estructura. El concepto de heteroestructuras es muy importante, ya que los cristales fotónicos tienen un problema desde el punto de vista experimental. Este problema consiste en que es muy dificil construir estructuras fotónicas que tengan un considerable contraste dieléctrico. Usualmente, las estructuras periódicas que se pueden fabricar en el laboratorio tienen sólo un pequeño contraste, dando lugar a gaps pequeños. Es bien conocido que los gaps son más grandes entre mayor sea el contraste en los parámetros estructurales. De esta manera, las hetero-estructuras se plantean como una posibilidad de ensanchar un gap, considerando que si se superponen dos o más cristales el gap total será la suma de los gaps de cada uno de los cristales.

La necesidad de fabricar hetero-estructuras es particularmente importante en el caso de estructuras tri-dimensionales, ya que no ha sido posible crear una estructura 3D con un gap completo [3]. En el año 2000, S. G. Romanov *et al.* reportó la fabricación de una hetero-estructura de ópalo en donde experimentalmente se demostró el ensanchamiento en la dirección cistalográfica $\Gamma - L$ [13]. Las hetero-estructuras unidimensionales han sido extensamente estudiadas. El primer trabajo que reporta un análisis sobre estas superredes fue realizado por H. Miyazaki *et al.* en 1996 analizando la localización del campo electromagnético [14]. El primer trabajo en donde se buscó un gap gigante en una hetero-estructura fotónica unidimensional fue realizado en 1998 por J. Zi *et al.* [15]. En el año 2004 estos mismos autores extendieron el estudio de hetero-estructuras al caso de múltiples redes cristalinas [16].

1.1.5. Sobre nuestra investigación en cristales fotónicos y fonónicos

Previamente al inicio de esta tesis doctoral, se realizaron una serie de publicaciones en el año 2010 [17, 18, 19, 20] sobre el tema de cristales fotónicos gracias a los resultados obtenidos de la Tesis de Maestría en Ciencias (Física) que tuvo como título "Optimización de hetero-estructuras fotónicas de bajo índice de refracción" [21].

La publicación en la referencia [17] presentó resultados relacionados con la optimización de una hetero-estructura que experimentalmente fue reportada en la referencia [22]. En la referencia [20] se optimizaron los parámetros de la misma superred reportada en la referencia [22] para proponer la existencia de un espejo omni-direccional, es decir, un reflector de ondas electromagnéticas para cualquier ángulo de incidencia.

A partir del año 2011 y dentro del marco de esta tesis doctoral, se han publicado varios artículos sobre cristales fotónicos y fonónicos que se enlistan en las referencias [11, 12, 23, 24, 25, 26, 27, 28, 29]. Gracias a todos estos artículos, el autor de esta tesis obtuvo el reconocimiento como Investigador Nacional (nivel 1) por parte del Sistema Nacional de Investigadores (SNI) en la convocatoria 2014.

1.2. Objetivos

Objetivo Principal: En el presente proyecto de investigación se desarrollarán una serie de herramientas teóricas y numéricas para entender los complicados

mecanismos físicos involucrados en la interacción de fotones y fonones en materiales nanoestructurados.

Existen algunos temas que exploran las caracteristicas escenciales de estos materiales asi como tambien daran una aportación importante a la literatura científica.

Objetivos Secundarios:

- 1. Realizar una completa descripción teórica y numérica de la existencia de bandas prohibidas fotónicas y fonónicas en sistemas periódicos.
- 2. Optimización de gaps foxónicos en estructuras 1D.
- 3. Búsqueda de gaps gigantes mediante heteroestructuras foxónicas.

Objetivos particulares:

- 1. Desarrollo del Método de Ondas Planas el cálculo de gaps fotónicos y fonónicos en cristales foxónicos.
- 2. Desarrollo experimental de una heteroestructura unidimensional para demostrar la existencia de gaps gigantes en cristales foxónicos.

1.3. Distribución de temas de esta tesis

En esta tesis presentamos en el segundo capítulo destinado a la teoría, una serie de resultados que hemos publicado en las referencias [23, 25, 26], en donde se expone por una parte el método de ondas planas para los casos fotónico y fonónico y por otra parte, se presenta un estudio sobre hetero-estructuras en donde se desarrolla la idea de la superposición de gaps.

En el tercer capítulo presentamos los resultados publicados en la referencia [11] en donde se introduce la ley de escalabilidad de la ecuación de onda elástica, la cual fundamenta la variación de los gaps elásticos en función de la variación del parámetro de red. También se presenta la optimización de la estructura que fue experimentalmente realizada en la referencia [10] en donde hemos encontrado los parámetros estructurales que permiten la existencia de un gap para los ondas longitudinales y transversales en el rango del hiper-sonido.

En el cuarto capítulo presentamos los resultados publicados en la referencia [12] en donde presentamos un estudio sobre la existencia de espejo foxónicos que permita que una misma estructura sea un espejo para luz y el hiper-sonido. Tambien realizamos un estudio de propagación de ondas cubriendo todas las direcciones posibles. Hemos encontrado las condiciones para lograr un espejo omni-direccional para la luz, sin embargo, no fué posible encontrar los parámetros que permitan tener un espejo omni-direccional para el hiper-sonido.

Finalmente en el quinto capítulo presentamos las conclusiones de nuestro trabajo.

Capítulo 2

Teoría

En este capítulo se exponen los métodos matemáticos que fundamentan los resultados obtenidos en nuestro estudio sobre propiedades ópticas y acústicas de cristales foxónicos. Por una parte, exponemos el método de ondas planas usado para encontrar la estructura de bandas para la ecuación de onda electromagnética y para la ecuación de onda elástica. Por otra parte, exponemos nuestra estrategia para ensanchar el ancho de los gaps por medio del uso de hetero-estructuras.

2.1. La estructura de bandas

Las ecuaciones de onda electromagnética y elásticas son las siguientes

$$\nabla^{2} \mathbf{E}(\mathbf{x}) = -\frac{\omega^{2}}{c^{2}} \varepsilon(\mathbf{x}) \mathbf{E}(\mathbf{x})$$
(2.1)

у

$$-\omega^{2}\rho(\mathbf{x})u_{i}(\mathbf{x}) = \nabla \cdot \left[\rho(\mathbf{x})c_{t}^{2}(\mathbf{x})\nabla u_{i}(\mathbf{x})\right] + \nabla \cdot \left[\rho(\mathbf{x})c_{t}^{2}(\mathbf{x})\frac{\partial}{\partial x_{i}}\mathbf{u}(\mathbf{x})\right] + \frac{\partial}{\partial x_{i}}\left[\rho(\mathbf{x})c_{l}^{2}(\mathbf{x}) - 2\rho(\mathbf{x})c_{t}^{2}(\mathbf{x})\right]\nabla \cdot \mathbf{u}(\mathbf{x})$$
(2.2)

donde u_i define las componentes u_x , u_y y u_z . x_i son las coordenadas x, y y z.

2.1.1. Caso electromagnético

En la figura 2.1 se ilustra la geometría de un cristal fotónico en una dimensión. Se considera el caso de una polarización E_y del campo eléctrico propagándose en la dirección x. La ecuación de onda electromagnética se escribe

$$\frac{1}{\varepsilon(x)}\frac{\partial^2}{\partial x^2}E_y(x) = -\frac{\omega^2}{c^2}E_y(x),$$
(2.3)



Figura 2.1: (a) Geometría de una multicapa infinita. (b) Celda unitaria de periódo $d = d_H + d_L$.

donde ω y c son la frecuencia y la velocidad de la luz, respectivamente. El campo eléctrico $[E_y(x)]$ y el inverso de la función dieléctrica $[1/\varepsilon(x)]$ pueden ser escritos como una serie de Fourier en la forma

$$E_y(x) = \sum_G E_y(G)e^{i(k+G)x}$$
 (2.4)

У

$$\frac{1}{\varepsilon(x)} = \sum_{G} \alpha(G) e^{iGx}$$
(2.5)

donde k es el vector de onda. Las sumatorias se extienden sobre los vectores de la red infinita recíproca de amplitud $G = 2\pi n/d$, con $n = -\infty, \ldots, -1, 0, +1, \ldots, +\infty$. La idea del método de onda plana es sustituir las ecuaciones 2.4 y 2.5 en la ecuación 2.3 para obtener

$$\sum_{G} \alpha (G - G')(k + G')^2 E_y(G') = \frac{\omega^2}{c^2} E_y(G)$$
(2.6)

Si se permite que *G* y *G'* tomen el mismo número de puntos en la red recíproca, entonces la ecuación 2.6 será un sistema cuadrado de ecuaciones lineales. Este conjunto de ecuaciones es un problema de eigenvalores de la forma $Mx = \lambda^2 x$. Los eigenvalores (ω^2) y los eigenvectores [E(G)] puede ser obtenidos a través de rutinas numéricas estándares. Es conveniente escribir la ecuación 2.6 de tal forma

$$\sum_{n'} \alpha(n - n')(k_{red} + n')^2 E_y(n') = \omega_{red}^2 E_y(n)$$
(2.7)

donde se ha introducido $k_{red} = kd/2\pi$ y $\omega_{red} = \omega d/2\pi c$ como el vector de onda y la frecuencia reducida. Usando la identidad $\omega = 2\pi c/\lambda$, la frecuencia reducida también puede escribirse como

$$\omega_{red} = \frac{d}{\lambda}.$$
(2.8)

En la Fig. 2.2 se puede apreciar la estructura de banda típica para el caso de una multicapa de silicio poroso, en la cual sus constantes dieléctricas son $\varepsilon_H = 3.8025$ y $\varepsilon_L = 1.96$.



Figura 2.2: a) Estructura de banda fotónica para un caso unidimensional. b)Reflexión de la luz para el caso de una multicapa compuesta por 14 períodos

2.1.2. Caso elástico

Para el estudio de la propagación de las ondas longitudinales en un cristal foónico unidimensional se considera la ecuación de onda

$$-\omega^2 \rho(x) u_x(x) = \frac{\partial}{\partial x} \rho(x) c^2(x) \frac{\partial}{\partial x} u_x(x)$$
(2.9)

donde la densidad $[\rho(x)]$, la velocidad longitudinal [c(x)] y el desplazamiento de la amplitud $[u_x(x)]$ son funciones de la coordenada x. Analizamos un cristal uni-dimensional fonónico que se ilustra en la figura 2.3.



Figura 2.3: a) Geometría de una multicapa infinita periódica, b) celda unitaria de anchura $d = d_H + d_L$

Se define el escalar periódico

$$\tau(x) = \frac{1}{c_L^2} \rho(x) c^2(x)$$
(2.10)

Este escalar periódico puede escribirse en términos de la serie de Fourier como

$$\tau(x) = \sum_{n} \tau(n) e^{i2n\pi x/d}$$
(2.11)

donde los coeficientes de Fourier son dados por

$$\tau(x) = [\tau_L + f(\tau_H - \tau_L)]\delta_{n,0} + \left[(\tau_H - \tau_L)\frac{\sin(nf\pi)}{n\pi}\right](1 - \delta_{n,0})$$
(2.12)

donde $\tau_H = \rho_H c_H^2 / c_L^2$ y $\tau_L = \rho_L$. El desplazamiento es también expandido en una serie de Fourier como

$$u_x(x) = \sum_n u_x(n) e^{i[k+2n\pi/d]x}$$
(2.13)

donde k es un vector de onda paralelo al eje de las x. Sustituyendo la serie de Fourier en la ecuación 2.9 se obtiene la ecuación de eigenvalores

$$\Omega^2 \sum_{n} \rho(n-n') u_x(n') = \sum_{n'} \tau(n-n') (K+n) (K+n') u_x(n')$$
(2.14)

donde se ha introducido el vector de onda reducido y la frecuencia reducida como

$$K = kd/2\pi \tag{2.15}$$

у

$$\Omega = \gamma d / c_{ep} \tag{2.16}$$

donde γ es la frecuencia. La ecuación 2.14 determina un problema de eigenvalores donde Ω es una función de los parámetros materiales (ρ_H , ρ_L , τ_H , y τ_L) y la fracción (f). En la figura 2.5, se presenta en el panel (a) la estructura de banda para el cristal uni-dimensional. Se ha resuelto el problema de eigenvalores usando el método de ondas planas con 1001 ondas planas. Los parámetros materiales son $\rho_H = 2700 kg/m^3$, $c_H = 6300m/s$, $\rho_L = 1180kg/m^3$ y $e_L = 2540m/s$. Estos valores corresponden al aluminio y el epoxy, respectivamente. En el panel (b) se presenta la transmisión para una estructura finita de cuatro periódos que ha sido obtenida a través del método de matriz de transferencia.

2.2. Ensanchamiento del gap

Según hemos definido en la ecuación (2.8), los límites superior e inferior del gap son

$$\lambda^{+} = \frac{d}{\omega_{red}^{-}},\tag{2.17}$$

y

$$\lambda^{-} = \frac{d}{\omega_{red}^{+}}.$$
(2.18)

En el panel (a) de la figura 2.5(a) se grafica λ^+ y λ^- como una función de *d*. Se escogen tres diferentes períodos d_I , d_{II} y d_{III} . Cada subespejo bloquea un cierto rango de longitudes de onda. En el pánel (b) se muestra con cuadrados, circulos y triángulos la reflexión de la luz para los períodos d_I , d_{II} y d_{III} , respectivamente.



Figura 2.4: En panel (a) se presenta la estructura de bandas para un cristal fonónico infinito y el panel (b) presenta la transmision para la estructura finita de cuatro períodos.

Una idea para incrementar el ancho de la banda es poner estos tres cristales fotónicos juntos. En la figura 2.6 se presenta en el panel (a) la hetero-estructura compuesta por tres diferentes subespejos de períodos d_I , d_{II} y d_{III} . Se considera que cada subespejo tiene catorce celdas unitarias en total 72 bicapas de alto y bajo índices de refracción. La reflexión de la luz de ésta estructura es presentada en el panel (b). Se puede observar que existe un espejo completo en el rango de 381nm - 719nm. En la referencia [30] se ha reportado un espejo basado en una heteroestructuras *chirped* con un rango de operación similar. Sin embargo para construir este espejo es necesario preparar 308 bicapas. Por el contrario para nuestra heteroestructura se necesita sólo 73 períodos.



Figura 2.5: (a) Variación de los límites del gap como una función del período d. (b) Reflexión de la luz para un cristal fotónico de períodos d_I (Cuadrados) , d_{II} (Circulos) y d_{III} (Triángulos)' respectivamente



Figura 2.6: (a). Ilustración de la Heteroestructura del espejo compuesta por tres subespejos de diferentes períodos. (b) Reflexión de la hetero-estructura para el rango del visible.

Capítulo 3

Espejo hiper-sónico gigante en hetero-estructuras

En este capítulo se predice la posibilidad de obtener un espejo elástico hiper-sónico en hetero-estructuras. La hetero-estructura está compuesta de un tandem de múltiples redes de cristal fonónico con un rango de períodos entre 37-167 *nm* [10]. Considerando la escalabilidad de los valores propios de la ecuación de onda elástica, las redes han sido escogidas de tal manera que cada gap se superponga con el gap vecino para tener un gap gigante. Demostramos la evidencia teórica de un espejo hiper-sónico para las vibraciones transversales y longitudinales en el rango de los GHz.

3.1. Introducción

Desde el trabajo de M. Kushwaha y P. Halevi [6] los cristales fonónicos han sido intensamente investigados en los últimos años tanto por el potencial de sus aplicaciones tecnológicas como el interés en la física fundamental [31]. Como un resultado de la periodicidad de los parámetros estructurales elásticos tales como la masa, la densidad y las velocidades sónicas, la propagación de las ondas elásticas -longitudinales y transversales- se modifica debido a la dispersión de Bragg. Como resultado la relación de dispersión fonónica presenta una estructura de bandas de energía. Acotando las bandas de energía fonónica existen gaps prohibidos que pueden ser usados para controlar los fonones. Si una onda elástica incide en un cristal fonónico en la frecuencia del gap, la onda será reflejada por la estructura ya que formalmente las vibraciones mecánicas están prohibidas a esa frecuencia. Por esta razón, un cristal fonónico puede ser considerado un espejo para las ondas elásticas.

Los cristales fonónicos hiper-sónicos con gaps en el rango de GHz han sido reportados en las referefncias [32, 33, 34, 35]. Los cristales fonónicos hiper-sónicos se fabrican con un período en el orden de los 100 *nm* y tienen la característica de permitir una difracción de Bragg con los fonones de alta energía. La modificación de la densidad de estado de los fonones con altas energías tiene una gran importancia, tanto para aplicaciones tecnológicas como para la ciencia fundamental. Existe un gran número de procesos físicos que pueden ser alterados por la modificación de la relación de dispersión fonónica tales como la propagación flujo de energía térmica o la variación de la movilidad de los portadores de carga en un conductor [9]. Las aplicaciones de los cristales fonónicos hiper-sónicos incluyen la posibilidad de que el mismo medio composito puede ser también un cristal fotónico, es decir un cristal foxónico.

Recientemente ha sido publicado un trabajo en donde se reporta la fabricación experimental de un cristal fonónico unidimensional con una variación periódica de sus propiedades elásticas utilizando silicio poroso [10]. Este cristal fonónico unidimensonal fue fabricado con períodos en el rango de 37 a 167 *nm*, sin embargo, solo se puede crear un pequeño contraste en sus propiedades elásticas y como consecuencia, sólo se obtiene un estrecho gap de energía. Esta característica es similar al caso cuando se fabrica un cristal fotónico unidimensional a partir del silicio poroso, sólo se obtiene un pequeño contraste en la función dieléctrica y por lo tanto, un gap pequeño para fotones. [22]

Con el propósito de incrementar la banda prohibida fotónica en cristales fotónicos fabricados con silicio poroso, nosotros hemos publicado un par de artículos en donde reportamos el diseño hetero-estructuras para incrementar el rango de espejo fotónico [11, 12]. En este trabajo demostramos que es posible ensanchar los gaps fonónicos de un cristal construido con silicio poroso utilizando hetero-estructuras para obtener un gap tan grande como se requiera. En particular, hemos encontrado los parámetros estructurales para obtener un gap gigante hiper-sónico para ondas elásticas longitudinales y transversales en el rango de los GHz.



Figura 3.1: Mapa de bandas como una función del factor de llenado f_a . En las zonas grises y con patrones de línea se presentan las bandas permitidas transversales y longitudinales, respectivamente.



Figura 3.2: Variación del gap absoluto como función del período. El gap está delimitado por las curvas γ^+ y γ^-

3.2. Teoría

La ecuación de onda para el medio elástico es [6]

$$-\omega^{2}\rho(\mathbf{x})u_{i}(\mathbf{x}) = \nabla \cdot \left[\rho(\mathbf{x})c_{t}^{2}(\mathbf{x})\nabla u_{i}(\mathbf{x})\right] + \nabla \cdot \left[\rho(\mathbf{x})c_{t}^{2}(\mathbf{x})\frac{\partial}{\partial x_{i}}\mathbf{u}(\mathbf{x})\right] + \frac{\partial}{\partial x_{i}}\left[\rho(\mathbf{x})c_{l}^{2}(\mathbf{x}) - 2\rho(\mathbf{x})c_{t}^{2}(\mathbf{x})\right]\nabla \cdot \mathbf{u}(\mathbf{x}),$$
(3.1)

donde $\rho(x)$, $c_l(x)$ y $c_t(x)$ son la densidad de masa y las velocidades de propagación longitudinales y transversales, respectivamente. Los componentes del vector de desplazamiento u son u_i , con i = x, y, z. El método para encontrar una banda fónonica gigante en hetero-estructuras se basa en la escalabilidad de los eigenmodos de la ecuación de onda elástica.

La idea de la escalabilidad de los egenvalores puede expresarse de la siguiente manera. Supongamos que se desea conocer los eigenvalores para una determinada configuración de parámetros elásticos $\rho(x/\alpha)$, $c_l(x/\alpha)$ y $c_t(x/\alpha)$ que definen una versión comprimida o aumentada de los parámetros elásticos $\rho(x)$, $c_l(x)$ y $c_t(x)$, donde α es un parámetro de escala arbitrario. Se propone el cambio de variables $x'_i = \alpha x_i$, $\mathbf{x}' = \alpha \mathbf{x}'$ y $\nabla' = \nabla/\alpha$ en la ecuación (3.1) para obtener

$$-\frac{\omega^{2}}{\alpha^{2}}\rho(\mathbf{x}'/\alpha)u_{i}(\mathbf{x}'/\alpha) = \nabla' \cdot \left[\rho(\mathbf{x}'/\alpha)c_{t}^{2}\nabla' u_{i}(\mathbf{x}'/\alpha)\right] + \nabla' \cdot \left[\rho(\mathbf{x}'/\alpha)c_{t}^{2}(\mathbf{x}'/\alpha)\frac{\partial}{\partial x_{i}}u_{i}(\mathbf{x}'/\alpha)\right] + \frac{\partial}{\partial x_{i}'}\left[\rho(\mathbf{x}'/\alpha)c_{t}^{2}(\mathbf{x}'/\alpha) - 2\rho(\mathbf{x}'/\alpha)c_{t}^{2}(\mathbf{x}'/\alpha)\right]\nabla' \cdot \mathbf{u}(\mathbf{x}'/\alpha)$$
(3.2)



Figura 3.3: Estructura de cristal fonónico compuesta por dos redes, cada una de 22 períodos y parámetros de red d_1 y d_2 , respectivamente.

Esta equación de onda es similar la ecuación (3.1) pero para una estructura escalada. Como resultado, los eigenvalores ω se escalan a los valores $\omega' = \omega/\alpha$. Este resultado establece que si se conoce la estructura de bandas de un cristal fonónico y se desea conocer los eigenvalores de una estructura similar, pero con un factor de escala α , los eigenvalores serán escalados inversamente a ese factor α .

3.3. Resultados numéricos

Consideremos ahora un cristal fonónico unidimensional con periodicidad en la dirección x. Los parámetros materiales son $\rho(x)$, $c_l(x)$, $c_t(x)$. Si se reducimos el análisis a las ondas que se propagan en la dirección x, la ecuación de onda para la componente x es

$$-\omega^2 \rho(x) u_x(x) = \frac{\partial}{\partial_x} \rho(x) c_l^2(x) \frac{\partial}{\partial_x} u_x(x).$$
(3.3)

Para los componentes y y x de la ecuación de onda tenemos

$$-\omega^2 \rho(x) u_y(x) = \frac{\partial}{\partial_x} \rho(x) c_l^2(x) \frac{\partial}{\partial_x} u_y(x),$$
(3.4)

у

$$-\omega^2 \rho(x) u_z(x) = \frac{\partial}{\partial_x} \rho(x) c_l^2(x) \frac{\partial}{\partial_x} u_z(x).$$
(3.5)

En las ecuaciónes (3.3), (3.4) y (3.5) se consideran dos tipos diferentes de vibraciones. La ecuación (3.3) define la propagación longitudinal para la componente u_x . Las ecuaciónes (3.4) y (3.5) definen una propagación transversal para las componentes u_y y u_z . De forma curiosa, las ecuaciónes (3.3), (3.4) y (3.5) plantean idénticas ecuaciónes diferenciales. Estas tres ecuaciónes son independientes, es decir, no hay



Figura 3.4: Reflectancia para una hetero-estructura compuesta por dos redes de períodos d_1 =37 nm y d_2 =40.45 nm, respectivamente. Cada red tiene 22 celdas unitarias. Se presenta en líneas sólidas y punteadas los casos transversal y longitudinal, respectivamente.

mezcla de polarizaciones. A continuación, consideramos la propagación en un cristal unidimensional infinito, el cual tiene una celda unitaria de período *d* y parámetros materiales periódicos $\rho = \rho(x + d)$, $c_l = c_d(x + d)$ y $c_t = c_t(x + d)$. La celda unitaria está compuesta por dos materiales de densidad ρ_a y ρ_b , velocidad longitudinal c_{la} y c_{lb} y velocidad transversal c_{ta} y c_{tb} .

El factor de llenado de cada material se define como el espacio ocupado en la celda unitaria en la forma $f_a = d_a/d$ y $f_b = d_b/d$, donde d_a y d_b son el ancho de cada material. Los parámetros materiales del cristal unidimensional son escogidos a partir de la referencia [10]. De esta manera utilizamos para las densidades $\rho_a = 955.3 kg/m^3$ y $\rho_b = 118.4 kg/m^3$, para las velocidades longitudinales usamos $c_{la} = 4.3 km/s$ y $c_{lb} = 4.6 km/s$ y por último, tomamos las velocidades transversales como $c_{ta} = 2.1 km/s$ y $c_{tb} = 2.8 km/s$.

En la figura (3.1) se muestra un mapa de las bandas como una función del factor de llenado f_a la cual ha sido calculada por medio del uso del método de onda plana considerando 401 ondas planas [36]. Los valores de frecuencia están dados en unidades de frecuencia reducida, $\Omega = \gamma d/c_{tb}$. Se presentan las bandas permitidas para las polarizaciones longitudinal (u_x) y transversales $(u_y \ y \ u_z)$ en la zonas grises y con patrón de líneas, respectivamente. Se observa que para $f_a = 0.7$ se tiene una banda muy estrecha para ambas polarizaciones con límites de frecuencia reducida $\Omega^- = 0.75$ y $\Omega^+ = 0.83$ respectivamente. En la escala de frecuencia γ , estos límites están en función del período en la forma $\gamma^+ = \Omega^+ c_t b/d$ y $\gamma^- = \Omega^- c_t b/d$, respectivamente.

En la figura 3.2 se grafica en la zona gris la variación del gap absoluto en función de la variación del período en el rango de los 37 a 167 *nm*. La banda prohibida cubre un rango desde 60 a 130 GHz, permitiendo múltiples opciones de redes cristalinas para crear una hetero-estructura con gap gigante en el rango de los GHz.

Como un ejemplo de una estructura con gap gigante se muestra en la figura 3.3 una hetero-estructura, la cual está compuesta por dos cristales cada uno de 22 celdas unitarias de períodos $d_1 = 37$ nm y $d_2 = 40.45$ nm, respectivamente. En la figura 3.4 se muestra la reflectancia para la hetero-estructura. Se observa la existencia de un gap para ambas polarizaciones en el rango de 52 a 62 GHz. Si se requiere un gap mas grande, se pueden incorporar mas redes de cristal fonónico a esta heterostructura, escogiendo adecuadamente los períodos de acuerdo a la figura 3.2.

3.4. Conclusiones

En conclusión, hemos presentado una estrategia para encontrar una gap para ambas polarizaciones en una estructura cristalina de silicio poroso usando un mapa de bandas. Hemos definido la escalabilidad de la ecuación de onda elástica para fundamentar la superposición de gaps usando hetero-estructuras. Tomando en consideración la flexibilidad de la técnica de fabricación de silicio poroso, nuestra estrategia de diseño de gaps gigantes incrementa enormemente las posibilidades de aplicaciones fonónicas de hetero-estructuras en el rango de GHz.

Capítulo 4

Propagación con variación de ángulo en hetero-estructuras foxónicas

En este capítulo se estudia la propagación de ondas electromagnéticas y elásticas en un cristal foxónico. Se procede en tres etapas. En una primera etapa, se encuentran las condiciones para obtener espejos fotónicos y fonónicos para una incidencia perpendicular a la interfase. En una segunda etapa, se determina la variación angular del espejo óptico y elástico calculando la estructura de bandas proyectada. Finalmente en un tercera etapa, encontramos por un parte que no existen condiciones para obtener un espejo omni-direccional para ondas electromagnéticas y por otra parte, se encuentran las condiciones para obtener un espejo omni-direccional para ondas elásticas en el rango de GHz.

4.1. Introducción

Desde hace años se ha establecido que la propagación de ondas elásticas y electromagnéticas en estructuras periódicas puede bloquearse en ciertos rangos de frecuencia, dando origen a gaps de energía fotónicos y fonónicos [2, 37]. Por muchos años la investigación sobre cristales fotónicos y cristales fonónicos se ha considerado como dos diferentes áreas de invetigacion, aunque se han desarrollado similares métodos de cálculo, considerando redes de diferente escala. Una red típica para un cristal fonónico con un gap en el rango del visible es d_{PtC} =290 nm [32], mientras que la red periódica para un cristal fonónico en el regimen audible es de d_{PnC} = 1 *cm* [33]. De esta manera tenemos que el período para un cristal fonónico es mucho mayor que el período para un cristal fotónico, $d_{PnC} >> d_{PtC}$.

En el año 2006, M. Maldovan y E. Thomas exploraron la localización simultánea de fotones y fonones en estructuras periódicas bi-dimensionales [34]. Como una condición indispensable para la existencia simultánea de la localización de luz y sonido es necesario tener una estructura que posea simultáneamente gaps fotónicos y fonónicos. Estos autores encontraron que una estructura periódica bi-dimensional con agujeros de aire en un bloque sólido de silicio soporta simultáneamente gaps para la luz y el sonido para todas las direcciones cristalográficas en el plano de periodicidad. De esta manera se encontró por una parte que si la estructura periódica es fabricada

con un período de red *d*= 150 nm, existen gaps fotónicos para los modos Transversal Electrico (TE), los cuales se caracterizan por no tener campo eléctrico en la dirección de propagación. Este gap fotónico se encuentra entre 4×10^{14} y 5.8×10^{14} Hz. Por otra parte, se encontró un gap elástico en un rango entre los 1.36×10^{10} y 2.16×10^{10} Hz. Es importante considerar que los gaps electromagnéticos y elásticas son diferentes debido a que la longitud de onda de la luz (λ_{light}) y del sonido (λ_{sound}) están en el orden del período de la red ($\lambda_{light} \sim \lambda_{sound} \sim d$).

Existen algunos estudios que han reportado la existencia de estructuras que soportan simultáneamente gaps electromagnéticos y elásticos [8, 35, 38]. La existencia de cavidades, donde simultáneamente es posible localizar luz y sonido ha sido explorada en cavidades unidimensionales en la referencia [38] y para las bi-dimensionales se han reportado en la referencia [39]. Para definir una estructura que soporta simultáneamente gaps fotónicos y fonónicos se introdujo en concepto de cristal foxónico [8]. Los cristales foxónicos ofrecen la posibilidad de permitir la interacción deluz y sonido en la misma estructura.

Recientemente se han reportado algunos artículos que reportan el diseño y fabricación de cristales fonónicos hiper-sónicos para establecer gaps en el rango de 1GHz a 100 GHz [9]. Los cristales foxónicos hiper-sónicos abren una vía para explorar nuevos fenómenos físicos. Por ejemplo, una posibilidad muy interesante es la de lograr el control del fluido térmico. Esta caractrística es viable ya que se ha especulado que los gaps fonónicos al perturbar la densidad de estados, permiten la posibilidad de construir un comportamiento dispersivo para propiedades macroscópicas tales como la conductividad térmica y la capacidad calorífica [9]. También es posible considerar el aprovechamiento de la interacción acusto-óptica en cristales foxónicos aprovechando el hecho de que se comparte una longitud de onda común para luz y el sonido. De esta manera, se abre la posibilidad de que los cristales foxónicos sean el marco para la construcción de dispositivos tecnológicos que aprovechen la existencia de gaps y defectos en la misma estructura [40].

El silicio poroso es un material flexible usado para fabricar estructuras periódicas con una variación dieléctrica y elástica de sus parámetros constitutivos. Estos parámetros estructurales varían en función de la porosidad del silicio poroso. El control de la porosidad permite cambiar las propiedades ópticas y elásticas. Por un lado, la diferencia de porosidad permite la variación del índice de refracción. Por el otro, el cambio de la porosidad cambia la densidad de material y la velocidad transversal y longitudinal del sonido. Por una parte, el silicio poroso permite la variación del índice de la función dieléctrica en función de la la taza de porosidad. Por otra parte, la variación de porosidad también permite variar la densidad del material y las velocidades longitudinales y transversales de las ondas mecánicas. La existencia de espejos de Bragg ópticos en la dirección perpendicular a la interfase de un cristal fotónico unidimensional se conoce desde hace varios años [41]. Sin embargo, es conveniente explorar la variación del gap de los espejos como función del ángulo de incidencia para lograr la inhibición de la propagación de ondas electromagnéticas y elásticas, independientemente de su dirección de propagación. De esta manera surge una pregunta, ¿puede existir una estructura que permita la existencia de un espejo omni-direccional simultáneo para ondas elásticas y electromagnéticas?

4.2. Teoría

Para contestar la pregunta de la sección anterior, consideremos una estructura periódica unidimensional cuyas compomentes de alto y bajo índice de densidad son ρ_H y ρ_L y los espesores son d_H y d_L respectivamente. Cada componente puede soportar ondas longitudinales y transversales que se propagan a velocidades transversales $c_{t,H}$ y $c_{t,L}$ y velocidades longitudinales $c_{l,H}$ y $c_{l,L}$, respectivamente. El medio composito tiene una periodicidad que permite describir al cristal por las funciónes periódicas $\rho(x, y) = \rho(x + d, y)$, $c_t(x, y) = c_t(x + d, y)$ y $c_l(x, y) = c_l(x + d, y)$ donde $d = d_H + d_L$ está definido como el período. Para obtener la estructura de banda se calculan los modos sagitales vibracionales, los cuales son modos mixtos de ondas elásticas transversales y longitudinales. La ecuación de onda mecánica a resolver es

$$\rho(x)\frac{\partial}{\partial t^2}u_i(x,y) = \nabla \cdot \left[\rho(x)c_t^2(x)\nabla u_i(x,y)\right] + \nabla \cdot \left[\rho(x)c_t^2(x)\frac{\partial}{\partial x_i}\mathbf{u}(x,y)\right] + \frac{\partial}{\partial t^2}\left\{\left[\rho(x)c_l^2(x) - 2\rho(x)c_t^2(x)\right]\nabla \cdot \mathbf{u}(x,y)\right\}$$
(4.1)

donde u_i define a los componentes u_x , u_y y las componentes x_i son las coordenadas x y y.

Para determinar la estructura de banda fotónica, se considera una celda unitaria con componetes periódicas de alta y baja función dieléctrica ε_H y ε_L . Se consideran dos polarizaciones independientes. Una polarización es la transversal electrica (TE) donde el campo eléctrico es paralelo al eje *z*. La otra polarización es la transversal magnetica (TM), donde el campo magnético es paralelo al ejez *z*. Las ecuaciónes de onda para los campos electrico y magnetico que definen a los modos TE y TM son

$$\frac{1}{\varepsilon(x)} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) E_z(x, y, t) = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} E_z(x, y, t)$$
(4.2)

$$\left[\frac{\partial}{\partial x}\frac{1}{\varepsilon(x)}\frac{\partial}{\partial x} + \frac{1}{\varepsilon(x)}\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right]H_z(x,y,t) = \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}H_z(x,y,t)$$
(4.3)

En nuestros cálculos, se escogen los parametros materiales acorde a la referencia [10]. Las funciónes dieléctricas son $\varepsilon_H = 5.76$ y $\varepsilon_L = 4.41$, las densidades son $\rho_H = 118.4$ kg/m³ y $\rho_L = 955.3$ kg/m³, las velocidades longitudinales son $c_{l,H} = 4.6$ km/s y $c_{l,L} = 4.3$ km/s y las velocidades transversales son $c_{t,H} = 2.8$ km/s y $c_{t,L} = 2.1$ km/s. El factor de llenado es definido como el espacio ocupado por el material de alta densidad en la celda unitaria, $f = d_H/d$. La figura 4.1 representa el mapa de frecuencias prohibidas como función del factor de llenado f. Se considera el caso de la propagación de las ondas elásticas y electromagnéticas a lo largo del vector normal a las interfases. Por un lado, la frecuencia de ondas electromagnéticas en frecuencias reducidas



Figura 4.1: Mapa de gaps como función de la fracción de llenado f en incidencia normal. En la región grís, se presenta el gap electromagnético. Con las las regiónes con lneas azules y rojas, se presentan los gaps elásticos. Para la fracción de llenado f = 0.2 (línea con puntos) todos los gaps coinciden en el rango [0.45:0.47].

es $\Omega = \omega d/2\pi c$. Por otro lado, la frecuencia de para ondas elásticas en unidades reducidas es $\Xi = \omega d/2\pi c_{l,H}$. Las zonas gríses definen las bandas prohibidas para ondas electromagnéticas y para una incidencia normal los modos TE y TM coinciden. Las líneas rojas y azules presentan las bandas prohibidas para las vibraciones mecánicas longitudinales y transversales, respectivamente. En general, las bandas prohibidas para las vibraciones mecánicas y electromagnéticas no coinciden, Sin embargo, se observa una región donde las bandas prohibidas coinciden tanto para luz como para las vibraciones mecánicas. Esta región corresponde al caso del factor de llenado f = 0.2 (línea vertical punteada) localizado alrededor de $\Omega = \Xi = 0.46$.

4.3. La estructura de bandas proyectadas

En la figura 4.2 se muestra la banda proyectada para ondas electromagnéticas y elásticas en los paneles (a) y (b), respectivamente. En el panel (a) se tiene, en el eje de las ordenadas, el vector de onda paralelo en unidades reducidas $K_y = k_y d/2\pi$. Las



Figura 4.2: Mapa de bandas prohibidas como una función de la fracción de llenado *f* en incidencia normal. En la región grís, se presenta la Pt-BG en unidades reducidas, Ω . Con las líneas enguionadas azules y rojas, se presenta la PnBG longitudinal y Transversal en las unidades reducidas Ξ . Para la fracción de llenado f = 0.2 (línea con puntos), El PtBG y ambos PnBG longitudinales y Transversales coinciden en el Esquema de frecuencia reducida en el rango [0.45:0.47].

zonas azules son las bandas permitidas para los modos TM y la zona con líneas rojas son los modos TE. Se han definido cuatro líneas de luz. De arriba a abajo tenemos las líneas para el aire $L_{air} = K_y/\sqrt{\varepsilon_{air}}$, para la función dieléctrica de bajo contraste $L_{low} = K_y/\sqrt{\varepsilon_L}$, la función dieléctrica de alto contraste $L_{high} = K_y/\sqrt{\varepsilon_H}$ y el la línea de luz para el diamante $L_D = K_y/\sqrt{\varepsilon_D}$, donde $\varepsilon_D = 2.8^2$. Se observa que para el caso electromagnético, no se tienen condiciones para obtener un espejo omni-direccional debido a la baja función dielectrica del silicio. En el panel (b) se presentan en las zonas verdes los modos sagitales permitidos. Se tienen tres líneas de sonido, la línea del material de baja densidad $S_{low} = (c_{l,L}/c_{l,H})Q_y)$, la línea de material de alta densidad, $S_{high} = Q_y$, y la línea del diamante $S_D = (c_{l,D}/c_{l,H})Q_y$ donde la velocidad longitudinal para el diamante es $c_{l,D} = 17.5$ km/s. En el lado izquierdo de la línea del diamante S_D , tenemos una región que se relaciona con un OM entre las frecuencias 0.47 y 0.49, la cual ha sido ilustrada con una zona amarilla.

4.4. Conclusiones

Se estudió la propagación con variación angular en un crstal foxónico. Se encontró que no es posible encontrar un espejo omni-dreccional para ondas electromagnéticas, pero si se encontró para ondas elásticas. Para obtener el espejo omnidireccional se consideró que el medio externo al cristal foxónico es el diamante.

Capítulo 5 Conclusiones

En el contexto de el trabajo para esta tesis doctoral se han realizado una serie de trabajos sobre cristales fotónicos, cristales fonónicos y cristales foxónicos. Sin embargo, los trabajos de mayor factor de impacto y en la literatura científica son dos trabajos, correspondientes a las referencias [11, 12]. De esta manera, es sobre dos estos artículos sobre los cuales se ha desarrollado esta tesis. Nuestra idea en este documento es la de presentar de la manera más clara que nos ha sido posible, nuestras principales aportaciones al campo de los cristales foxónicos. Hemos hecho un especial énfasis en explicar el contexto científico en el cual estas aportaciones han sido planteadas, exponiendo de esta manera su relevancia en el desarrollo de investigación de alta calidad.

Las ideas que pueden ser desarrolladas alrededor del campo de los cristales foxónicos son súmamente interesantes, tanto desde el punto de vista científico como desde del punto de vista tecnológico. Desde el punto de vista científico, porque a partir de la existencia de los cristales foxónicos se tiene un medio material con ausencia de estados permitidos para las ondas elásticas y electromagnéticas. Desde el punto de vista tecnológico, porque la introducción de un nuevo material con una densidad cero de estados fonónicos y fotónicos puede dar lugar a circunstancias en donde se puedan realizar interacciones luz y sonido de manera controlada en un defecto, permitiendo el desarrollo de nuevos dispositivos opto-acústicos.

En este trabajo hemos planteado en el capítulo 2 el método más importante para el cálculo de bandas de energía electromagnéticas y elásticas, basados en el desarrollo del metódo de ondas planas. De la misma forma, se presenta en este capítulo un análisis del ensanchamiento de los gaps en hetero-estructuras.

En el capítulo 3 hemos presentado la existencia de un gap hiper-sónico en estructuras de silico poroso. Hemos diseñado una estrategia de optimización estructuras de bajo contraste y encontrado las condiciones para tener un gap, fundamentando nuestro análisis en la derivación de la ley de escalamiento elástico. Nuestro análisis nos permite la posibilidad de diseñar un gap tan grande como se requiera.

En el capitulo 4 analizamos la propiedades de las ondas ópticas y elásticas con una dirección arbitaria de propagación al interior de un cristal foxónico. Nuestra idea era la de encontrar un espejo omni-dreccional electromagnético y elástico. Encontramos las condiciones para obtener el espejo omni-direccional elástico, sin embargo, nos dimos cuenta de que para el silicio poroso no se puede encontrar un espejo omni-direccional

electromagnético debido al bajo contraste dieléctrico.

.

Consideramos que nuestros resultados son sólo un primer paso para el enetendimiento de cristales foxónicos. Existen muchas posibilidades que por las cuales se puede avanzar en el conocimiento de estas estructuras. Por ejemplo, nuestro trabajo ha sido basado por completo en estructuras uni-dimensionales. Queda por explorar estructuras en dos dimensiones y tres dimensiones. Otra posibilidad por explorar es la existencia de defectos en cristales foxońicos. Esperamos en los próximos años realizar nuevas contribuciones en esta dirección.

Bibliografía

- M. Maldovan, "Sound and heat revolutions in phononics," *Nature*, vol. 503, pp. 209–217, 2013.
- [2] E. Yablonovitch, "Inhibited spontaneous emission in solid-state physics and electronics," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 58, pp. 2059–2062, May 1987.
- [3] J. D. Joannopoulos, S. G. Johnson, J. N. Winn, and R. D. Meade, *Photonic Crystals: Molding the Flow of Light*. Princeton University Press, 2008.
- [4] J. M. Lourtioz, *Photonic Crystals: Towards Nanoscale Photonic Devices*. Springer, 2008.
- [5] K. Yasumoto, *Electromagnetic Theory and Applications for Photonic Crystals*. CRC Press, 2008.
- [6] M. S. Kushwaha, P. Halevi, L. Dobrzynski, and B. Djafari-Rouhani, "Acoustic band structure of periodic elastic composites," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 71, pp. 2022–2025, 1993.
- [7] P. Deymier, Acoustic Metamaterials and Phononic Crystals. Springer, 2013.
- [8] S. Sadat-Saleh, S. Benchabane, F. I. Baida, M. P. Bernal, and V. Laude, "Tailoring simultaneous photonic and phononic band gaps," *J. Appl. Phys.*, vol. 106, p. 074912, 2009.
- [9] T. Gorishnyy, C. K. Ullal, M. M. G. Fytas, and E. L. Thomas, "Hypersonic phononic crystals," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 94, p. 115501, 2005.
- [10] L. C. Parsons and G. T. Andrews, "Observation of hypersonic phononic crystal effects in porous silicon superlattices," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 95, p. 241909, 2009.
- [11] D. Moctezuma-Enriquez, Y. J. Rodriguez-Viveros, M. B. Manzanares-Martinez, P. Castro-Garay, E. Urrutia-Banuelos, and J. Manzanares-Martinez, "Existence of a giant hypersonic elastic mirror in porous silicon superlattices," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 99, p. 171901, 2011.
- [12] J. Manzanares-Martinez, D. Moctezuma-Enriquez, Y. J. Rodriguez-Viveros, M. B. Manzanares-Martinez, and P. Castro-Garay, "Non-perpendicular hypersonic and optical stop-bands in porous silicon multilayers," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 101, p. 261902, 2012.

- [13] S. G. Romanov, H. M. Yates, M. E. Pemble, and R. M. D. L. Rue, "Opal-based photonic crystal with double photonic bandgap structure," *Journal of Physics: Condensed Matter*, vol. 12, no. 37, p. 8221, 2000.
- [14] H. Miyazaki, Y. Jimba, and T. Watanabe, "Multiphotonic lattices and stark localization of electromagnetic fields in one dimension," *Phys. Rev. A*, vol. 53, pp. 2877– 2880, 1996.
- [15] Z. Jian, W. Jun, and Z. Chun, "Large frequency range of negligible transmission in one-dimensional photonic quantum well structures," *Applied Physics Letters*, vol. 73, no. 15, 1998.
- [16] Z. Chun, Q. Feng, W. Jun, and Z. Jian, "Enlargement of nontransmission frequency range in photonic crystals by using multiple heterostructures," *Journal of Applied Physics*, vol. 87, no. 6, 2000.
- [17] R. Archuleta-García, D. Moctezuma-Enriquez, and J. Manzanares-Martínez, "Enlargement of photonic band gap in porous silicon dielectric mirrors," *Journal of Electromagnetic Waves and Applications*, vol. 24, pp. 351–361, 2010.
- [18] J. Manzanares-Martínez, R. Archuleta-García, and D. Moctezuma-Enriquez, "Determination of electromagnetic cavity modes using finite-difference frequency domain method," *Latin American Journal of Physics Education*, vol. 4, pp. 320–324, 2010.
- [19] J. Manzanares-Martínez, P. Castro-Garay, R. Archuleta-García, D. Moctezuma-Enriquez, and M. A. Velarde-Chon, "Complex band structures in one-dimensional photonic heterostructures," *Advanced Studies in Theorethical Physics*, vol. 4, pp. 759–772, 2010.
- [20] J. Manzanares-Martínez, R. Archuleta-García, P. Castro-Garay, D. Moctezuma-Enriquez, and E. Urrutia-Banuelos, "One-dimensional photonic heterostructure with broadband omnidirectional reflection," *Progress In Electromagnetics Research (PIER)*, vol. 12, pp. 105–117, 2010.
- [21] D. Moctezuma-Enriquez, Tesis de Maestria: "Optimización de Heteroestructuras Fotónicas de bajo indice de refracción", J. Manzanares-Martínez (Director). Departamento de Investigación en Fisica, Universidad de Sonora, 2009.
- [22] V. Agarwal and J. A. del Rio, "Tailoring the photonic band gap of a porous silicon dielectric mirror," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 82, p. 1512, 2003.
- [23] J. Manzanares-Martinez, P. Castro-Garay, R. Archuleta-Garcia, and D. Moctezuma-Enriquez, "Large frequency range of photonic band gaps on porous silicon heterostructures for infrared applications," *Advanced Studies in Theoretical Physics*, vol. 5, pp. 327–335, 2011.
- [24] J. Manzanares-Martinez, P. Castro-Garay, E. Urrutia-Banuelos, and D. Moctezuma-Enriquez, "Analytical determination of the stop band tuning

of photonic crystals infiltrated with liquid crystals," *Advanced Studies in Theoretical Physics*, vol. 5, pp. 551–557, 2011.

- [25] B. Manzanares-Martinez, L. Castro-Arce, P. J. Avila-Diaz, Castro-Garay, E. Urrutia-Banuelos, and J. Manzanares-Martinez, "Longitudinal and transverse elastic waves in one-dimensional phononic crystals," *Advanced Studies in Theoretical Physics*, vol. 6, pp. 19–25, 2012.
- [26] D. Moctezuma-Enriquez, Y. Rodriguez-Viveros, B. Manzanares-Martinez, C. I. Ham-Rodriguez, and J. Manzanares-Martinez, "Experimental evidence of the nontransmission range enlargement in phononic heterostructures," *Advanced Studies in Theoretical Physics*, vol. 24, pp. 1195–1204, 2013.
- [27] D. Moctezuma-Enriquez, P. Castro-Garay, Y. Rodriguez-Viveros, J. Manzanares-Martinez, and B. Manzanares-Martinez, "Phoxonic band gaps in porous silicon multilayers at frequencies of the visible and hypersound," *Advanced Studies in Theoretical Physics*, vol. 19, pp. 907–914, 2013.
- [28] D. Moctezuma-Enriquez, P. Castro-Garay, Y. Rodriguez-Viveros, and J. Manzanares-Martinez, "Modification of the radiation of a luminescent dye embedded in a finite one-dimensional photonic crystal,," *Advanced Studies in Theoretical Physics*, vol. 7, pp. 707–716, 2013.
- [29] J. Manzanares-Martinez, C. I. Ham-Rodriguez, D. Moctezuma-Enriquez, and B. Manzanares-Martinez, "Omnidirectional mirror based on bragg stacks with a periodic gain-loss modulation," *AIP Advances*, vol. 4, no. 1, p. 017136, 2014.
- [30] V. Agarwal and J. A. del Rio, "Filters, mirrors and microcavities from porous silicon," *Int. J. Mod. Phys. B*, vol. 20, pp. 99–110, 2006.
- [31] R. H. O. III and I. El-Kady, "Microfabricated phononic crystal devices and applications," *Measurement Science and Technology*, vol. 20, no. 1, p. 012002, 2009.
- [32] S. G. Romanov, T. Maka, C. M. Sotomayor Torres, M. Müller, R. Zentel, D. Cassagne, J. Manzanares-Martínez, and C. Jouanin, "Diffraction of light from thinfilm polymethylmethacrylate opaline photonic crystals," *Phys. Rev. E*, vol. 63, p. 056603, Apr 2001.
- [33] R. MAartínez-Sala, J. Sancho, J. V. Sánchez, V. Gómez, J. Linares, and F. Meseguer, "Sound attenuation by sculpture," *Nature*, vol. 378, pp. 241–324, 1995.
- [34] M. Maldovan and E. Thomas, "Simultaneous localization of photons and phonons in two-dimensional periodic structures," *Applied Physics Letters*, vol. 25, pp. 251907–251910, 2006.
- [35] M. Maldovan and E. Thomas, "Simultaneous complete elastic and electromagnetic band gaps in periodic structures," *Applied Physics B: Lasers and Optics*, vol. 4, pp. 595–600, 2006.

- [36] B. Manzanares-Martínez and F. Ramos-Mendieta, "Surface elastic waves in solid composites of two-dimensional periodicity," *Phys. Rev. B*, vol. 68, p. 134303, Oct 2003.
- [37] M. S. Kushwaha, P. Halevi, L. Dobrzynski, and B. Djafari-Rouhani, "Theory of acoustic band structure of periodic elastic composites," *Phys. Rev. B.*, vol. 49, pp. 2313–2322, 1994.
- [38] A. V. Akimov, Y. Tanaka, A. B. Pevtsov, S. F. Kaplan, V. G. Golubev, S. Tamura, D. R. Yakovlev, and M. Bayer, "Hypersonic modulation of light in three-dimensional photonic and phononic band-gap materials," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 101, p. 033902, Jul 2008.
- [39] Q. Rolland, M. Oudich, S. El-Jallal, S. Dupont, Y. Pennec, J. Gazalet, J. C. Kastelik, G. LévÃ^aque, and B. Djafari-Rouhani, "Acousto-optic couplings in twodimensional phoxonic crystal cavities," *Applied Physics Letters*, vol. 101, no. 6, pp.-, 2012.
- [40] J. M. Liu, *Photonic Devices*. Cambridge University press, 2005.
- [41] G. Vincent, "Optical properties of porous silicon superlattices," *Applied Physics Letters*, vol. 64, no. 18, 1994.