

**CENTRO DE INVESTIGACIÓN EN MATERIALES
AVANZADOS, S.C.**

DEPARTAMENTO DE ESTUDIOS DE POSGRADO



Determinación de las condiciones óptimas para controlar las propiedades ópticas reflectivas de un cristal fotónico bidimensional de Si-ZnO.

Presenta:

Ing. Físico José Antonio Medina Vázquez

Director de tesis:

Dr. José Guadalupe Murillo Ramírez

Chihuahua, Chihuahua

Junio de 2019

RESUMEN

En este trabajo se realizó el diseño, construcción y caracterización estructural y óptica de una estructura fotónica que contiene un arreglo de micro-cavidades ópticas cuasi-circulares y que tiene la habilidad de manipular la reflectancia óptica de manera selectiva en el dominio de las frecuencias. Se llevó a cabo una variación sistemática de las características estructurales durante la resolución numérica de las propiedades de la estructura fotónica bajo estudio, con la finalidad de controlar el pico máximo de reflectancia en el rango de frecuencias del visible-infrarrojo cercano (VIS-NIR). Se compararán las propiedades ópticas de la estructura construida con los resultados obtenidos de las simulaciones numéricas con el objetivo de observar su concordancia.

TABLA DE CONTENIDO

OBJETIVO GENERAL	5
OBJETIVOS ESPECÍFICOS	5
HIPÓTESIS	5
CAPITULO I	6
INTRODUCCION.....	6
1.1 Control de las propiedades de un material.....	6
1.2 Cristales fotónicos	7
1.3 Estado del arte	9
CAPITULO II	10
CARACTERISTICAS DE LOS CRISTALES FOTONICOS	10
2.1 CF unidimensional	10
2.2 CF bidimensionales	11
2.3 CF tridimensionales	13
2.4 CF de placas	14
2.5 Difracción.....	15
2.6 Refracción e índice de refracción	16
CAPITULO III.....	18
ECUACIONES DEL FENOMENO.....	18
3.1 Ecuaciones de Maxwell.....	18
3.2 Ecuación de la onda para medios materiales	19
3.3 Bandas fotónicas.....	21
3.3.1 Red reciproca	23
CAPITULO IV	26
DISEÑO DEL CRISTAL FOTÓNICO DE INTERES.....	26
4.1 Caracterización de un CF previamente construido.....	27
4.1.1 Resultados de la caracterización del CF previamente construido	30
CAPITULO V.....	34
SIMULACIÓN NUMERICA DE PROPIEDADES DE CF	34
5.1 Discretización de las ecuaciones de Maxwell.....	35
5.2 Discretización de las ecuaciones de Maxwell bidimensionales	37

5.3 Método de Diferencias Finitas Dependiente del Tiempo (FDTD)	38
5.3.1 Método FDTD para el cálculo de estructura de bandas fotónicas	42
CAPITULO VI	44
DISEÑO Y CONSTRUCCIÓN DE LOS CF.....	44
6.1 Simulación numérica del CF previamente construido	44
6.2 Simulación numérica para inducir un corrimiento del pico máximo de reflectancia.....	47
6.3 Construcción de un nuevo CF con corrimiento de la reflectancia hacia longitud de onda menores (CA).	48
CAPITULO VII	53
RESULTADOS.....	53
7.1 Resultados obtenidos de la caracterización del CF previamente construido... 53	
7.2 Resultados obtenidos de la caracterización del CF-CA.....	54
7.3 Control de las propiedades ópticas reflectivas del CF	57
7.4 Estructura de bandas fotónicas de los CF con $F = 0.5$ y $F = 1$	59
7.5 Variación del espesor de la película delgada de ZnO.....	61
CONCLUSIONES.....	63
REFERENCIAS	65

OBJETIVOS

OBJETIVO GENERAL

Determinar las condiciones bajo las cuales es posible controlar las propiedades ópticas reflectivas de una estructura fotónica bidimensional híbrida de Si-ZnO que contiene un arreglo estructural de micro-cavidades ópticas.

OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Caracterización de las propiedades ópticas reflectivas de una estructura fotónica 2D previamente construida descrita por una malla cuadrada periódica construida sobre un sustrato Si-ZnO que adicionalmente contiene un arreglo ordenado de micro-cavidades ópticas circulares definiendo una segunda red estructural.
- Determinación del origen del comportamiento de la reflectancia como función de la longitud de onda de la radiación incidente en la estructura fotónica bidimensional bajo estudio.
- Simulación numérica de las propiedades ópticas reflectivas de la estructura fotónica bidimensional descrita por una malla cuadrada que contiene el arreglo de micro-cavidades circulares.
- Diseñar una estructura fotónica bidimensional de Si-ZnO que posea los parámetros estructurales adecuados para correr en el espacio de las longitudes de onda el pico máximo de reflectancia de la estructura fotónica híbrida

HIPÓTESIS

Es factible modificar la reflectancia óptica y efectuar un corrimiento del pico máximo en el espacio de las longitudes de onda en los materiales fotónicos construidos. Esto mediante la introducción de defectos estructurales, la variación de las dimensiones del parámetro de red y el diámetro de los orificios introducidos en la red periódica regular que los define.

CAPITULO I

INTRODUCCION

1.1 Control de las propiedades de un material

En el siglo XX, el control sobre los materiales se extendió hasta las propiedades eléctricas. Los avances en la física de semiconductores han permitido mejorar las propiedades eléctricas conductivas de ciertos materiales, dando inicio a la revolución del transistor en la electrónica. Es difícil de subestimar el impacto que los avances en estos campos han tenido en nuestra sociedad. Con nuevos materiales compuestos, cerámicos, polímeros, entre otros, los científicos han inventado materiales exóticos que pueden formar la base de la tecnología del futuro.

En las últimas décadas una nueva frontera se ha abierto, la meta ahora es controlar las propiedades ópticas de los materiales. Un enorme rango de desarrollos tecnológicos será posible si es factible diseñar materiales que respondan a ondas de luz en un rango de frecuencias deseado, haciendo que estas sean transmitidas o por otra parte perfectamente reflejadas, permitiendo su propagación sólo en determinadas direcciones o confinándolas dentro de un volumen específico. Las fibras ópticas que sólo guían ondas de luz, ya han revolucionado la industria de las telecomunicaciones. El diseño de láseres, computación de alta velocidad, y el desarrollo de nuevas técnicas espectroscópicas son sólo algunos de los campos y/o técnicas que se verán beneficiados por el avance de los materiales ópticos.

1.2 Cristales fotónicos

Una vez establecida la importancia del control de las propiedades ópticas de los materiales, inevitablemente surge la pregunta ¿Qué clase de material permite el control total de la propagación de la luz o radiación electromagnética en el caso general? Para responder esta pregunta, se puede recurrir a una analogía con la electrónica dado su gran éxito en el desarrollo de dispositivos de alta tecnología. Un cristal es una estructura periódica de átomos o moléculas. La estructura en la que los átomos o moléculas se repiten es llamada red cristalina. El cristal presenta un potencial eléctrico periódico $V(r)$ para un electrón que se propaga a través de él, así los constituyentes del cristal y la geometría de la red dictan las propiedades eléctricas de conducción para el cristal.

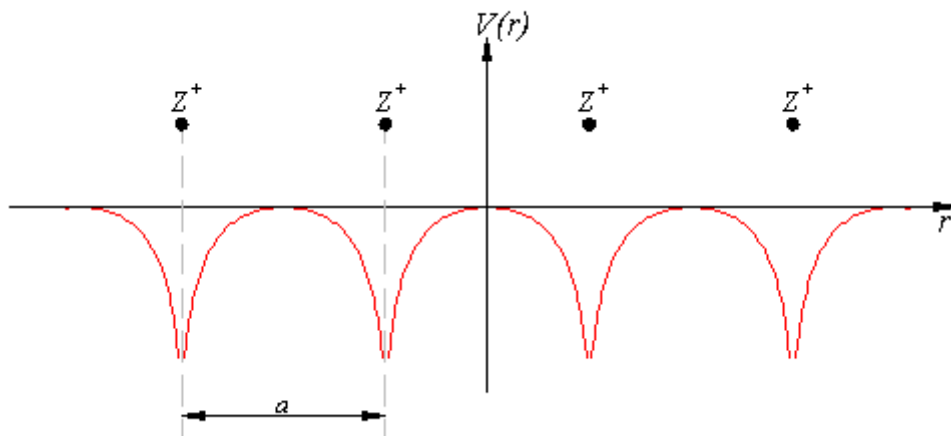


Figura 1. Potencial eléctrico periódico unidimensional

La mecánica cuántica aplicada a un material que presenta un potencial periódico explica la propagación de los electrones en distintos materiales y los efectos consecuentes. Esto es debido a que los electrones tienen un comportamiento ondulatorio y la presencia del potencial periódico permite la propagación sin dispersión de los electrones (o dispersarlos por medio de la adición de impurezas o

defectos) en ciertas direcciones específicas dependientes de la disposición espacial atómica o el tipo de red cristalina que presenta el material.

Aún más importante, la red también tiene la capacidad de prohibir la propagación (en ciertas direcciones) de determinados electrones con algún rango de energía. Si el potencial de la red cumple con determinadas condiciones geométricas y energéticas, la región o brecha de energías prohibidas de propagación puede extenderse a todas las direcciones posibles, resultando en una brecha prohibida completa. Por ejemplo, un semiconductor tiene una brecha o banda prohibida completa de energías entre las bandas de valencia y de conducción.

El análogo óptico de los cristales descritos por la mecánica cuántica es un *cristal fotónico (CF)*. Un cristal fotónico es un medio óptico que puede presentarse de forma natural o en estructuras artificiales que presentan una modulación periódica del índice de refracción inducida por defectos estructurales. Estos medios ópticos son capaces de procesar y modificar las propiedades de un haz de luz con el que interactúa, modificando la transmitancia y la reflectancia luminosa del material de forma controlada haciendo uso de los fenómenos de refracción y difracción.

En la física de los cristales fotónicos, los átomos y moléculas (de la física del estado sólido) son remplazados por medios macroscópicos con diferentes constantes dieléctricas y el potencial periódico es remplazado por una función dieléctrica periódica (equiválete a un índice de refracción periódico). Si la constante dieléctrica de los materiales que define un cristal son lo suficientemente diferentes y la absorción de luz por los materiales es mínima, entonces los fotones sufren algunos de los fenómenos que sufren los electrones en un potencial eléctrico atómico.

Por lo tanto, una de las soluciones al problema del control de las propiedades ópticas de un material es un cristal fotónico. Particularmente, se puede diseñar y construir cristales fotónicos con “brechas de bandas fotónicas”, prohibiendo la propagación de luz en determinadas direcciones para frecuencias de oscilación específicas.

1.3 Estado del arte

Los láseres son un instrumento fundamental para las tecnologías que día con día se hacen más indispensables para la sociedad, siendo estos utilizados en campos como la medicina, telecomunicaciones, física de altas energías y radioastronomía, entre muchas otras áreas. Es por esto que en la actualidad se implementan cada día láseres más potentes, eficientes y estables que se pueden usar en diversas aplicaciones tecnológicas

Debido a su capacidad de confinamiento de la radiación electromagnética, los cristales fotónicos tienen la capacidad de ser utilizados como cavidades resonantes de láseres de alta potencia [1].

Otro de los desarrollos con gran impacto en la actualidad es el almacenamiento de datos. Recientemente se han publicado artículos de investigación sobre la superposición de guías de onda para el almacenamiento e interconexión de datos con pulsos de duración de unos cuantos picosegundos [2].

Investigaciones emergentes en auge sobre cristales fotónicos son aún implementadas para mejorar la eficiencia de celdas solares fotovoltaicas, discretizando frecuencias de la radiación electromagnética incidente en su superficie [3, 4].

CAPITULO II

CARACTERISTICAS DE LOS CRISTALES FOTONICOS

La capacidad de los cristales fotónicos (CF) para controlar la propagación de la radiación electromagnética depende de la geometría que posee la modulación periódica, parámetros estructurales y el índice de refracción de cada elemento que los compone. La modulación periódica de las propiedades intrínsecas del CF puede ocurrir en diferentes direcciones, por lo que se define un CF en distintas dimensiones. Cuando la modulación periódica ocurre en una sola dirección (supongamos la dirección z), es llamado cristal fotónico unidimensional. Si la modulación ocurre en dos direcciones del plano cartesiano (x, z) y es homogéneo en una tercera, es bidimensional. Finalmente, si la modulación periódica ocurre en las tres direcciones espaciales (x, y, z) es un CF tridimensional.

2.1 CF unidimensional

Los CF unidimensionales generalmente se describen como apilamientos de capas de distintos materiales alternados. Este tipo de estructura tiene una ventaja sobre los casos bidimensionales y tridimensionales: facilidad de construcción. Para lograr una óptima manipulación de la radiación electromagnética, es necesario que los elementos estructurales del CF tengan un tamaño del orden de la longitud de onda de la luz incidente. Es por esto que las capas en los CF unidimensionales son,

usualmente, películas delgadas, ya que en la actualidad se utilizan estas estructuras para trabajar en rangos del visible (Vis), infrarrojo cercano (NIR) e inclusive en el infrarrojo medio del espectro electromagnético, es decir, entre longitudes de onda de 390 a 1600 nm.

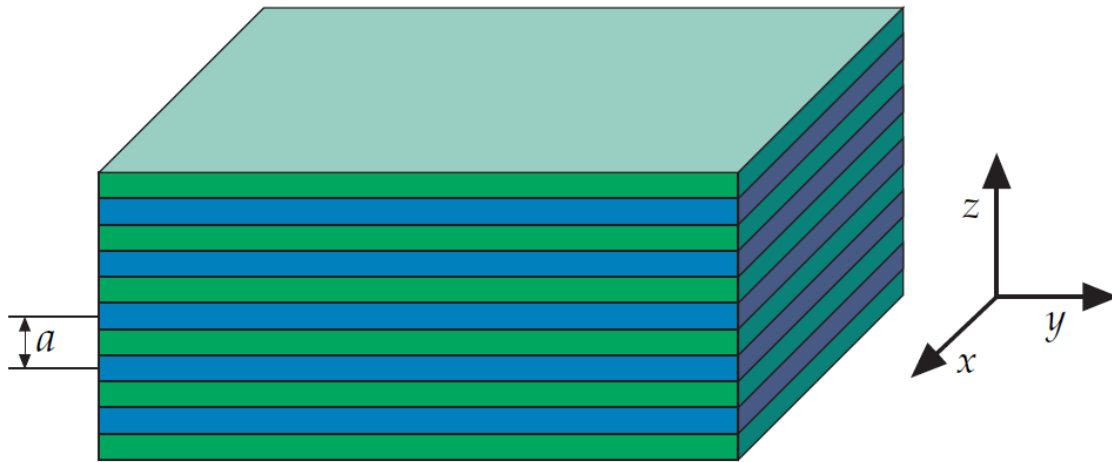


Figura 2: Cristal fónico unidimensional. El término “unidimensional” es usado porque la función dieléctrica $\varepsilon(z)$ o el índice de refracción n varían sólo a lo largo de una dirección. El sistema consiste en capas alternadas de materiales con diferentes constantes dieléctricas y un espaciamiento o parámetro de red “a”.

Estas estructuras fotónicas no son una idea nueva, Lord Rayleigh a finales del siglo XIX publicó uno de los primeros análisis de las propiedades ópticas de películas multicapa o CF unidimensionales [5]. Este tipo de estructuras pueden actuar como espejos (espejos de Bragg) para luz con frecuencia dentro de un rango específico y pueden localizar modos de luz si existen defectos en la estructura [6].

2.2 CF bidimensionales

Como se mencionó al inicio de este capítulo, un CF bidimensional es periódico a lo largo de sus dos ejes y es homogéneo a lo largo del tercer eje. Un ejemplo típico de esta estructura consiste en una red cuadrada de columnas dieléctricas embebidas en aire como se muestra en la figura 3. Es importante resaltar que las columnas son

consideradas como infinitamente altas y se hace una distinción cuando tienen una altura finita, la cual será tratada más adelante.

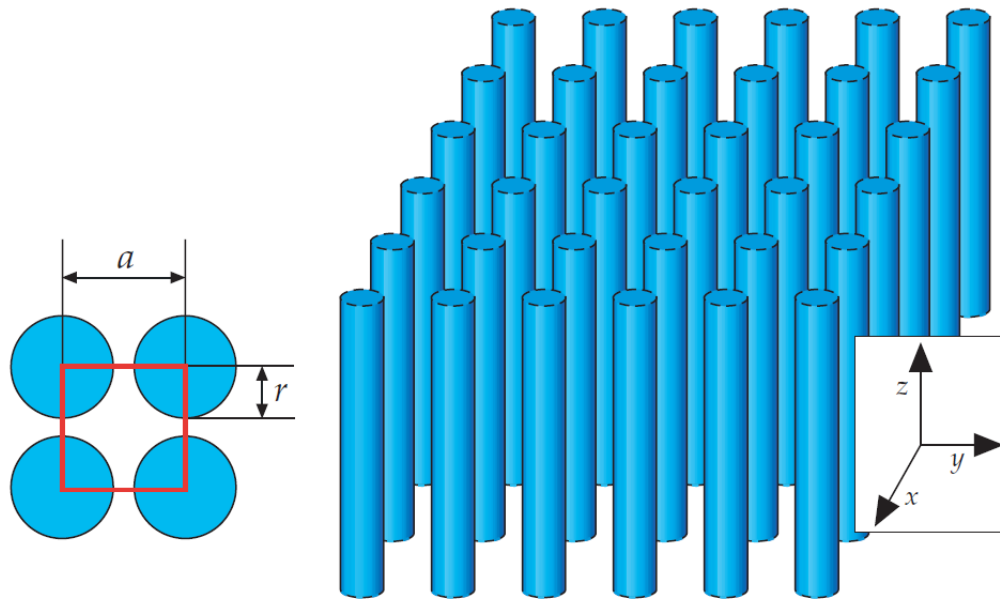


Figura 3: Cristal fotónico bidimensional. Este material es una red cuadrada de columnas dieléctricas embebidas en aire, o en un medio con diferente permitividad eléctrica, con un radio r y una constante dieléctrica ϵ . El material es homogéneo en la dirección z y periódico en las direcciones x y y con una constante de red a . El cuadro en rojo describe una celda unitaria.

Los CF bidimensionales aportan una gran variación de estructuras o geometrías, representadas por redes. A pesar de su gran variedad, generalmente se suelen utilizar redes cuadradas o hexagonales por simplicidad. Estos CF son un tema de gran estudio en la actualidad ya que su construcción es relativamente sencilla y las geometrías estructurales explotan muy bien las capacidades de un cristal fotónico, aportando muchas más posibilidades que los CF unidimensionales [7-8].

Las redes que describen los materiales fónicos bidimensionales son representadas por barras u orificios, los cuales pueden tener distintas geometrías. La distribución de esta red está ubicada en un plano y está embebida en otro material dieléctrico.

2.3 CF tridimensionales

Un CF tridimensional es una estructura dieléctrica descrita por defectos estructurales con periodicidad en tres direcciones independientes. Estos CF aportan la mayor posibilidad de arreglos que se pueden formar dando la posibilidad de obtener una infinidad de geometrías.



Figura 4: Ejemplos de CF tridimensionales.

Los primeros estudios de estas estructuras comenzaron con importantes aportaciones de Yablonovitch en 1987 [7-8], quien predijo que una estructura periódica dieléctrica tridimensional tendría la capacidad de inhibir la propagación de la luz en todas las direcciones. Este estudio llevó a la formulación del concepto de bandas fotónicas. La existencia de las bandas fotónicas fue demostrada haciendo uso de CF tridimensionales y posteriormente se demostró su existencia en CF unidimensionales y bidimensionales.

Al igual que en la física del estado sólido, en la física de los cristales fotónicos es posible construir un diagrama de bandas (en este caso, fotónicas) el cual proporciona la información más general del CF [11-12]. Históricamente la importancia de los CF tridimensionales radica en el descubrimiento de la estructura de bandas fotónicas y a lo largo de los estudios en CF, las estructuras

tridimensionales son las que presentan una mayor dificultad de construcción y caracterización.

2.4 CF de placas

En la sección 2.2 se describieron los CF bidimensionales y se especificó que las barras o columnas del material dieléctrico embebidas en otro medio material con diferente índice de refracción, tienen altura infinita. En el caso de una altura finita para las columnas dieléctricas se le conoce como CF de placas. Estas estructuras no son CF bidimensionales, a pesar de su similitud, el espesor finito en la dirección vertical (z) introduce nuevos comportamientos que permiten el confinamiento de la luz [13]. Al igual que los cristales tridimensionales, defectos en los cristales fotónicos de placas pueden ser usados para formar guías de onda o cavidades resonantes. Una guía de onda permite la propagación de la luz en una región y dirección determinada mientras que una cavidad permite establecer modos de oscilación resonantes. Un ejemplo de los CF de placas se muestra en la figura 5.

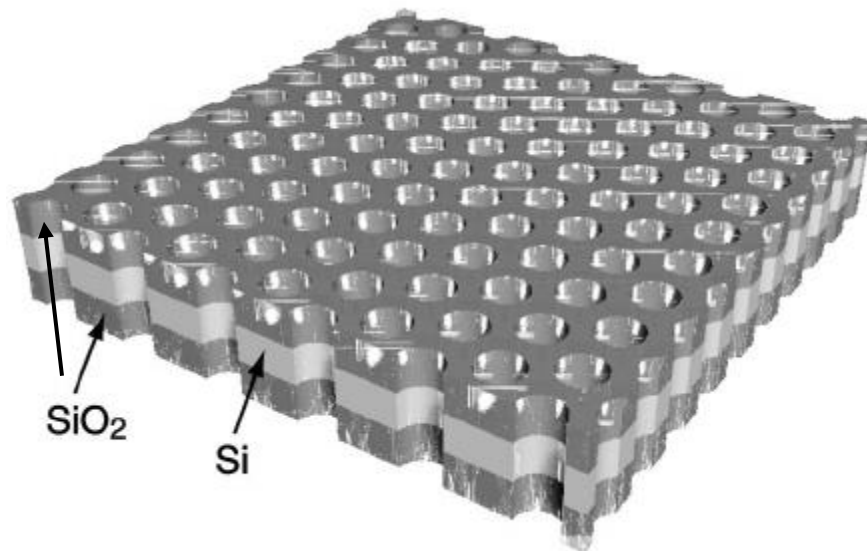


Figura 5. Cristal fotónico de placas

La principal idea para el funcionamiento de una estructura fotónica en forma de placa es la reflexión total interna la cual se da cuando la luz incide desde un medio con mayor índice de refracción a uno con menor índice de refracción a un ángulo de incidencia igual o mayor al ángulo crítico. El ángulo crítico es el ángulo mínimo

de incidencia respecto de la dirección normal a la interface entre los dos medios para el que se presenta la reflexión total interna. Es por esta razón que el CF con columnas dieléctricas que describe una red periódica se construye de tal forma que la red periódica se localiza entre dos medios con menor índice de refracción.

Para discutir la estructura de bandas fotónicas y las características de los cristales fotónicos es necesario analizar los conceptos de difracción y refracción ya que estos fenómenos son los que rigen el comportamiento de los CF.

2.5 Difracción

Uno de los fenómenos más interesantes que surgen en la física, es el de la difracción. El surgimiento de este fenómeno es muy común y de gran importancia debido al comportamiento de onda y partícula de toda la materia y campos a nivel cuántico, establecido por el físico francés Louis-Victor de Broglie, conocido como la dualidad onda-partícula [15].

Los efectos de la difracción surgen en todas las áreas de la física que admitan un comportamiento ondulatorio de la materia, por lo tanto, estos efectos juegan un papel crucial en la física de los cristales fotónicos.

La difracción es el cambio en la dirección de propagación de una onda al interacciona con un obstáculo. Un obstáculo puede ser representado como cualquier ente que presente una densidad óptica diferente a la del medio en el que viaja previamente la onda. La manifestación de este fenómeno es más evidente cuando el obstáculo tiene una distribución espacial, ya sea de materia y/o alguna otra propiedad física, del orden de la longitud de onda que presenta la onda incidente [16, 17].

Cuando una onda es difractada por múltiples obstáculos es posible observar un patrón de interferencia formado por la interferencia constructiva y destructiva de las ondas difractadas. La interferencia manifiesta directamente de la difracción. En la

figura 2 se observa un haz de luz difractado por rejillas y su consecuente patrón de interferencia.

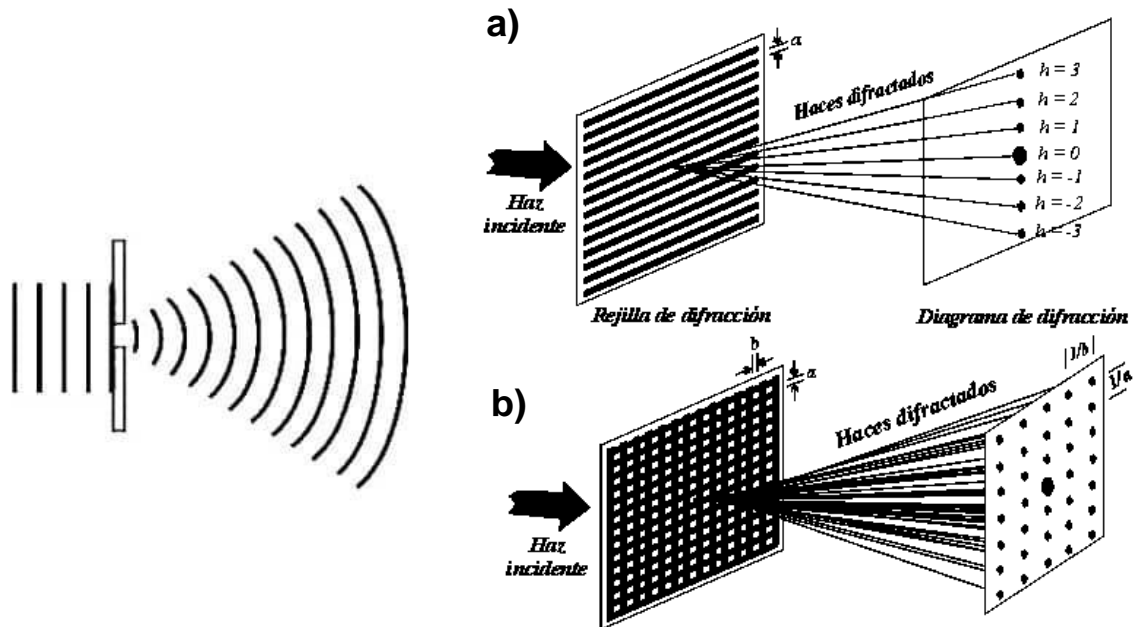


Figura 6. Difracción y patrón de interferencia debido a efectos de difracción en rejillas de difracción constituidas por una distribución espacial de a) franjas y b) orificios.

2.6 Refracción e índice de refracción

La refracción es la manifestación macroscópica de la difracción de una onda luminosa en un medio material. Es definida como el cambio de dirección que experimenta una onda al pasar de un medio material a otro. Sólo se produce si la onda incide oblicuamente sobre la superficie de separación de los dos medios y si éstos tienen índices de refracción distintos. La refracción se origina en el cambio de velocidad que experimenta la onda.

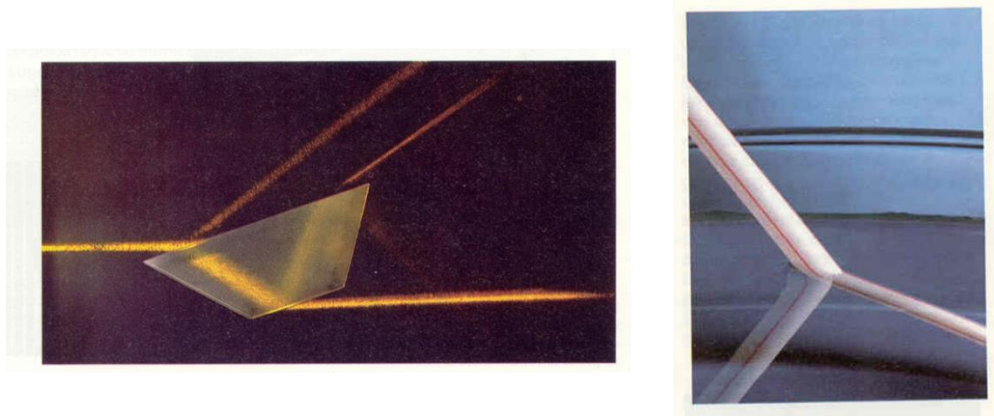


Figura 7. Cambio de la dirección de propagación de la luz en distintos medios debido a una refracción.

El índice de refracción es la relación entre la rapidez de la onda en un medio de referencia (el vacío para las ondas electromagnéticas) y su rapidez en un medio material [17].

$$n = c/v \quad (2.1)$$

Donde $c \cong 300,000 \text{ km/s}$ corresponde a la rapidez de la luz en el vacío y v a la rapidez de la luz en el medio material. Como $c \geq v$, tenemos que $n \geq 1$.

Debido a que las propiedades ópticas tienen una relación directa con las propiedades eléctricas, existe una relación entre la función dieléctrica de un material y su índice de refracción. Esta relación está dada por la siguiente ecuación:

$$n^2 = \epsilon \quad (2.2)$$

Donde n es el índice de refracción y ϵ es la función dieléctrica. Estas variables son, en su forma más general, tensores de segundo rango.

Con estos conceptos podemos proseguir con el desarrollo de una ecuación de onda que nos permita establecer la distribución del campo electromagnético en un CF y también construir el diagrama de bandas fotónicas.

CAPITULO III

ECUACIONES DEL FENOMENO

Las ecuaciones maestras que describen los fenómenos electromagnéticos son las ecuaciones de Maxwell, las cuales se pueden reducir de forma natural a una ecuación de onda que describe la propagación de las ondas de luz. A partir de la ecuación de onda es posible deducir una ecuación que permite resolver el problema de la propagación de ondas electromagnéticas en los cristales fotónicos: la ecuación de Helmholtz. Una vez derivada esta ecuación el problema se reduce a un problema de eigen-valores que es muy común en la Física. Este problema se enfoca en la resolución de la ecuación de Helmholtz para un tensor dieléctrico periódico en un cristal fotónico.

3.1 Ecuaciones de Maxwell

Las ecuaciones de Maxwell en forma diferencial son [18]:

$$\nabla \cdot \vec{D} = \rho \quad (3.1)$$

$$\nabla \cdot \vec{B} = 0 \quad (3.2)$$

$$\nabla \times \vec{H} = \vec{J} + \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} \quad (3.3)$$

$$\nabla \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \quad (3.4)$$

Donde $\vec{D} = \epsilon_0 \vec{E} + \vec{P}$, y $\vec{B} = \mu_0 \vec{H} + \vec{M}$. Estos son, respectivamente, el vector de desplazamiento y la densidad de flujo magnético o en ocasiones llamado inducción magnética, \vec{P} es la polarización eléctrica y \vec{M} la magnetización.

A partir de estas ecuaciones es posible formular la ecuación de la onda para describir la propagación de las ondas electromagnéticas dentro de un medio. Este trabajo de tesis se enfoca en medios materiales dieléctricos no magnetizables.

3.2 Ecuación de la onda para medios materiales

Un medio dieléctrico es un aislante eléctrico que puede ser polarizado al aplicarle un campo eléctrico [19]. El campo eléctrico aplicado ocasiona un pequeño desplazamiento de las cargas eléctricas separándolas en el medio y causando la polarización dieléctrica. Debido a la polarización, las cargas positivas son desplazadas hacia la dirección del campo aplicado y las cargas negativas hacia la dirección contraria. Esto crea un campo eléctrico interno que reduce el campo total dentro del medio dieléctrico.

La naturaleza de un medio dieléctrico se exhibe en la relación que existe entre la polarización eléctrica \vec{P} y el campo eléctrico \vec{E} por medio de la siguiente relación:

$$\vec{P} = \epsilon_0 \chi \vec{E} \quad (3.5)$$

Donde χ es la susceptibilidad eléctrica del material que está dada por:

$$\chi = \epsilon - 1 \quad (3.6)$$

Aquí, ϵ es el tensor dieléctrico o función dieléctrica (para medios homogéneos) y es dependiente de la frecuencia, además tiene la forma $\epsilon = \epsilon(\omega) = \frac{\epsilon_a(\omega)}{\epsilon_0}$ donde ϵ_a es la permitividad absoluta del material. Esta función toma una gran importancia en la descripción de la física de los CF debido a que es la función periódica que describe los parámetros estructurales del CF.

En este caso consideramos que el medio dieléctrico no magnético es lineal e isotrópico, permitiendo describir el vector de desplazamiento \vec{D} como [20]:

$$\vec{D} = \epsilon \epsilon_0 \vec{E} \quad (3.7)$$

Usando la identidad vectorial $\nabla \times \nabla \times \vec{E} = \nabla(\nabla \cdot \vec{E}) - \nabla^2 \vec{E}$ y las consideraciones mencionadas para medios dieléctricos, se deriva la ecuación de onda para medios dieléctricos:

$$\nabla^2 \vec{E} - \frac{\epsilon}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} = \mathbf{0} \quad (3.8)$$

De igual manera es posible derivar una ecuación de onda para el campo magnético. Una solución lo suficientemente general para la ecuación (3.8) es una función armónica en el tiempo con amplitud compleja, de la forma:

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = E(\vec{r}) e^{-i\omega t} \quad \text{con:} \quad E(\vec{r}) = E_0 e^{-i\vec{k}r}$$

Donde \vec{k} es el vector de onda, ω es la frecuencia angular de la onda y E_0 es la amplitud de la onda. Al sustituir esta solución en la ecuación de la onda para el campo eléctrico obtenemos la ecuación de Helmholtz:

$$\nabla^2 \vec{E} - \epsilon \frac{\omega^2}{c^2} E(\vec{r}) = \mathbf{0}$$

En términos del índice de refracción la ecuación del Helmholtz está dada por:

$$\nabla^2 \vec{E} - n^2 \vec{k}^2 E(\vec{r}) = \mathbf{0} \quad (3.10)$$

Esta es la ecuación que permite encontrar la distribución del campo eléctrico dentro del material dieléctrico [21]. Para los CF esta ecuación se resuelve en los distintos medios que lo componen, haciendo uso de las condiciones de frontera de cada medio y finalmente reduciendo el problema a un sistema de ecuaciones algebraicas lineales conformadas por las soluciones de la ecuación (3.10) en cada medio.

La ecuación de Helmholtz es una ecuación similar a la ecuación de Schrödinger (como se señaló en el capítulo I), es decir, es una ecuación de eigen-valores. Es por esta razón que es posible construir un diagrama o una estructura de bandas para

las frecuencias de oscilación permitidas dependientes del vector de onda. Esto debido a que la función dieléctrica presenta una modulación periódica dependiente de los parámetros estructurales del CF.

3.3 Bandas fotónicas

La distribución de campo electromagnético en un CF permite obtener características ópticas básicas como el espectro de reflectancia y de transmitancia, sin embargo, es posible obtener una idea más general de las características de los CF al igual que hacer más eficiente el diseño de estas estructuras analizando la estructura de bandas fotónicas [12]. La estructura de bandas fotónicas provee información completa acerca del comportamiento de la radiación electromagnética cuando esta se propaga con una frecuencia ondulatoria y una dirección específica dentro del CF. Haciendo uso de la estructura de bandas fotónicas, los parámetros de un cristal fotónico pueden ser determinados y optimizados para alguna aplicación en particular.

Para encontrar la estructura de bandas fotónicas de un CF es necesario encontrar la relación de dispersión, esto es, la dependencia de las eigen-frecuencias o frecuencia de resonancia del CF con el vector de onda de la radiación que se propagan a través de este. Para obtener la relación de dispersión, es necesario resolver el eigen-problema o la ecuación de eigen-valores formulada por la ecuación de Helmholtz dentro de la estructura periódica.

El eigen-problema para la ecuación de Helmholtz para el campo eléctrico dentro del medio dieléctrico lineal no-dispersivo tiene la forma:

$$\frac{1}{\epsilon(\vec{r})} \nabla \times \nabla \times \mathbf{E}(\vec{r}) = \frac{\omega^2}{c^2} \mathbf{E}(\vec{r}) \quad (3.11)$$

Y para el campo magnético adicionalmente se tiene:

$$\nabla \times \frac{1}{\epsilon(\vec{r})} \nabla \times \mathbf{H}(\vec{r}) = \frac{\omega^2}{c^2} \mathbf{H}(\vec{r}) \quad (3.12)$$

Estas ecuaciones tienen la forma de una ecuación de eigen-valores de la forma:

$$\hat{\Theta}H(\vec{r}) = \frac{\omega^2}{c^2}H(\vec{r}), \quad \hat{\Theta} = \nabla \times \frac{1}{\epsilon(\vec{r})}\nabla \times \quad (3.13)$$

Donde $\hat{\Theta}$ es un operador Hermitiano con eigen-valores $\frac{\omega^2}{c^2}$. Usualmente es más sencillo trabajar con la ecuación que describe el campo magnético debido a su estructura matemática, determinando el campo magnético, se puede determinar el campo eléctrico con las ecuaciones de Maxwell. Estas ecuaciones involucran las propiedades estructurales del CF por medio de la función dieléctrica $\epsilon(\vec{r})$. La función dieléctrica en un CF toma una forma $\epsilon(\vec{r}) = \epsilon(\vec{r} + \vec{R})$ donde \vec{R} representa el periodo de la función y está representado como $\vec{R} = l\vec{a}_1 + m\vec{a}_2 + n\vec{a}_3$, aquí l, m, n son números enteros y $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ son los **vectores de la red** que conforman el CF [11, 12]. Cada vector de la red tiene su representación espacial como $\vec{a} = a\hat{x} + a\hat{y} + a\hat{z}$, donde a es el **parámetro de red** representado por la figura 3.1.

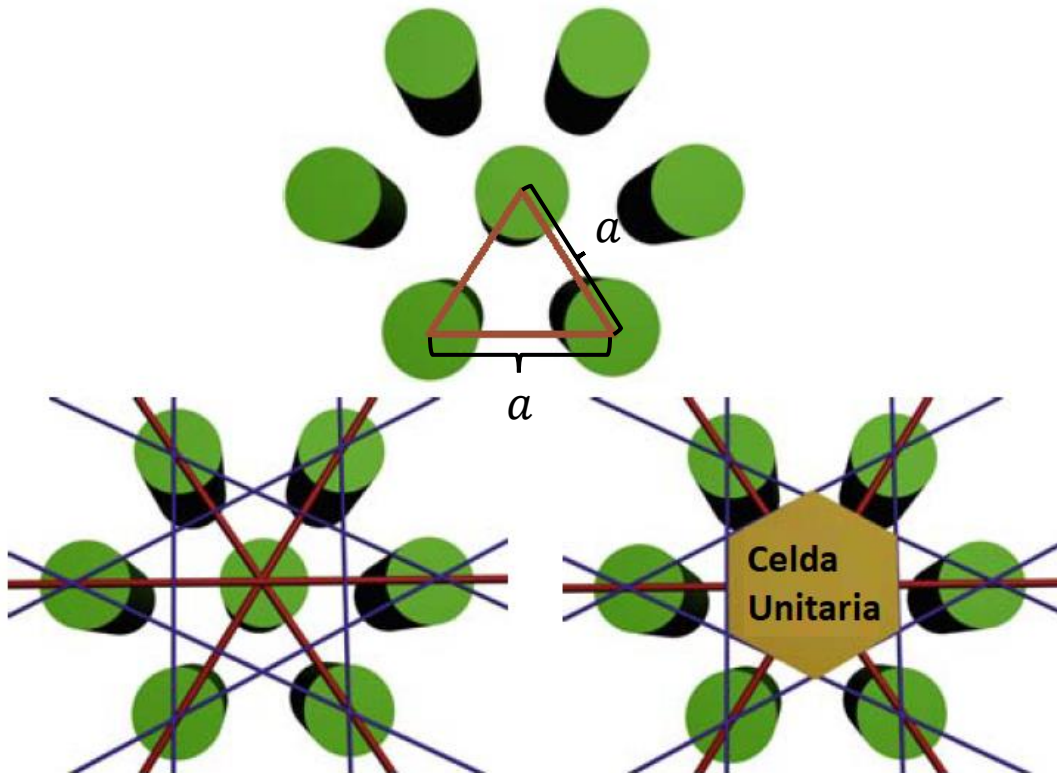


Figura 3.1: Representación del parámetro de red a y construcción de la celda unitaria.

El parámetro de red representa el paso básico de longitud que define a la **celda unitaria** del CF. Al igual que en la física del estado sólido, la celda unitaria en la física de los CF refleja la simetría y estructura del CF que es construida por la traslación repetitiva de la celda unitaria a lo largo de sus ejes principales.

3.3.1 Red recíproca

Cuando se analizan funciones periódicas es natural tomar la transformada de Fourier, es decir, construir la función periódica $\varepsilon(\mathbf{r})$ por medio de ondas planas con varios vectores de onda. La expansión de $\varepsilon(\mathbf{r})$ está dada por [12, 19]:

$$\varepsilon(\vec{r}) = \int \mathbf{g}(\vec{k}) \cdot e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} d\mathbf{k}, \quad (3.14)$$

Donde $\mathbf{g}(\vec{k})$ es la función dieléctrica dependiente de los vectores de onda \vec{k} . Como la función dieléctrica es periódica y toma la forma $\varepsilon(\vec{r}) = \varepsilon(\vec{r} + \vec{R})$, la expansión viene dada como:

$$\varepsilon(\vec{r} + \vec{R}) = \int \mathbf{g}(\vec{k}) \cdot e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \cdot e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} d\mathbf{k} = \varepsilon(\vec{r}) = \int \mathbf{g}(\vec{k}) \cdot e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} d\mathbf{k} \quad (3.15)$$

Esta igualdad sólo se cumple cuando $\mathbf{g}(\vec{k}) = \mathbf{0}$, o:

$$e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} = 1 \quad (3.16)$$

En otras palabras la transformada $\mathbf{g}(\vec{k})$ es cero en todo lugar, excepto para los valores de \mathbf{k} que hacen que se cumpla la condición $e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} = 1$ para todo \vec{R} . Es por esta razón que sólo se necesitan los vectores que cumplen con la condición (3.16) para construir una función periódica para $\varepsilon(\mathbf{r})$ con ondas planas. Los vectores \vec{k} que cumplen la condición (3.16) para ondas planas, $\vec{k} \cdot \vec{R} = 2\pi N$ son llamados **vectores de la red recíproca**, usualmente designados con la letra \mathbf{G} . Estos vectores

forman una red por sí mismo. Ahora es posible construir una función periódica para $\epsilon(\vec{r})$ en términos de los vectores de una red recíproca como sigue:

$$\epsilon(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} g(\vec{G}) \cdot e^{i\vec{G}\cdot\vec{r}} \quad (3.17)$$

Dependiendo de la geometría de la red descrita por los vectores \vec{G} se pueden describir los vectores de la red real \vec{R} en términos de \vec{G} .

Posteriormente si tenemos la información acerca de los vectores de la red permitidos del CF, podemos obtener los vectores de la red recíproca permitidos. La red recíproca, al igual que la red real, posee la periodicidad de los elementos que describen el CF. Esto significa que, si se toma una de las celdas unitarias y se traslada sobre todos los posibles vectores de la red recíproca, se cubrirá todo el espacio del vector de onda. Tal celda unitaria de la red recíproca es seleccionada de manera similar a la selección de la celda unitaria en la red real y está definida como la parte del espacio recíproca que está más cerca del punto base seleccionado. Esta celda unitaria en la red recíproca es definida como la primera zona de Brillouin o simplemente zona de Brillouin y está representada por los puntos de alta simetría de la celda unitaria. Ejemplos de zonas de Brillouin con sus respectivos puntos de alta simetría se muestran en la figura 3.2

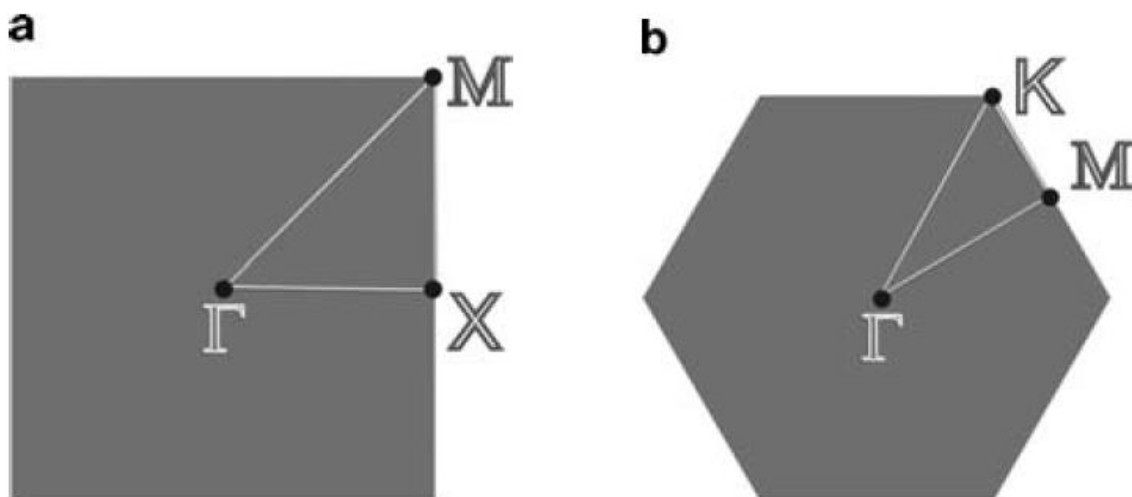


Figura 3.2: Zonas de Brillouin para a) una red cuadrada y b) una red hexagonal con sus respectivos puntos de alta simetría.

Al igual que en el caso de la mecánica cuántica, cuando se resuelve la ecuación de Schrödinger para un potencial periódico, la ecuación (3.13) tiene soluciones con la forma de una función de Bloch. Representada por la siguiente ecuación:

$$\vec{H}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}} \mathbf{u}_{kn}(\vec{r}) \quad (3.18)$$

Donde $\mathbf{u}(\vec{r})$ es una función periódica en la red: $\mathbf{u}_{kn}(\vec{r}) = \mathbf{u}_{kn}(\vec{r} + \vec{R})$ para todos los vectores de la red. Los sub-índices indican que la función periódica es diferente para cada vector de onda \vec{k} y número de eigen-estado n .

Debido a estas condiciones periódicas que presentan los CF, se puede restringir el problema de eigen-valores a una sola celda unitaria del CF, con esta estrategia, se puede encontrar un número finito de espectros discretos o eigen-valores. Así se puede encontrar, para cada valor de \vec{k} , un número infinito de modos con frecuencias separadas discretamente, las cuales pueden ser etiquetadas como una banda con el índice n .

Como \vec{k} es operado por $\hat{\theta}$ como un parámetro continuo, se espera que la frecuencia de cada banda, varíe continuamente a medida que \vec{k} varíe. De esta forma se puede llegar a la descripción de los modos en un CF: Estos son una familia de funciones continuas, $\omega_n(\vec{k})$, indexadas, en orden creciente con la frecuencia, por el número de bandas. La información contenida en estas funciones es llamada estructura de bandas fotónicas.

Existen distintas y poderosas técnicas de cómputo para calcular la estructura de bandas fotónicas, sin embargo, este trabajo de tesis discute el método de Diferencias Finitas Dependiente del Tiempo (FDTD) el cual será tratado en capítulos posteriores.

CAPITULO IV

DISEÑO DEL CRISTAL FOTÓNICO DE INTERES

Los principales parámetros a considerar en el diseño de una estructura fotónica periódica son: la distribución de la función dieléctrica, la geometría de los defectos estructurales, la geometría de la red definida en términos de estos defectos y los parámetros de red. Esto debido a que los efectos de difracción son más evidentes cuando los defectos estructurales inducidos en un material que sirve como sustrato, tienen un tamaño del orden de la longitud de onda de la radiación electromagnética incidente.

Para diseñar un cristal fotónico con la capacidad de modular la reflexión de las ondas electromagnéticas en una región específica del espectro electromagnético, se planteó la idea de generar modos de oscilación ópticos en regiones específicas del CF. Esto permite la máxima absorción de radiación electromagnética por los electrones en la región en donde se generan los modos de oscilación. Posteriormente los electrones emitirán la radiación electromagnética con la misma frecuencia a la que fueron irradiados.

En los CF es sencillo establecer modos de oscilación. Esto se logra con el uso de “trampas” ópticas, cavidades ópticas o regiones con defectos inducidos en la red

periódica. En particular para este trabajo de tesis es de interés la construcción de CF que permitan una incidencia de radiación en la dirección perpendicular a la región en donde se aprecia la modulación periódica del índice de refracción. Esta idea de generar modos de oscilación establecidos para una frecuencia de oscilación específica no es nueva, de hecho, en las instalaciones del Centro de Investigación en Materiales Avanzados (CIMAV) se han construido con anterioridad CF con estas características [22]. Como se cuenta con la disposición de estos CF se procedió a la caracterización óptica experimental de uno de ellos y su posterior descripción teórica por medio de simulaciones numéricas con la finalidad de obtener un modelo teórico y realizar nuevos desarrollos inherentes a este trabajo de investigación.

4.1 Caracterización de un CF previamente construido.

Para la caracterización óptica de un CF previamente construido en el CIMAV se utilizó una amplia variedad de láseres con emisión en la región del Vis-NIR. Esto permitió observar la dependencia de reflectancia óptica como función de la frecuencia y así encontrar la frecuencia de respuesta del CF. Los láseres utilizados tienen una emisión con las siguientes longitudes de onda: 633 nm, 750 nm, 782 nm, 852 nm, 1308 nm, 1393 nm, 1547 nm, 1592 nm. El CF estudiado inicialmente, se espera que su respuesta se encuentre entre los 750 nm y 852 nm, debido a la magnitud de los defectos estructurales (orificios de aire) y el parámetro de red que lo describe.

El CF previamente construido se muestra en la figura 4.1. Este CF fue construido sobre un sustrato de Si con la deposición de una película delgada de ZnO con un espesor aproximado de 250 nm. En la interfaz del Si y el ZnO se forma una capa nativa homogénea de SiO₂ con un espesor aproximado de 5 a 10 nm. Esta estructura fotónica describe una red primaria cuadrada de orificios o columnas de aire con un diámetro $d = 0.5 \mu m$ y una profundidad de $1 \mu m$ separadas con un parámetro de red $a = 1.01 \mu m$, maquinados en una región de $80 \times 80 \mu m$. Embebida en la red de orificios se describe otra red secundaria cuadrada de micro-cavidades cuasi-circulares de diámetro $D = 10 \mu m$ y con un parámetro de red $A = 30 \mu m$. Para una rápida identificación se etiquetó a este CF como 9Cav-Sqr-Si.

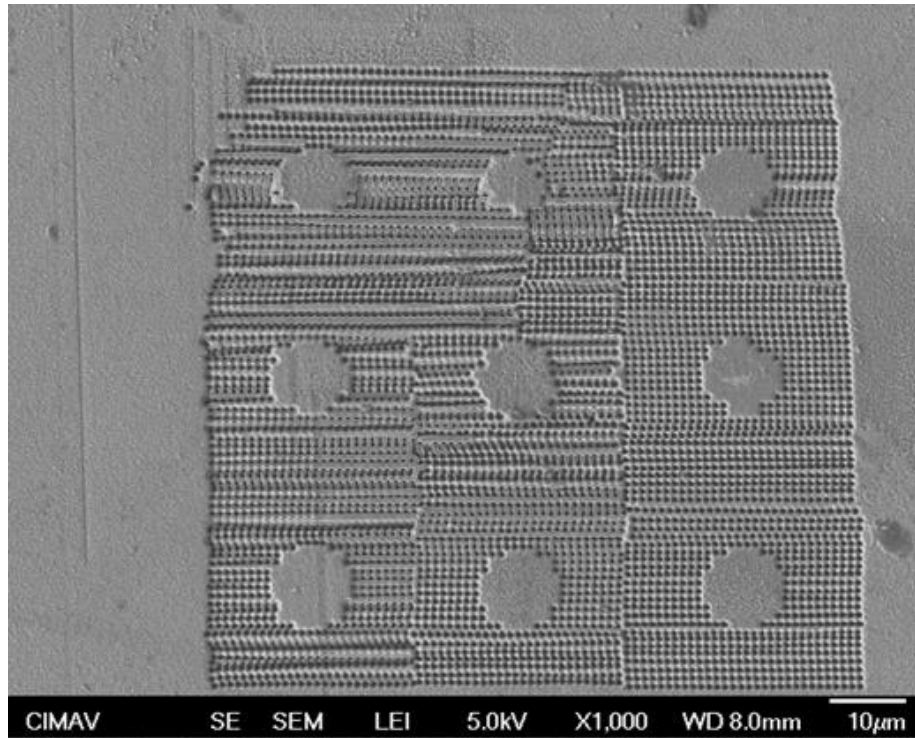


Figura 4.1: Micrografía obtenida con SEM del CF previamente construido en las instalaciones de CIMAV con red cuadrada, parámetro de red $a = 1.01 \mu\text{m}$, diámetro de orificios maquinados $d = 0.5 \mu\text{m}$ y diámetro de micro-cavidades $D = 10 \mu\text{m}$.

La estructura fotónica mostrada en la figura 4.1 fue construida con el equipo JEOL JEM-9320-FIB del Laboratorio Nacional de Nanotecnología del Centro de Investigación en Materiales Avanzados (CIMAV).

La caracterización óptica del CF previamente construido se realizó en el laboratorio de propiedades ópticas del CIMAV haciendo uso de una configuración óptica constituida por una fuente láser, una sección de filtrado y colimación, y una sección de detección. En la figura 4.2 se muestra una representación esquemática de la configuración óptica de caracterización del CF.

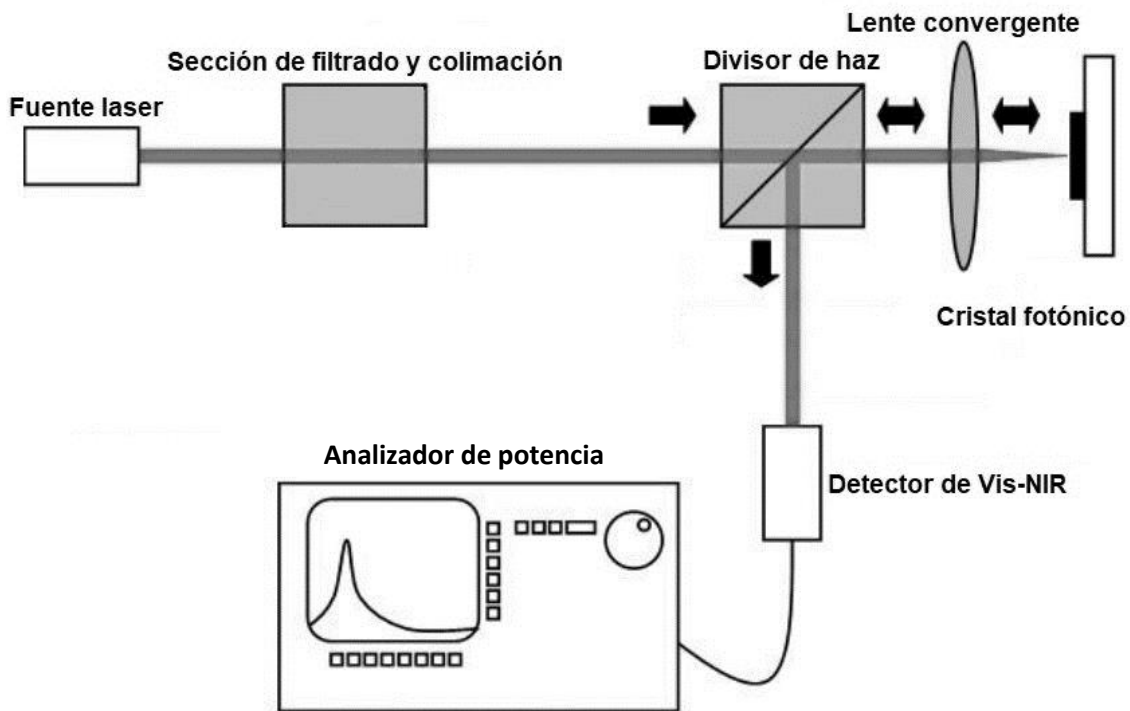


Figura 4.2: Dispositivo experimental para la caracterización de reflectancia óptica en cristales fotónicos utilizado en este trabajo de investigación.

Con el propósito de observar los efectos de las micro-cavidades en el CF se caracterizó inicialmente otro cristal fotónico, como muestra de control (figura 4.3), que tiene las mismas características estructurales de la red primaria, pero sin el arreglo de las micro-cavidades. De esta forma fue posible evidenciar el efecto de las micro-cavidades descritas por la red secundaria.

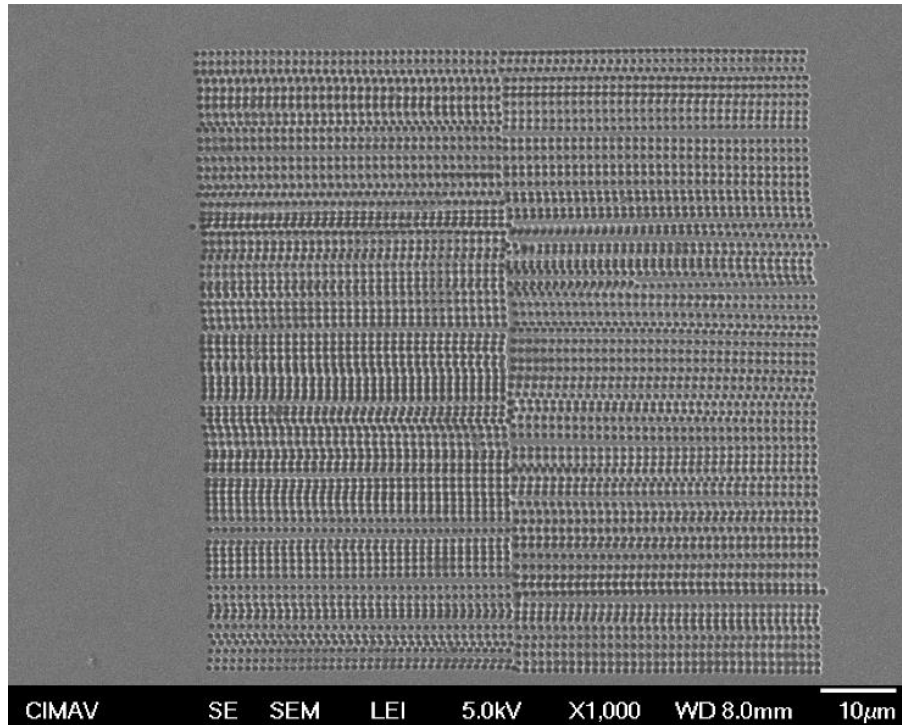


Figura 4.3: Micrografía obtenida por SEM del CF de control previamente construido con red cuadrada, parámetro de red $a = 1.01 \mu\text{m}$ y diámetro de orificios maquinados $d \cong 0.5 \mu\text{m}$.

De igual manera se realizó una caracterización sobre la superficie de Si-ZnO con el propósito de observar los efectos de las estructuras fotónicas respecto a una superficie plana.

4.1.1 Resultados de la caracterización del CF previamente construido

Una vez finalizada la caracterización de los CF previamente construido en las instalaciones del CIMA V, se obtuvo la reflectancia óptica como función de la longitud de onda como se muestra en la figura 4.4. De estos resultados podemos apreciar como el CF con micro-cavidades incremento de forma significativa la reflectancia óptica, específicamente a una longitud de onda de aproximadamente 750 nm, que es un efecto nuevo que no se presenta en el CF de control o en la película de ZnO.

Esto confirma la hipótesis inicial acerca de la generación de modos de oscilación establecidos en el CF gracias al arreglo de las micro-cavidades presentes en el CF.

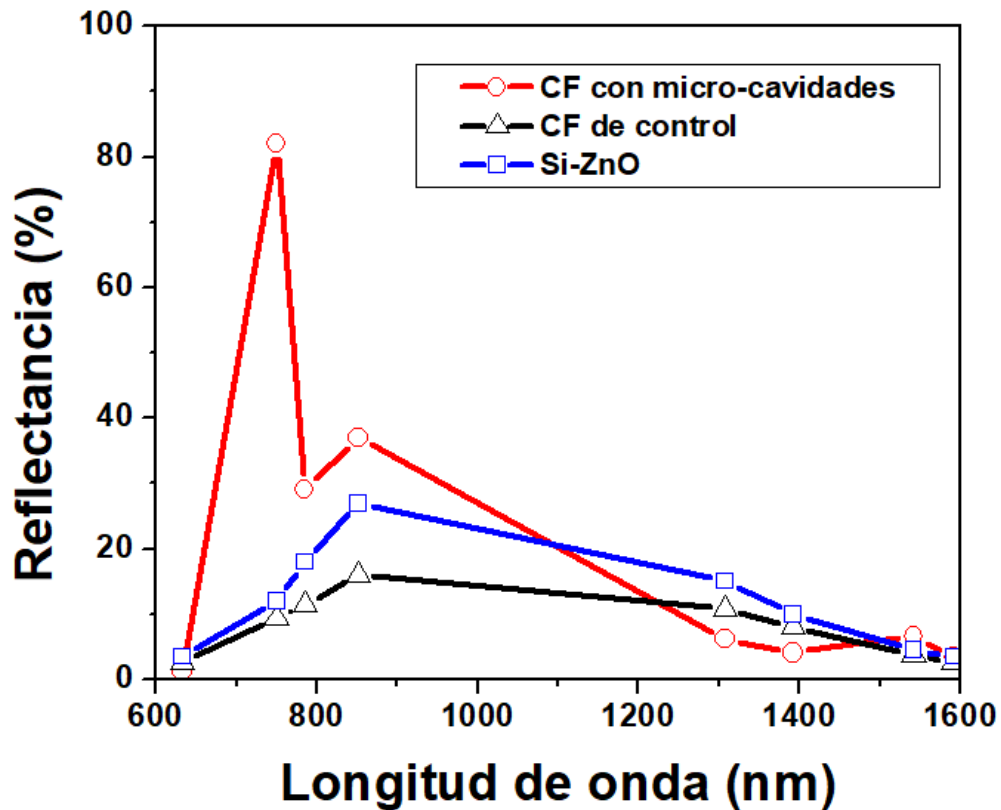


Figura 4.4: Dependencia de la reflectancia óptica como función de la longitud de onda para el CF con micro-cavidades, CF de control y superficie de Si-ZnO.

La caracterización óptica fue realizada con luz láser polarizada en modo TE. Sin embargo, también se realizó la caracterización de los CF con haces polarizados en el modo TM y se reveló que, para esta condición, no existe cambio alguno en los niveles de reflectancia. Esto se atribuyó a la simetría del cristal fotónico, es decir, los haces polarizados en los modos TE y TM “ven” exactamente la misma geometría.

Para demostrar las capacidades de detección con los láseres disponibles, se realizó una caracterización espacial del CF. Esta caracterización se efectuó mediante un

barrido espacial sobre la superficie del CF, haciendo uso de los láseres enfocados hasta un diámetro de cintura de aproximadamente $15 \mu m$. Este diámetro fue confirmado por el equipo "Beam Master Knife", disponible en el laboratorio de propiedades ópticas del CIMAV, que permite visualizar el diámetro del haz luminoso incidente y la distribución de intensidad del mismo. Posterior a la caracterización óptica se obtuvo la dependencia de la reflectancia en función de la coordenada espacial y se observó que el haz luminoso tiene la capacidad de distinguir entre la superficie de orificios maquinados y las micro-cavidades. Una de estas mediciones de reflectancia óptica que confirma estos resultados se aprecia en la figura 4.5 empleando un láser con longitud de onda de 750 nm .

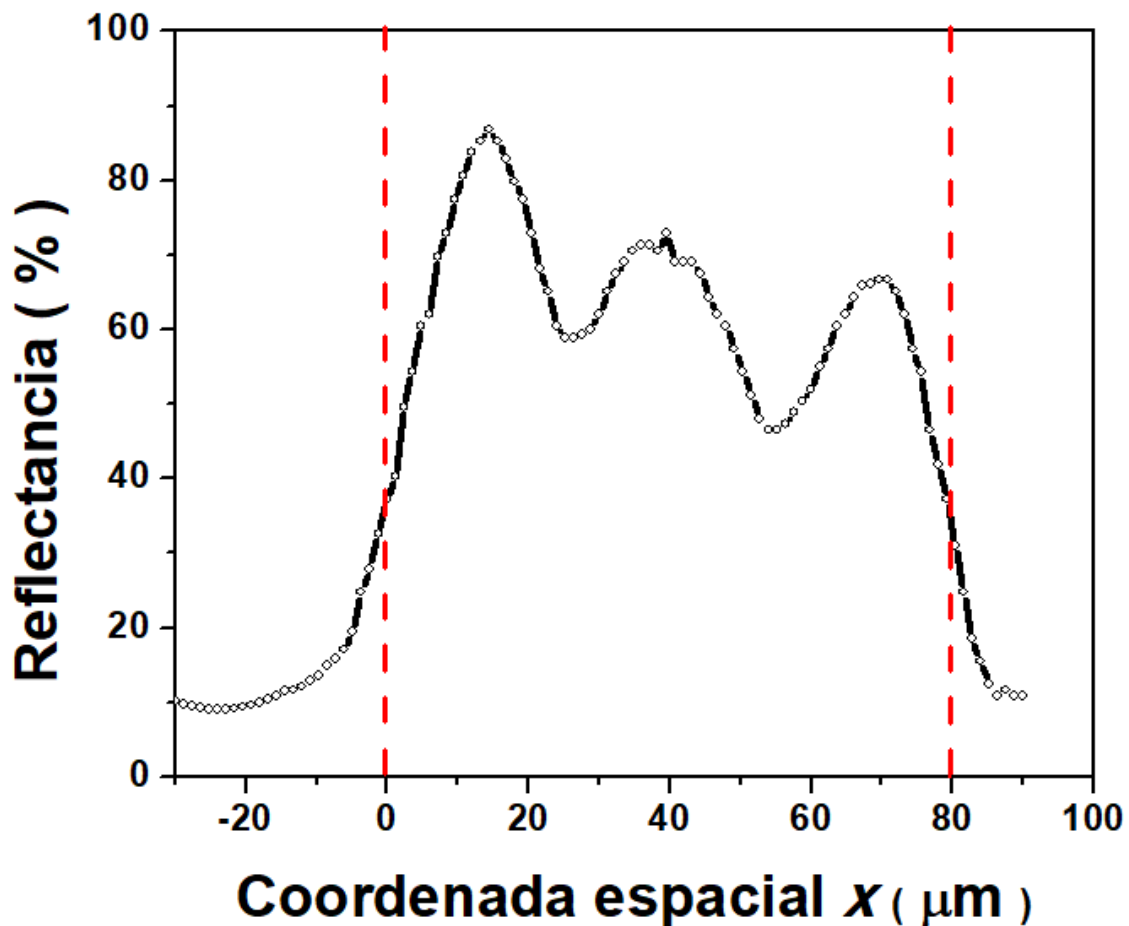


Figura 4.5: Reflectancia a ángulo normal del cristal fotónico de 9 micro-cavidades, a lo largo de la coordenada espacial x .

Gracias a este estudio se confirmó que el diseño de CF “híbridos” descritos por una red primaria de orificios o columnas de aire y una red secundaria descrita por microcavidades, específicamente un orden de magnitud mayor que los orificios en cuanto a diámetro, tienen la capacidad de generar modos de oscilación que permiten modular de manera selectiva la reflectancia óptica.

Posteriormente se procedió a realizar la búsqueda de los parámetros que permiten modular la reflectancia óptica para distintas frecuencias, para esto, fue necesario desarrollar una simulación numérica de las propiedades de un CF al efectuar variaciones tanto de dimensiones del parámetro de red como de diámetro de los orificios circulares que definen el propio CF. En el siguiente capítulo se tratan los métodos numéricos para la simulación de las propiedades ópticas de los CF propuesto y se mostraran los resultados que arrojaron estas simulaciones.

CAPITULO V

SIMULACIÓN NUMERICA DE PROPIEDADES DE CF

Existen una gran variedad de métodos numéricos para la resolución de las ecuaciones de Maxwell en medios con propiedades o inhomogeneidades periódicas, sin embargo, la compleja geometría que presentan los CF representa un gran reto. El método más utilizado, debido a su enorme flexibilidad, es el método de Diferencias Finitas Dependiente del Tiempo (FDTD).

El método FDTD es uno de los métodos más avanzados en la actualidad para el cálculo de la distribución del campo electromagnético dentro de un CF. De igual forma este es uno de los métodos más simple y universales. Este método consiste en la discretización del espacio, remplazando el espacio continuo por un conjunto de nodos discretos que definen un mallado. Posteriormente, las derivadas en las ecuaciones de Maxwell son remplazadas por diferencias finitas, lo que resulta en un sistema de ecuaciones algebraicas lineales en las coordenadas espaciales. Este sistema de ecuaciones es resuelto secuencialmente comenzando con las condiciones iniciales y las condiciones de frontera apropiadas.

El método FDTD permite encontrar la distribución del campo electromagnético resolviendo las ecuaciones de maxwell en una malla discreta. La solución está basada en las siguientes consideraciones:

- La función de distribución de permitividad eléctrica determina las condiciones de propagación de la radiación.
- Condiciones iniciales que constituyen parámetros de radiación incidente como la longitud de onda, amplitud y la fase inicial.
- Condiciones de frontera que determinan el comportamiento de la radiación en las fronteras de la región de cálculo.

Después de que estas condiciones son establecidas, la distribución del campo se calcula paso a paso desde la fuente de radiación.

5.1 Discretización de las ecuaciones de Maxwell

Antes de comenzar con el cálculo de la distribución del campo electromagnético en un CF, es necesario derivar las ecuaciones de Maxwell en términos de diferencias finitas. Para esto, se escriben las ecuaciones de un medio sin dispersión, absorción o generación de luz, y posteriormente se introducen las condiciones necesarias para representar un medio material haciendo uso de los vectores \vec{H} y \vec{D} definidos en el capítulo 3, sección 3.1. Entonces, las ecuaciones de Maxwell en términos de diferencias finitas, expandiendo los operadores del rotacional, toman la siguiente forma:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial E_z}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial z} &= -\frac{1}{c} \frac{\partial B_x}{\partial t} \\
 \frac{\partial E_x}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial x} &= -\frac{1}{c} \frac{\partial B_y}{\partial t} \\
 \frac{\partial E_y}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial y} &= -\frac{1}{c} \frac{\partial B_z}{\partial t} \\
 \frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{\partial H_y}{\partial z} &= \frac{1}{c} \frac{\partial D_x}{\partial t} \\
 \frac{\partial H_x}{\partial z} - \frac{\partial H_z}{\partial x} &= \frac{1}{c} \frac{\partial D_y}{\partial t}
 \end{aligned} \tag{5.1}$$

$$\frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} = \frac{1}{c} \frac{\partial D_z}{\partial t}$$

El principio fundamental del método FDTD es discretizar el espacio, es decir, reemplazar las derivadas parciales por diferencias:

$$\frac{\partial}{\partial x} \approx \frac{\Delta}{\Delta x}, \quad \frac{\partial}{\partial y} \approx \frac{\Delta}{\Delta y}, \quad \frac{\partial}{\partial z} \approx \frac{\Delta}{\Delta z}$$

De esta forma, las derivadas son representadas por su valor aproximado tomado en los diferentes nodos de la malla que representa el espacio.

La siguiente consideración es la discretización del tiempo. Esto se obtiene haciendo uso de un esquema de pasos en donde el campo \vec{E} en un tiempo t se calcula de un campo \vec{E} en un tiempo $t - \Delta t$ y un campo \vec{H} a un tiempo $t - \Delta t/2$. De igual manera para \vec{H} un tiempo $t + \Delta t/2$. De esta forma la distribución de los campos \vec{E} y \vec{H} marchan a través del tiempo, con un desfase de la mitad del paso temporal Δt .

Posteriormente se incluyen las condiciones necesarias para la descripción de las ecuaciones (5.1) en un medio material y así obtener una relación de recurrencia que permite calcular paso a paso tanto el campo eléctrico como el magnético. Las ecuaciones de recurrencia tienen la siguiente forma:

$$H_{x(i,j,k)}^{n+1/2} = H_{x(i,j,k)}^{n-1/2} + \frac{c\Delta t}{\mu\Delta z} \left(E_{y(i,j,k+1/2)}^n - E_{y(i,j,k-1/2)}^n \right) - \frac{c\Delta t}{\mu\Delta y} \left(E_{z(i,j+1/2,k)}^n - E_{z(i,j-1/2,k)}^n \right)$$

$$H_{y(i,j,k)}^{n+1/2} = H_{y(i,j,k)}^{n-1/2} + \frac{c\Delta t}{\mu\Delta x} \left(E_{z(i+1/2,j,k)}^n - E_{z(i-1/2,j,k)}^n \right) - \frac{c\Delta t}{\mu\Delta y} \left(E_{z(i,j+1/2,k)}^n - E_{z(i,j-1/2,k)}^n \right)$$

$$H_{z(i,j,k)}^{n+1/2} = H_{z(i,j,k)}^{n-1/2} + \frac{c\Delta t}{\mu\Delta y} \left(E_{x(i,j+1/2,k)}^n - E_{x(i,j-1/2,k)}^n \right) - \frac{c\Delta t}{\mu\Delta x} \left(E_{y(i+1/2,j,k)}^n - E_{y(i-1/2,j,k)}^n \right)$$

$$E_{x(i,j,k)}^{n+1} = E_{x(i,j,k)}^n + \frac{c\Delta t}{\epsilon\Delta y} \left(H_{z(i,j+1/2,k)}^{n+1/2} - H_{z(i,j-1/2,k)}^{n+1/2} \right) - \frac{c\Delta t}{\epsilon\Delta z} \left(H_{y(i,j,k+1/2)}^{n+1/2} - H_{y(i,j,k-1/2)}^{n+1/2} \right)$$

$$E_{y(i,j,k)}^{n+1} = E_{y(i,j,k)}^n + \frac{c\Delta t}{\epsilon\Delta z} \left(H_{x(i,j,k+1/2)}^{n+1/2} - H_{x(i,j,k-1/2)}^{n+1/2} \right) - \frac{c\Delta t}{\epsilon\Delta x} \left(H_{z(i+1/2,j,k)}^{n+1/2} - H_{z(i-1/2,j,k)}^{n+1/2} \right)$$

$$E_{z(i,j,k)}^{n+1} = E_{z(i,j,k)}^n + \frac{c\Delta t}{\varepsilon\Delta x} \left(H_{y(i+\frac{1}{2},j,k)}^{n+1/2} - H_{y(i-\frac{1}{2},j,k)}^{n+1/2} \right) - \frac{c\Delta t}{\varepsilon\Delta y} \left(H_{z(i,j+\frac{1}{2},k)}^{n+1/2} - H_{z(i,j-\frac{1}{2},k)}^{n+1/2} \right)$$

El valor de las componentes del campo eléctrico y magnético son tomados de los nodos internos $(i + \frac{1}{2}, j + \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2})$ y $(i - \frac{1}{2}, j - \frac{1}{2}, k - \frac{1}{2})$ para permitir una aproximación central de diferencias. El cálculo es llevado a cabo de manera iterativa hasta que se alcanza el tiempo computacional requerido.

Debido a la naturaleza bidimensional de los CFs tratados en este trabajo de tesis, es necesario derivar las ecuaciones de Maxwell para dos dimensiones. De esta forma se obtiene un sistema de ecuaciones para las polarizaciones en el modo transversal eléctrico y el modo transversal magnético (TE y TM respectivamente). Aunque la variación periódica del índice de refracción en el CF es bidimensional, la incidencia de la radiación electromagnética es perpendicular al plano del CF, lo que hace que el problema sea tridimensional. Sin embargo, por medio de argumentos de simetría es posible reducir el problema tridimensional a uno bidimensional.

5.2 Discretización de las ecuaciones de Maxwell bidimensionales

En el caso bidimensional, las ecuaciones de Maxwell se separan en dos sistemas: polarización en modo transversal eléctrico (TE) y polarización en modo transversal magnético (TM). En el caso de la polarización TE, se tiene componentes diferentes de cero del campo eléctrico y magnético H_x , E_y , H_z , todas las otras componentes son iguales a cero. En este caso el sistema de ecuaciones (5.1) se reduce al siguiente sistema:

$$\begin{aligned} \frac{\partial E_y}{\partial t} &= \frac{1}{\varepsilon} \left(\frac{\partial H_x}{\partial z} - \frac{\partial H_z}{\partial x} \right) \\ \frac{\partial H_x}{\partial t} &= \frac{1}{\mu_0} \frac{\partial E_y}{\partial z} \end{aligned} \quad (5.2)$$

$$\frac{\partial H_z}{\partial t} = -\frac{1}{\mu_0} \frac{\partial E_y}{\partial x}$$

Una vez obtenidas las expresiones para el modo TE de las ecuaciones de Maxwell, se pueden escribir las fórmulas de recurrencia de la misma forma que se obtuvieron previamente para el caso tridimensional:

$$E_{y(i,k)}^n = E_{y(i,k)}^{n-1} + \frac{\Delta t}{\epsilon \Delta x} \left(H_{x(i,k+\frac{1}{2})}^{n-1/2} - H_{x(i,k-\frac{1}{2})}^{n-1/2} \right) - \frac{\Delta t}{\epsilon \Delta y} \left(H_{z(i+\frac{1}{2},k)}^{n-1/2} - H_{z(i-\frac{1}{2},k)}^{n-1/2} \right)$$

$$H_{x(i,k+1/2)}^{n+1/2} = H_{x(i,k+1/2)}^{n-1/2} + \frac{\Delta t}{\mu \Delta z} (E_{y(i,k+1/2)}^n - E_{y(i,k)}^n)$$

$$H_{z(i+1/2,k)}^{n+1/2} = H_{z(i+1/2,k)}^{n-1/2} - \frac{\Delta t}{\mu \Delta z} (E_{y(i+1,k)}^n - E_{y(i,k)}^n)$$

Así, de forma similar, se obtienen las fórmulas de recurrencia para polarización en modo TM.

5.3 Método de Diferencias Finitas Dependiente del Tiempo (FDTD)

Para el caso de polarización TE, cada campo es representado por un arreglo bidimensional correspondiente a la malla mostrada en la figura 5.1

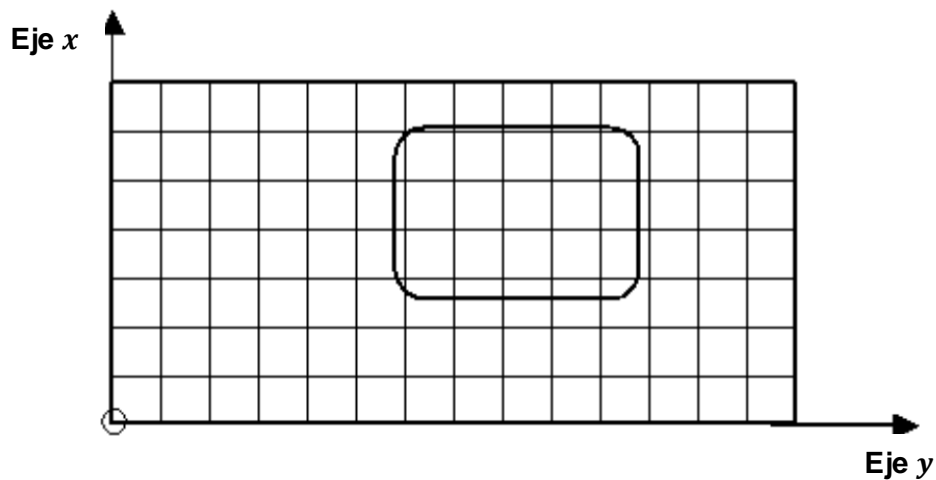


Figura 5.1. Dominio computacional bidimensional

Los pasos espaciales en las direcciones x, y son Δx y Δy . Cada punto de la malla está representado por un tipo específico de material y contiene información acerca de sus propiedades como el índice de refracción y parámetros de dispersión. Posteriormente la localización de los campos eléctricos y magnéticos se ilustran en la figura 5.2.

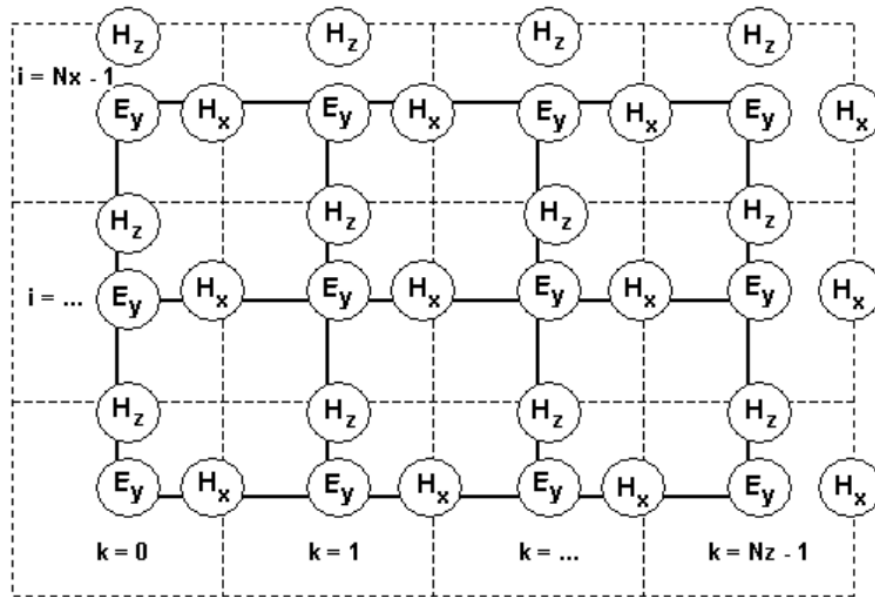


Figura 5.2. Localización de los campos TE en el dominio computacional

El diagrama que se muestra en la figura 5.2 se explica de la siguiente forma. La posición del campo E_y coincide con un nodo de la malla dada en la figura 5.1. En la figura 5.2, la línea sólida representa la malla de la figura 5.1. El campo E_y es considerado en el centro de la celda espacial en el método FDTD. Las líneas punteadas forman la celda FDTD. Ahora, el campo magnético H_x y H_z están asociados con el borde de la celda. Así, el campo H_x está asociado con los índices i y $(k + 1/2)$. De esta forma, el método FDTD utiliza aproximaciones de diferencias centrales para las derivadas numéricas en el espacio y en el tiempo, ambas con precisión de segundo orden. El software utilizado en este trabajo de tesis toma una discretización espacial de 10 a 20 pasos por longitud de onda. El muestreo temporal

es seleccionado para asegurar estabilidad numérica del algoritmo y está determinado por la siguiente ecuación:

$$\Delta t \leq 1/c \sqrt{\frac{1}{(\Delta x)^2 + (\Delta z)^2}}$$

Una vez definida la metodología de FDTD, es necesario definir las condiciones de frontera, condiciones iniciales y la relación de dispersión de los medios materiales que describen el CF.

La permitividad dieléctrica de los medios materiales se introduce usando los correspondientes coeficientes de la ecuación de Sellmeier que aproxima el comportamiento de ε con la longitud de onda de la siguiente forma:

$$\varepsilon = \varepsilon_0 + \sum_{i=1}^M \frac{A_i \lambda^2}{\lambda^2 + j\Gamma_i \lambda - \lambda_i^2}$$

De esta forma se puede construir la relación de dispersión de los medios materiales involucrados en el CF.

Posteriormente se introducen las **condiciones de frontera** y las **condiciones iniciales**. Las condiciones de frontera que presentan un mayor desempeño y son las más adecuadas para el modelado de CF son las condiciones de frontera de Capas Perfectamente Acopladas Anisotrópicas o No-divididas (APLM o UPLM). Estas condiciones representan una capa artificial absorbente, comúnmente usada para truncar las regiones computacionales en métodos numéricos para simular fronteras abiertas, especialmente en FDTD. La propiedad clave de las condiciones de frontera APLM o UPLM define un medio que no refleja en la interface. Estas propiedades de absorción son físicamente equivalentes a un medio anisotrópico de absorción uni-axial con los siguientes tensores de permitividad $\vec{\varepsilon}$ y permeabilidad $\vec{\mu}$:

$$\vec{\varepsilon} = \varepsilon \vec{S}, \quad \vec{\mu} = \mu_0 \vec{S}, \quad \text{con} \quad \vec{S} = \begin{pmatrix} S_x^{-1} & 0 & 0 \\ 0 & S_x & 0 \\ 0 & 0 & S_x \end{pmatrix} \begin{pmatrix} S_z & 0 & 0 \\ 0 & S_z & 0 \\ 0 & 0 & S_z^{-1} \end{pmatrix}$$

Donde $s_x = \kappa_x - i \frac{\sigma_x}{\epsilon_0 \omega}$, $s_z = \kappa_z - i \frac{\sigma_z}{\epsilon_0 \omega}$, y κ es la parte imaginaria de la permitividad.

Así, la minimización de la reflectancia numérica de las capas AMPL requiere un escalado espacial de la conductividad σ desde un punto igual a cero hasta el valor máximo en el que termine la ventana computacional.

$$\sigma(x) = \sigma_{max} \left(\frac{x}{L}\right)^m, \quad \kappa(x) = 1 + (\kappa_{max} - 1) \left(\frac{x}{L}\right)^m$$

Siendo L es el espesor de la capa AMPL. Valores típicos para m están comprendidos entre 2 y 4.

Para las **condiciones iniciales**, en este trabajo, la simulación numérica FDTD supone que en el tiempo del primer paso todos los campos ópticos son cero. El algoritmo necesita un campo inicial de excitación que se propaga a través del dominio computacional, este campo inicial es llamado campo incidente. El software OptiFDTD permite utilizar una excitación por pulso o de onda continua (CW). Aquí consideramos únicamente el caso de CW (continuous wave).

En la excitación de CW, la dependencia del tiempo para el campo incidente es una función senoidal de frecuencia única o monocromática. En el caso de CW la onda óptica se propaga hasta que alcanza el estado estacionario en todas las regiones del dominio computacional. De igual forma, este modo de CW es modulado como un haz Gaussiano y es expresado como:

$$E(x) = A \cdot e^{\left[-\frac{(x-x_0)^2}{2T^2}\right]}$$

Donde x_0 es la posición central y T es el ancho medio.

Finalmente, se describe la metodología del proceso de simulación para la distribución de campos ópticos, seguido por el software utilizado en este trabajo de tesis (OptiFDTD) que hace uso del método FDTD, mediante un diagrama de flujo mostrado en la figura 5.3.

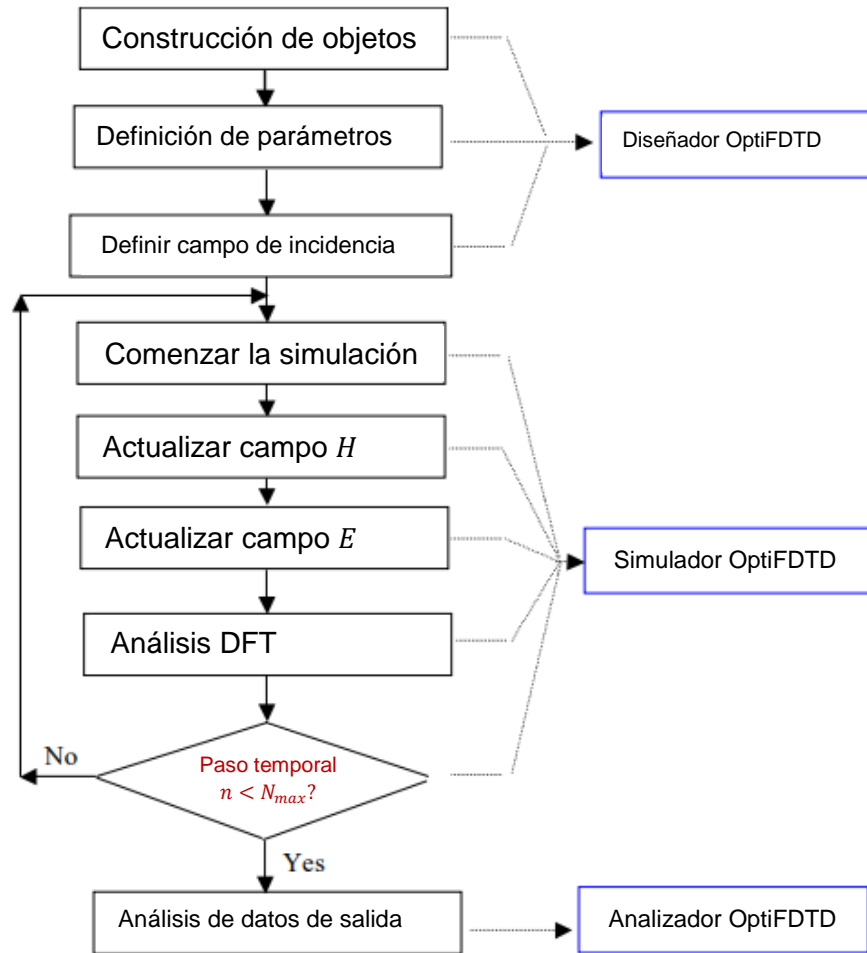


Figura 5.3. Diagrama de flujo para la simulación FDTD del software OptiFDTD.

5.3.1 Método FDTD para el cálculo de estructura de bandas fotónicas

En el cálculo de la estructura de bandas fotónicas, usando el método FDTD, primero es necesario poner atención en la dependencia temporal de las funciones eléctricas y magnéticas obtenidas por las soluciones del método FDTD. Los eigen-valores de la estructura óptica se encuentran mediante el análisis de la respuesta dependiente del tiempo bajo la excitación de un pulso. El cálculo del campo óptico \vec{E} es llevado a cabo únicamente en la celda unitaria. La periodicidad de la estructura es establecida con condiciones de frontera periódicas, de esta forma, se obtienen los

vectores de onda de la radiación electromagnética. Las ecuaciones utilizadas para resolver el problema son las descritas en la sección 5.2.

Después de que el cálculo del campo está completo, se aplica la transformada de Fourier, esto da el espectro completo de respuesta. Los Eigen-estados del CF corresponden a un máximo local del espectro debido a que el eigen-estado es una frecuencia de resonancia de la estructura. Esto significa que las condiciones de la fase, o la forma en la que se define el vector de onda de la radiación promueve la propagación de la radiación dentro de la estructura.

En general el cálculo de la estructura de bandas fotónicas usando el método FDTD debe llevarse a cabo siguiendo el procedimiento descrito a continuación:

1. Determinar el área de cómputo.
2. Establecer las condiciones de frontera periódicas.
3. Definir la función de excitación por radiación, siendo lo suficientemente ancho para cubrir todo el rango de frecuencias investigadas.
4. Llevar a cabo el análisis espectral de la respuesta dependiente del tiempo de la estructura con el pulso de prueba, encontrando todos los máximos locales y graficándolos sobre un eje de frecuencias.
5. Repetir los pasos del 2 al 4 para diferentes valores del corrimiento de fase en las condiciones de frontera periódicas correspondientes a todos los puntos seleccionados dentro de la zona de Brillouin del CF.

Una vez considerados todos los principios y puntos clave del método FDTD seguido por el software OptiFDTD, se prosiguió con el cálculo numérico del CF de nueve cavidades previamente construido y después se procede a comparar los datos arrojados por la simulación con los datos experimentales obtenidos.

CAPITULO VI

DISEÑO Y CONSTRUCCIÓN DE LOS CF

En este capítulo se trata la simulación numérica para el CF previamente construido. Los resultados obtenidos de la simulación y de la medición experimental son comparados y analizados con el propósito de verificar el acuerdo entre ambos resultados en el diseño de este tipo de estructuras fotónicas. Posteriormente se realiza una variación de los parámetros estructurales del CF en la simulación numérica con el propósito de generar un corrimiento en la posición de la máxima amplitud de la reflectancia óptica.

6.1 Simulación numérica del CF previamente construido

El CF construido previamente en las instalaciones del CIMAV, fue maquinado sobre un sustrato de Si con la deposición de una película delgada de ZnO con un espesor de 250 nm . En la interfaz del Si y el ZnO se forma una capa nativa homogénea de SiO_2 con un espesor entre 5 y 10 nm . Esta estructura fotónica describe una red primaria cuadrada de orificios circulares o columnas de aire con un diámetro $d = 0.5\ \mu\text{m}$ y una profundidad de $1\ \mu\text{m}$ separadas con un parámetro de red $a = 1.01\ \mu\text{m}$ maquinados en una región de $(80 \times 80)\ \mu\text{m}$. Embebida en la red de orificios circulares se describe otra red secundaria cuadrada de micro-cavidades cuasi-circulares de diámetro $D = 10\ \mu\text{m}$ y con un parámetro de red $A = 30\ \mu\text{m}$. Todas

estas características fueron consideradas en la simulación numérica para realizar el diseño del CF. La figura 6.1 muestra el diseño del CF en el software OptiFDTD.

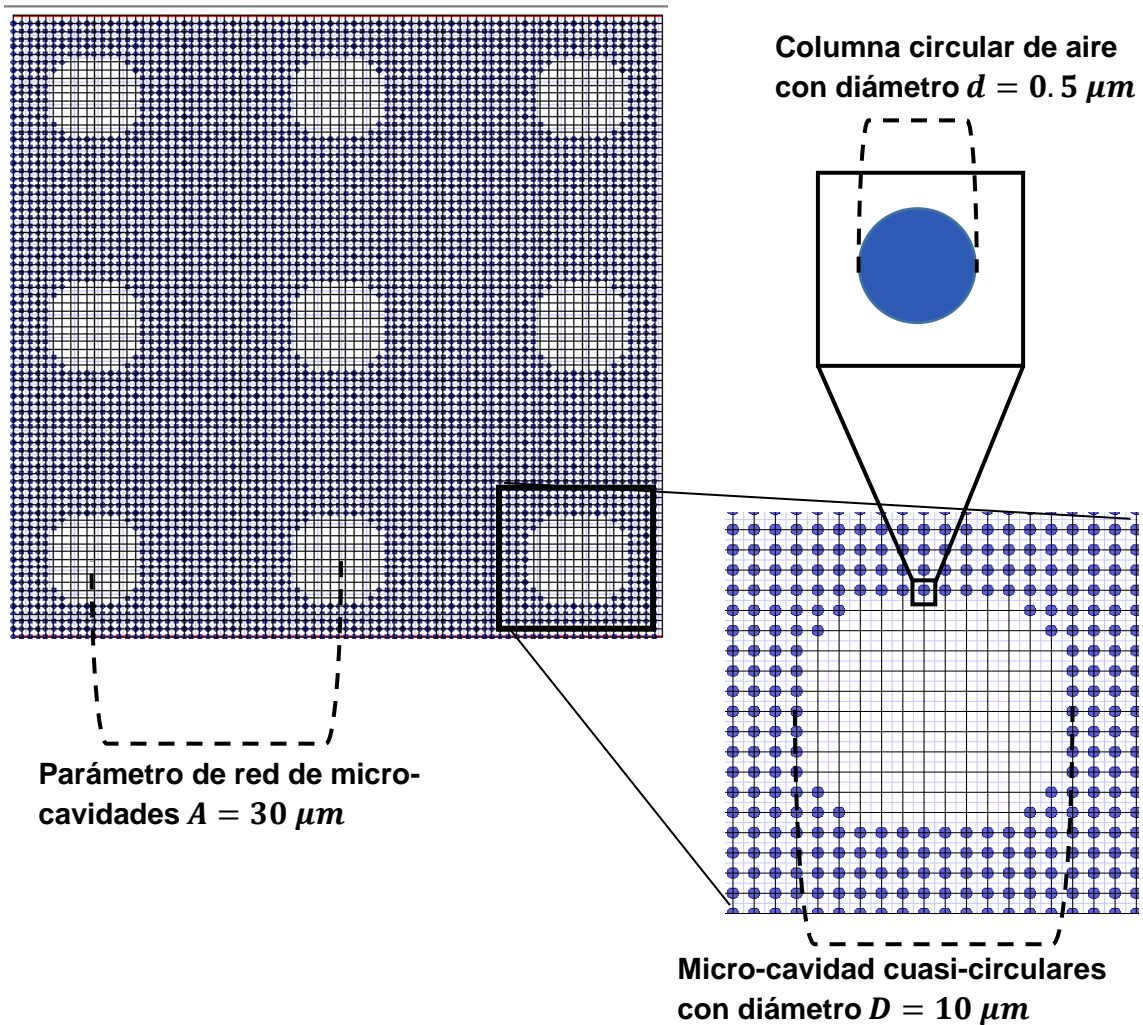


Figura 6.1. Diseño de CF en el software OptiFDTD descrito por una red cuadrada de orificios circulares con parámetro de red $a = 1.01 \mu\text{m}$ y una segunda red cuadrada de micro-cavidades embebida en la primer red.

Debido a que el cristal fotónico representa una región finita en el sustrato de Si-ZnO fue necesario construir toda la estructura y aplicar condiciones de frontera AMPL para truncar el dominio computacional.

Posterior al diseño del CF se procedió a la introducción de los coeficientes de la ecuación de Sellmeier obtenidos de la bibliografía para el Si, ZnO y SiO₂. Los correspondientes coeficientes de Sellmeier se muestran en la tabla 6.1.

	ϵ_0	A_1	A_2	λ_1	Γ_1
Si	1	10.66842	0.003043	0.30151	0
ZnO	2.814118	0.878968	0.00711	0.3042	0
SiO ₂	1	0.696166	0.40794	0.068404	0

Tabla 6.1. Coeficientes correspondientes para la ecuación de Sellmeier de los materiales utilizados en el CF previamente construido.

Una vez establecidos los coeficientes de la ecuación de Sellmeier para describir la relación de dispersión de los materiales, es necesario introducir el tipo de fuente de luz.

Para la fuente de luz se introdujo una fuente de ondas planas con modulación Gaussiana en modo de onda continua, debido a que esta fuente es la mejor aproximación a una fuente de luz láser. De igual manera se introdujeron los parámetros para el ancho medio del haz luminoso y la dirección de incidencia. Estos parámetros fueron considerados con la misma magnitud o menores que el tamaño del CF completo y del mismo orden que el haz producido experimentalmente, del orden de ~ 12 a $15 \mu m$.

El software permite realizar un barrido paramétrico en las longitudes de onda del haz luminoso incidente, esto permite encontrar fácilmente la longitud de onda que se refleja con mayor intensidad. Este barrido de las longitudes de onda se realizó

para un rango entre 0.6 a 1.6 μm discretizado por un paso de 0.05 μm . Así queda cubierto el rango de longitudes de onda que poseen los láseres disponibles en el laboratorio de Óptica del CIMAV. Finalmente, se introdujeron las condiciones de frontera AMPL (descritas en el capítulo anterior) y se procedió a dar comienzo con la simulación numérica.

Para ser consistentes con el proceso experimental, se realizó la simulación del CF de control que permite visualizar más claramente el efecto de la red de las micro-cavidades embebidas en la red rectangular de orificios. Este CF de control tiene los mismos parámetros de la red primaria del CF con micro-cavidades.

Una vez confirmado que la simulación numérica concuerda con los datos experimentales obtenidos de la medición óptica de la reflectancia, se prosiguió con la búsqueda de los parámetros estructurales del CF que permiten correr el pico máximo de reflectancia óptica en el dominio de la longitud de onda de la radiación incidente.

6.2 Simulación numérica para inducir un corrimiento del pico máximo de reflectancia

La idea principal para correr el pico máximo de reflectancia en el dominio de las longitudes de onda es inducir modos de oscilación en las micro-cavidades embebidas en el CF regular. Esto se atribuye a que la red primaria reduce de manera considerable la propagación de la radiación electromagnética en la película de ZnO. Por esta razón se modificó el parámetro de red del arreglo estructural primario, así como el diámetro de los orificios, manteniendo constante el diámetro y parámetro de red de las micro cavidades. Sin embargo, al realizar nuevamente la simulación numérica, el pico de reflectancia máxima disminuyó en intensidad y no se observó un desplazamiento significativo en este; en el rango considerado de longitud de onda.

Debido a que no se obtuvieron resultados satisfactorios al modificar únicamente los parámetros estructurales de la red primaria de orificios, se decidió modificar tanto el

parámetro de red como el diámetro de las micro-cavidades y los parámetros estructurales de la red primaria descrita por los orificios circulares de aire. Esto se realizó bajo la hipótesis de que la modulación de la reflectancia es producto de la interacción colectiva de los dos sistemas de redes, la red regular cuadrada y el arreglo estructural de micro-cavidades cuasi-circulares.

El nuevo CF que permitió correr el pico máximo de reflectancia con una intensidad similar al CF anterior, se obtuvo con un parámetro de la red primaria $a = 0.45 \mu m$ y un diámetro de orificios circulares $d = 0.24 \mu m$. La red descrita por las micro-cavidades cuasi-circulares se describió por un parámetro de red de $A = 13.5 \mu m$ y un diámetro $D = 4.5 \mu m$.

El nuevo cristal fotónico mostro un pico de reflectancia máxima de aproximadamente el 89 % en una región del espectro electromagnético centrada alrededor de una longitud de onda de $0.633 \mu m$. En este trabajo de tesis se refiere a este efecto como corrimiento al azul (CA). La dependencia de reflectancia como función de la longitud de onda obtenida de los resultados de la simulación numérica es discutida en el siguiente capítulo de resultados.

Con el éxito en el diseño de un CF que permite correr el pico máximo de reflectancia hacia el azul (CF-CA) en un rango de longitud de onda, se procedió a construir el CF con los parámetros estructurales que permiten establecer el pico máximo de reflectancia centrada en una longitud de onda de $0.633 \mu m$, esto en virtud de que en el laboratorio de propiedades ópticas del CIMAV se cuenta con un láser de He-Ne que emite luz con esta longitud de onda.

6.3 Construcción de un nuevo CF con corrimiento de la reflectancia hacia longitud de onda menores (CA).

El CF que permite correr el pico máximo de reflectancia hacia una longitud de onda de $0.633 \mu m$ se construyó con un equipo JEOL JEM-9320-FIB del Laboratorio Nacional de Nanotecnología en las instalaciones del CIMAV. Para el manejo de este

equipo se asistió a cursos de entrenamiento impartidos en la Quinta edición de la Escuela de Microscopía impartida en CIMAV.

Al igual que el CF previamente construido y caracterizado, el CF-CA se construyó en un sustrato de Si con una película delgada de ZnO-SiO₂ depositada con un espesor muy similar al del CF previamente construido.

En la construcción del CF-CA se utilizó en el equipo FIB, la opción de maquinado en forma de “spot”. Esta opción permite realizar un desbaste con la geometría del haz incidente de Iones de Galio emitido por el filamento del FIB. Usualmente, la geometría de la sección transversal del haz no es circular, sin embargo, se realizaron distintas pruebas para encontrar las condiciones de operación que permitieron lograr un spot circular y consecuentemente la generación de orificios circulares.

Las condiciones de operación apropiadas para la construcción del nuevo CF utilizadas en el equipo FIB fueron: una dosis de $25 \text{ nC}/\mu\text{m}^2$ y una corriente de operación de 50 pA . Estos parámetros de operación permitieron maquinar el cristal fotónico de red cuadrada con un parámetro de red de $\sim 0.45 \mu\text{m}$ constituida por orificios circulares con un diámetro de $\sim 0.24 \mu\text{m}$. Así mismo, fue posible establecer la red cuadrada de micro-cavidades, embebidas en la red primaria de orificios, con un diámetro de $4.5 \mu\text{m}$ y un parámetro de red de $13.5 \mu\text{m}$.

La figura 6.2 muestra una micrografía obtenida por SEM del CF-CA con los nuevos parámetros estructurales seleccionados para obtener una reflexión óptica máxima centrada en una longitud de onda de 633 nm .

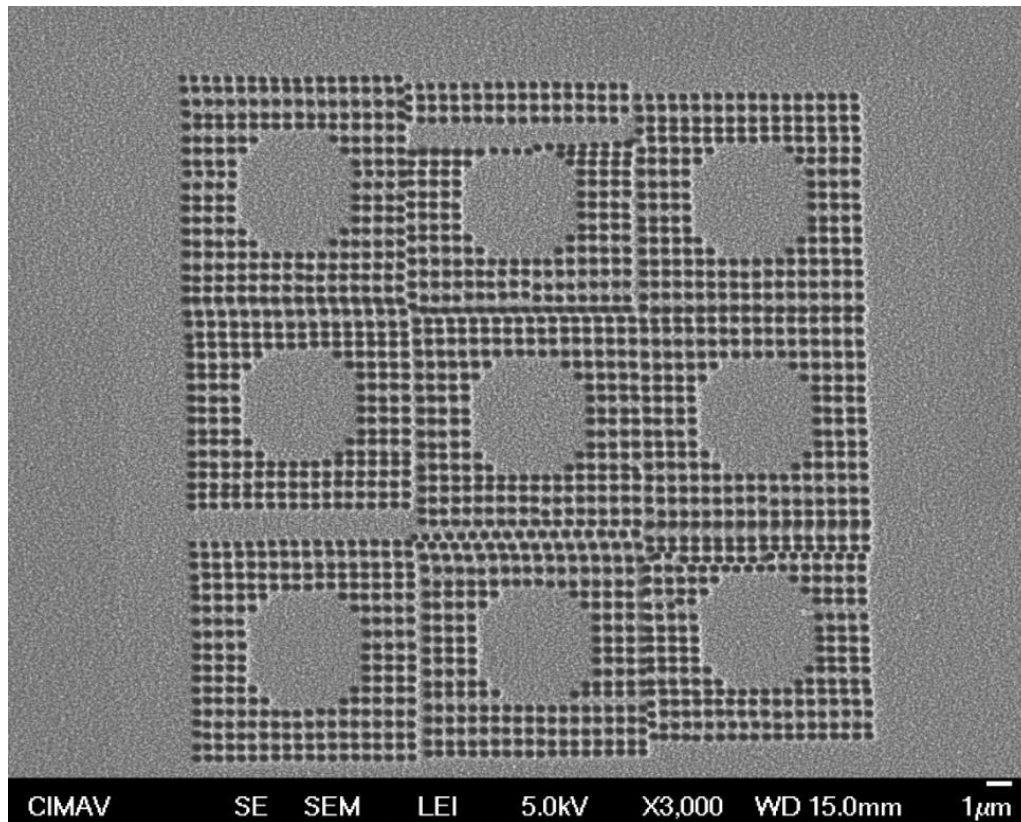


Figura 6.2 Micrografía obtenida por SEM del CF-CA con los nuevos parámetros estructurales requeridos para obtener una reflexión máxima en una longitud de onda de 633 nm.

En la figura 6.2 se puede observar que el nuevo CF-CA muestra una buena regularidad de la red descrita por los orificios circulares de aire. De igual manera, se observa que la red de micro-cavidades cuasi-circulares describe bastante bien una red cuadrada regular embebida en la red primaria de orificios circulares. No obstante, a pesar de que la regularidad de las redes que describen el CF-CA es bastante buena, se puede observar que existen regiones en el CF que tienen irregularidades en la red cuadrada de orificios circulares. Esto es debido a que el haz de iones de galio emitido por el equipo FIB, genera cargas electroestáticas en la superficie de la muestra en donde se fabricó el CF-CA. Las cargas electroestáticas en la superficie de la muestra ocasionan que el haz de iones de

galio se desvié, originando un desfase en la posición exacta de los maquinados. Estas irregularidades o defectos fueron considerados para realizar una nueva simulación numérica con el propósito de observar el efecto que ocasionan estos defectos, y también evaluar si es posible obtener una mayor coincidencia entre las mediciones experimentales y los cálculos numéricos realizados. Esta nueva simulación numérica es discutida en la sección de resultados.

En la figura 6.3 se muestra una micrografía obtenida por SEM de una de las micro-cavidades cuasi-circulares del CF-CA construido. Como se observa en la figura 6.3 los efectos de re-deposición (comunes en los maquinados por FIB) son mínimos o casi inexistentes. Adicionalmente la geometría de la micro-cavidad es muy similar a la que se consideró en la simulación numérica.

Otro aspecto importante de resaltar que se observa de la figura 6.3 es la regularidad de los orificios de aire. Esta uniformidad es importante debido a que, si la geometría del orificio no es circular, es posible que se establezcan oscilaciones complicadas de describir, lo que requeriría una alta cantidad de energía en el proceso de reflexión. Además de que esto resultaría ser muy costoso en términos computacionales para la simulación numérica.

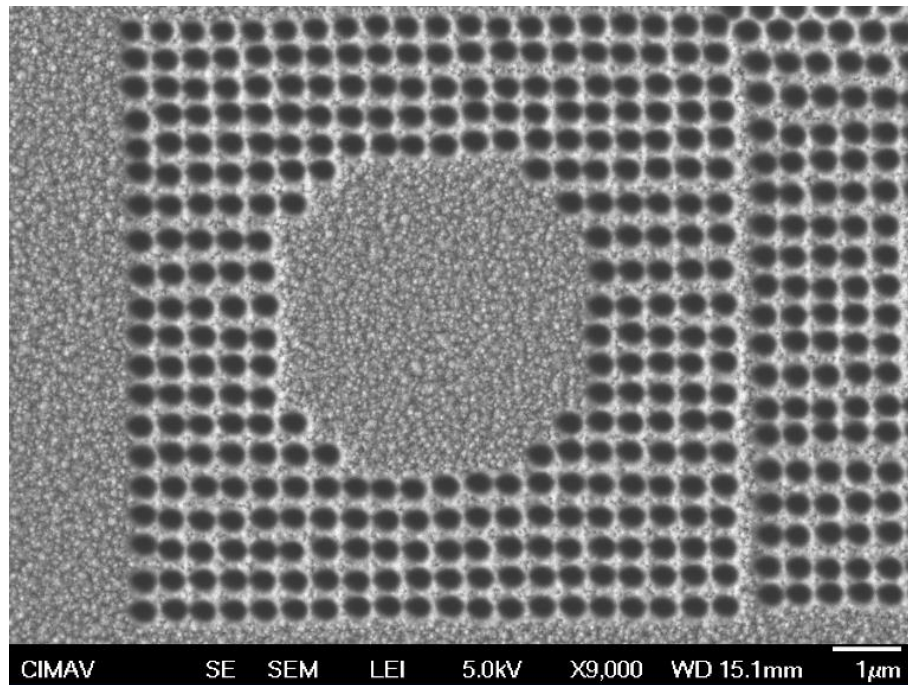


Figura 6.3 Micrografía obtenida por SEM de una micro-cavidad cuasi-circular del CF-CA con los nuevos parámetros estructurales requeridos para obtener una reflexión máxima centrada en una longitud de onda de 633 nm

CAPITULO VII

RESULTADOS

7.1 Resultados obtenidos de la caracterización del CF previamente construido

En la figura 7.1 y 7.2 se puede observar la comparación de los datos experimentales obtenidos de la caracterización óptica experimental y los datos teóricos obtenidos por la simulación numérica, ambos para el CF previamente construido.

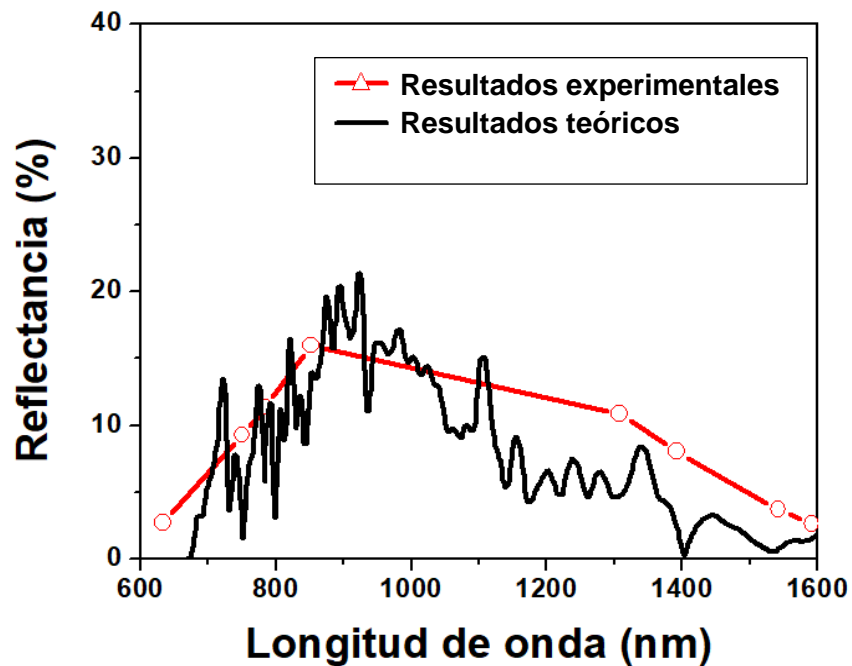


Figura 7.1. Reflectancia como función de la longitud de onda para el CF con micro-cavidades.

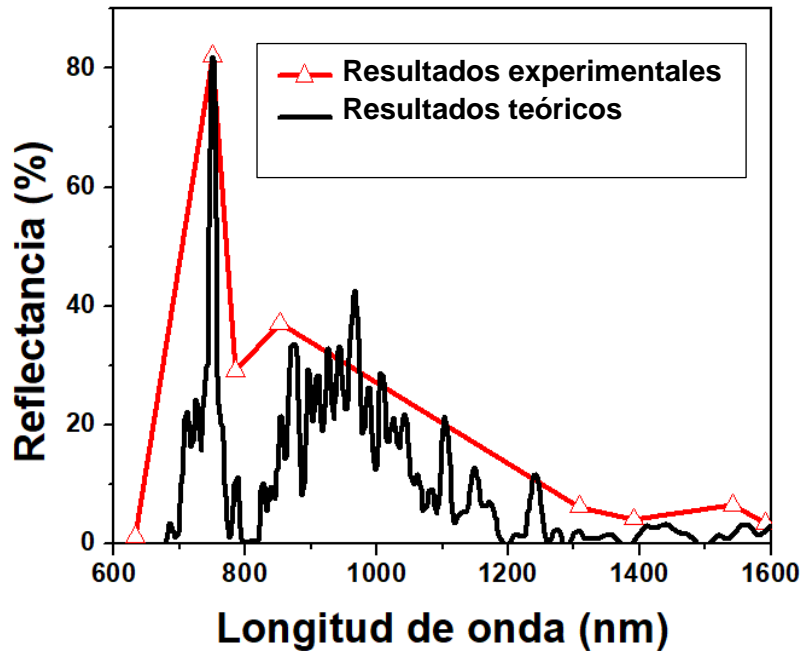


Figura 7.2. Reflectancia como función de la longitud de onda para el CF de control.

De las figuras 7.1 y 7.2 se observa que existe un buen acuerdo entre los datos experimentales y los datos obtenidos de las simulaciones numéricas. De igual manera, la simulación numérica confirma la hipótesis acerca del efecto de las micro-cavidades embebidas en la red primaria de orificios. Esto se observa claramente en la figura 7.1 con la presencia de un pico de reflectancia para una longitud de onda de 750 nm. Posteriormente se observa que este pico de reflectancia desaparece para el CF de control y que no tiene las micro-cavidades.

7.2 Resultados obtenidos de la caracterización del CF-CA

La caracterización del nuevo CF-CA fue realizada mediante el mismo procedimiento descrito en el capítulo 4. Nuevamente se obtuvo la dependencia de la reflectancia con la longitud de onda tanto de manera experimental como simulado numéricamente.

Como se mencionó en el capítulo anterior, el CF-CA presenta algunos defectos no deseados en la periodicidad de la red primaria de orificios de aire, originados por el desvío del haz de iones de galio producto del almacenamiento de carga electrostática en la superficie de la muestra. Estos defectos se consideraron para realizar una nueva simulación numérica. Una vez realizada esta simulación se observó que los defectos presentes en la red primaria del CF-CA no inducen un cambio significativo en el espectro de reflectancia. Esto se atribuyó a que el efecto de modulación de la reflectancia es ocasionado por fenómenos colectivos de difracción entre la red cuadrada descrita por los orificios de aire y la red cuadrada de micro-cavidades. Por otra parte, también se tiene que los defectos representan un área muy pequeña en comparación a la descrita por las redes del CF-CA y por ende su contribución no es significativa. La comparación entre los resultados obtenidos en la caracterización óptica experimental y la simulación numérica se muestran en la figura 7.3.

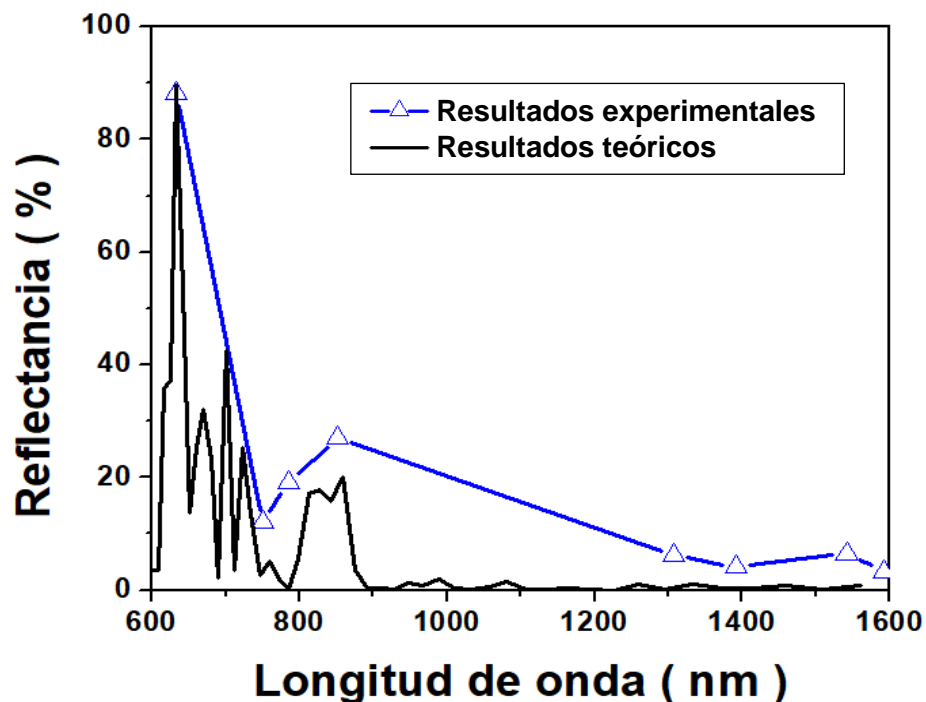


Figura 7.3 Dependencia de la reflectancia con la longitud de onda de la radiación incidente para el nuevo CF construido

Como se observa en la figura 7.3, existe un buen acuerdo entre los resultados obtenidos experimentalmente y los resultados obtenidos mediante la simulación numérica. De hecho, se observa que el pico máximo de reflectancia ubicado en la longitud de onda centrado en los 633 nm coincide en ambos casos, tanto el medido experimentalmente como el calculado. Por esta razón se decidió realizar la simulación numérica para nuevas estructuras que permitieran correr el pico máximo de reflectancia hacia longitudes de onda tanto mayores como menores respecto a la longitud de onda en la que se ubica el máximo de la reflectancia para el CF construido originalmente.

La figura 7.4 muestra la distribución del campo óptico en una de las micro-cavidades del CF.



Figura 7.4. Distribución del campo óptico en la micro-cavidad del CF

En la figura 7.4 se observa que, en la región descrita por la micro-cavidad, se establece una onda estacionaria, confinada por la red cuadrada de orificios circulares de aire. Fuera de la región descrita por la micro-cavidad se observa que las ondas electromagnéticas son considerablemente atenuadas, aunque, no

desaparecen por completo. La inducción de la onda estacionaria en la región de la micro-cavidad podría sugerir que los efectos de interferencia constructiva con los frentes de onda provenientes de la fuente de luz de irradiación sean favorecidos, dando lugar al surgimiento de un espectro de reflectancia más intenso.

7.3 Control de las propiedades ópticas reflectivas del CF

Debido a que la red cuadrada descrita por las micro-cavidades cuasi-circulares está embebida en la red cuadrada original de orificios circulares de aire, al cambiar el parámetro de red de esta última, los parámetros estructurales de la red de micro-cavidades cambiarán de manera directamente proporcional. Por lo tanto, solo es necesario cambiar los parámetros estructurales de la red cuadrada primaria descrita por los orificios circulares de aire para inducir el corrimiento del pico máximo de reflectancia. Consecuentemente, para correr el pico máximo de reflectancia hacia longitudes de onda mayores y/o menores, se escaló por varios factores F el valor del parámetro de red y el diámetro de los orificios circulares de aire del CF que se caracterizó inicialmente en este trabajo de tesis. De esta manera se realizaron las simulaciones para cada uno de los CF con los nuevos parámetros estructurales. Los factores F utilizados para establecer los nuevos CF fueron: 0.25, 0.5, 1.4 y 2 conservando la geometría cuadrada de ambas redes descritas por orificios circulares de aire y micro cavidades cuasi-circulares, utilizando como base el diseño del CF de nueve micro-cavidades con parámetro de red de $1 \mu m$.

Los resultados obtenidos de la simulación numérica para la dependencia de la reflectancia con la longitud de onda de los nuevos CF se muestran en la figura 7.5. El espectro de reflectancia como función de la longitud de onda de los CF con parámetros estructurales multiplicados por los factores $F = 1$ y $F = 0.5$ corresponden a los CF construidos, simulados numéricamente y caracterizados experimentalmente en este trabajo de tesis.

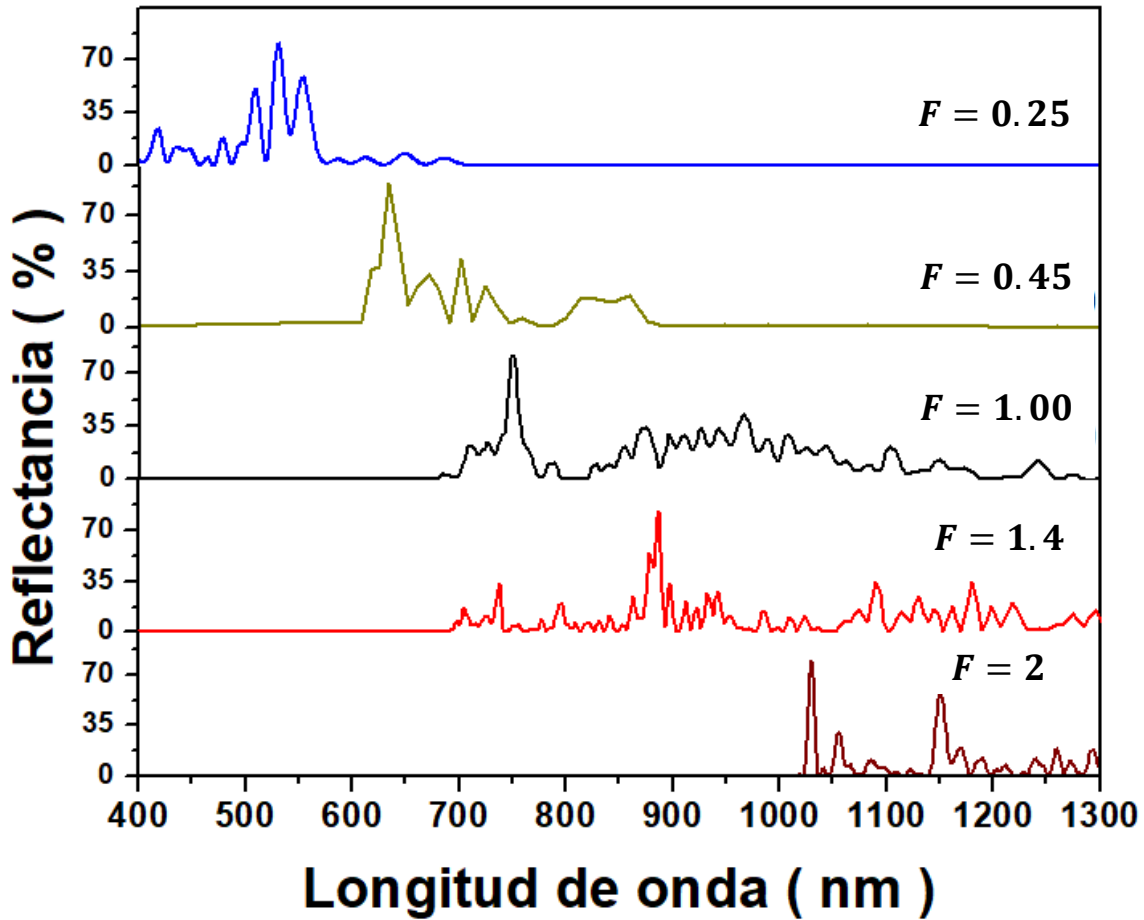


Figura 7.5 Dependencia de la reflectancia con la longitud de onda para los CF y sus respectivos picos máximos de reflectancia.

En la figura 7.5 se observan los distintos corrimientos del pico máximo de reflectancia hacia longitudes de onda mayores y menores con respecto del CF original con factor $F = 1$. Cada uno de los picos de reflectancia, muestran una intensidad que varía entre un rango del 80 al 90 %. Además, es posible observar una similitud entre los espectros de reflectancia de cada caso presentado en la figura 7.1. Cada espectro de reflectancia presenta el pico máximo seguido por contribuciones que varían en intensidad con un rango entre 20 a 35 %. Estas similitudes en la forma del espectro de reflectancia fueron atribuidas al hecho de que cada uno de los CF tiene la misma geometría.

7.4 Estructura de bandas fotónicas de los CF con $F = 0.45$ y $F = 1$

Posteriormente se obtuvo la estructura de bandas fotónicas que describen al CF-CA con $F = 0.45$ y al CF original con $F = 1$. Esto con el propósito de obtener información mucho más general de las características reflectivas y transmisivas de los CF construidos en este trabajo de tesis. Estos diagramas de bandas fotónicas se muestran en la figura 7.6 y 7.7, respectivamente.

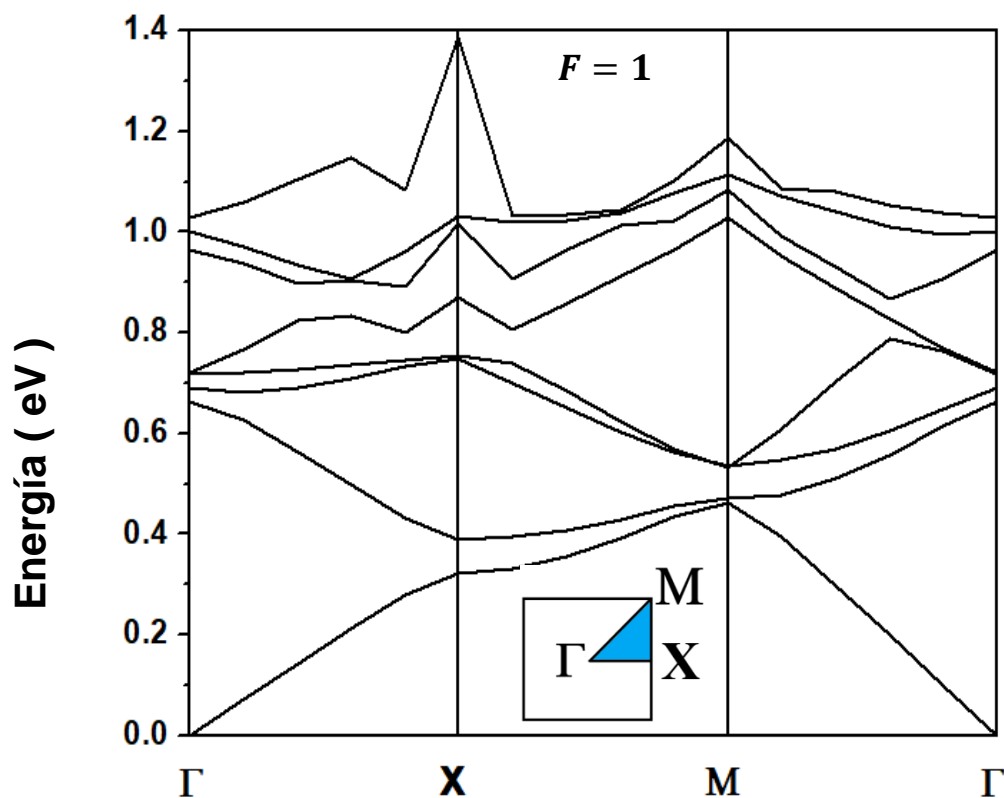


Figura 7.6 Estructura de bandas fotónicas para el CF-CA $F = 1$.

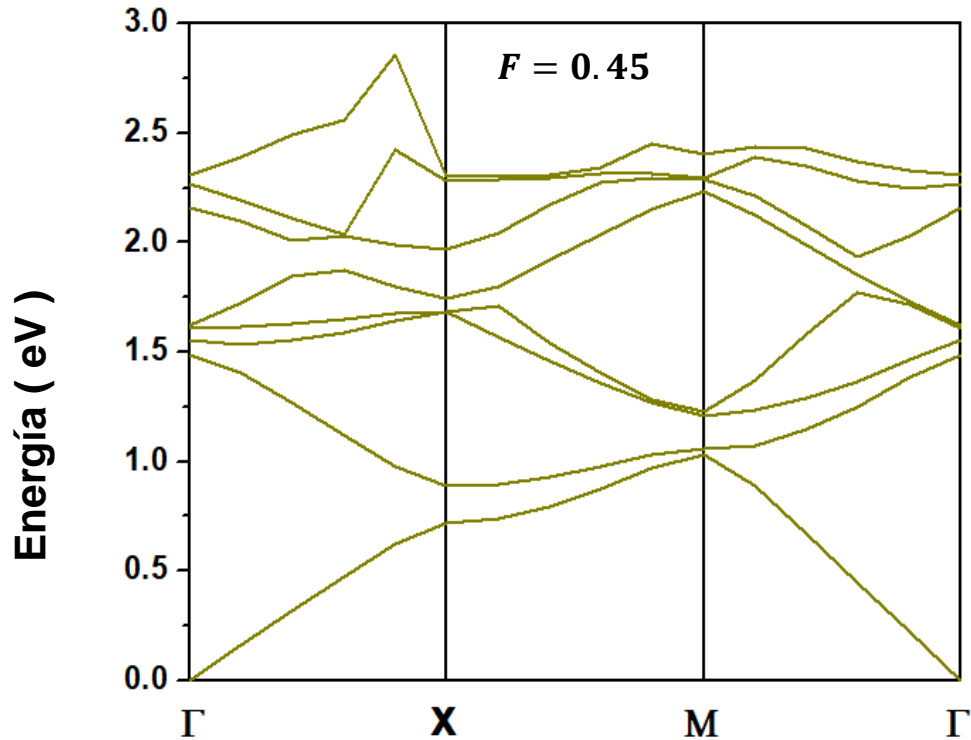


Figura 7.7 Estructura de bandas fotónicas para el CF con $F = 0.5$.

Las estructuras de bandas fotónicas mostradas en las figuras 7.6 y 7.7 despliegan las eigen-frecuencias o eigen-energías permitidas para las distintas direcciones del vector de onda que describen la celda unitaria de la red recíproca. En esencia, estas estructuras de bandas fotónicas tienen la misma forma. Sin embargo, los valores de energías (y consecuentemente de frecuencia) son diferentes, es decir, los valores de la estructura de CF-CA con $F = 0.45$ fueron corridos hacia energías mayores. Esto demuestra que, en efecto, el pico máximo de reflectancia es corrido hacia longitudes de onda menores respecto a la longitud de onda que ubica la máxima reflectancia en el cristal fotónico con $F = 1$ debido a la reducción de los parámetros estructurales del CF. Otro aspecto importante de las estructuras de bandas fotónicas mostradas en las figuras 7.7 y 7.8, es que no presentan bandas fotónicas prohibidas completas, solo se tienen bandas fotónicas prohibidas parciales. Esto explica porque el pico máximo de reflectancia no es del 100 %. Sin embargo, es posible que esta sea la misma razón por la que se induce el fenómeno colectivo de

difracción entre las dos redes descritas por la red cuadrada de orificios circulares de aire y la red cuadrada de micro-cavidades del CF.

7.5 Variación del espesor de la película delgada de ZnO

Finalmente se realizó un estudio del espesor de la película delgada de ZnO en el CF con $F = 1$. Para este estudio se utilizaron espesores de 0.10, 0.25, 0.75 1.00 y 1.10 μm . Esto se realizó con el propósito de observar el efecto que tiene incrementar la cantidad de ZnO en las micro-cavidades cuasi-circulares y verificar si la intensidad del pico máximo de reflectancia se ve afectado. La reflectancia como función de la longitud de onda para cada caso se muestra en la figura 7.8.

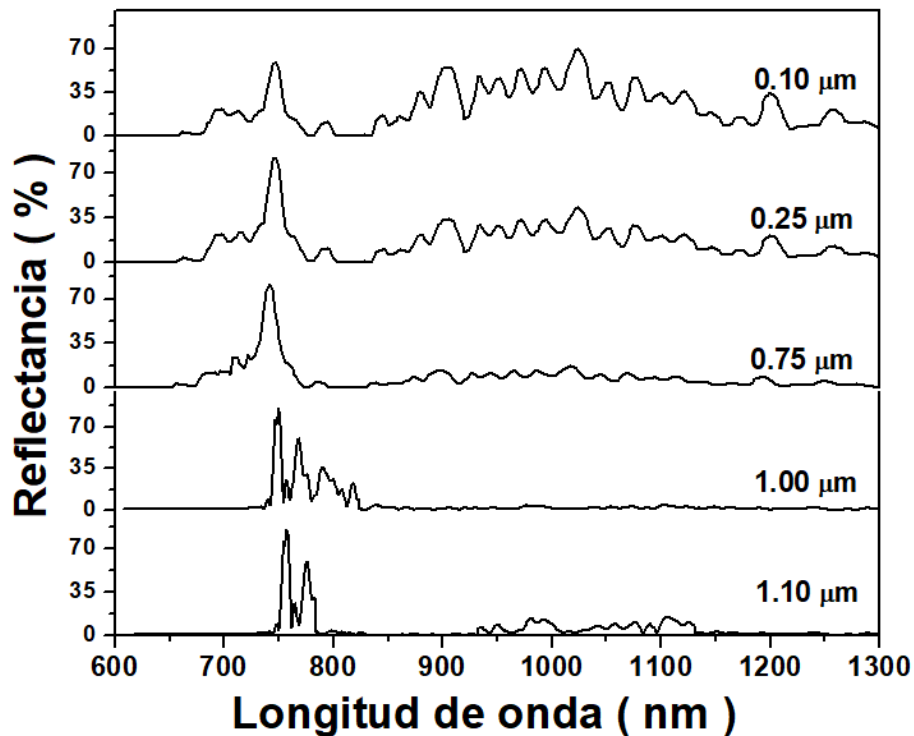


Figura 7.8 Espectros de reflectancia como función de la longitud de onda correspondientes a la variación del espesor en la película delgada de ZnO para el CF con $F = 1$.

El estudio de la variación del espesor en la película delgada de ZnO reveló que el incremento de su espesor origina que el espectro de reflectancia como función de la longitud de onda sea más monocromático. Esto se observa con la reducción del espectro de reflectancia en las regiones que comprenden el rango entre 850 *nm* y 1300 *nm*. De igual manera, no se observa un cambio significativo en la intensidad del pico máximo de reflectancia al variar el espesor de la película delgada de ZnO. Este fenómeno se atribuyó a la contribución de las propiedades reflectivas del ZnO, indicando su gran importancia en la manifestación de un pico de reflectancia con alta intensidad. Además se podría inferir que las contribuciones observadas en el rango de longitud de onda entre 850 *nm* y 1300 *nm* son atribuidas a las reflexiones producidas por el sustrato de silicio y la película delgada nativa de SiO₂.

CONCLUSIONES

De los resultados obtenidos, se puede concluir que, mediante la variación de los parámetros estructurales, específicamente el parámetro de red y el diámetro de los defectos estructurales u orificios que describen la red del cristal fotónico bidimensional de Si-ZnO, es posible controlar sus propiedades ópticas reflectivas.

Se demostró que la modulación de la reflectancia óptica, con incidencia a ángulo normal está determinada por efecto colectivo de difracción entre las micro-cavidades que describen la red cuadrada secundaria embebida en la red cuadrada de orificios circulares de aire. No obstante, el comportamiento de la reflectancia con la longitud de onda también está determinado por las contribuciones aportadas por las propiedades reflectivas de la película delgada de ZnO. Como consecuencia de ello se obtuvieron picos de reflectancia, en regiones específicas del espectro electromagnético dependientes de los parámetros estructurales, con una intensidad máxima del orden del $\sim 85\% \pm 5\%$. Esta modulación de la reflectancia óptica se atribuyó a la generación de ondas estacionarias confinadas en las regiones descritas por las micro-cavidades y la película delgada de ZnO, ocasionando un efecto de resonancia con los frentes de onda de la radiación electromagnética incidente.

Mediante la variación del espesor en la película delgada de ZnO se concluyó que existe una dependencia de la monocromaticidad de la reflectancia óptica del CF con el espesor de la película delgada de ZnO para la geometría del CF descrita en este trabajo de tesis, debido a efectos de interferencia constructiva destructiva.

Finalmente, gracias al acuerdo que existe entre los resultados experimentales y los resultados obtenidos a partir de las simulaciones numéricas, se concluye que es

factible diseñar cristales fotónicos bidimensionales con geometrías complicadas mediante el desarrollo de simulaciones numéricas con el método FDTD y realizar su construcción de manera eficiente y de forma controlada.

En el futuro es posible continuar con desarrollos referentes a este trabajo de investigación. Uno de los estudios que resultan de interés es verificar el efecto que tiene el variar la geometría de los arreglos estructurales de orificios y micro-cavidades que describen el cristal fotónico. Además, es de gran interés verificar si la estructura fotónica puede generar segundos armónicos, introduciendo alguna característica estructural, como los defectos o alguna otra película delgada de un medio dieléctrico diferente al ZnO integrada en la estructura fotónica.

REFERENCIAS

- [1] Yoshida, M., De Zoysa, M., Ishizaki, K., Tanaka, Y., Kawasaki, M., Hatsuda, R., Noda, S. (2018). Double-lattice photonic-crystal resonators enabling high-brightness semiconductor lasers with symmetric narrow-divergence beams. *Nature Materials*.
- [2] Elshahat, S., Abood, I., Khan, K., Yadav, A., Bibbo, L., & Ouyang, Z. (2018). Five-line photonic crystal waveguide for optical buffering and data interconnection of picosecond pulse. *Journal of Lightwave Technology*, 1–1.
- [3] Carlson, C., & Hughes, S. (2018). Disordered nanophotonic surfaces for enhanced light collection in semiconductor solar cells. *Journal of the Optical Society of America B*, 35(5), 1093.
- [4] Chutinan, A., Kherani, N. P., & Zukotynski, S. (2009). High-efficiency photonic crystal solar cell architecture. *Optics Express*, 17(11), 8871. doi:10.1364/oe.17.008871
- [5] Lord Rayleigh. 1917. "On the reflection of light from a regularly stratified médium." *Proc. Royal society of London* 93:565-577
- [6] Hecht, Eugene and Alfred Zajac. 1997. *Optics*. #rd ed. Reading, MA: Addison-Wesley
- [7] Benisty, H., Rattier, M., & Olivier, S. (2002). Two-dimensional photonic crystals: new feasible confined optical systems. *Comptes Rendus Physique*, 3(1), 89–102.
- [8] M. Sigalas, C.M. Soukoulis, E.N. Economou, C.T. Chan, K.M. Ho, Photonic band gaps and defects in two dimensions: studies of the transmission coefficient, *Phys. Rev. B* 48 (1993) 14121–14126
- [9] E. Yablonovitch, Inhibited Spontaneous Emission in Solid-state Physics and Electronics, *Physical Review Letters*, vol. 58, pp 2059-2062, 1987.
- [10] S. John, Strong Localization of Photons in Certain Disordered Dielectric Superlattices, *Phys. Rev. Lett.* 58 (1987) 2486-2489

- [11] I. A. Sukhoivanov, I. V. Guryev, *Photonic Crystals: Physics and Practical Modeling* (Springer, Heidelberg, 2009).
- [12] J. D. Joannopoulos, S. G. Johnson, R. D. Meade, J. N. Winn, *Photonic Crystals: Molding the Flow of Light (Second Edition)* (Princeton University Press, 2008).
- [13] C. Jamois, R. B. Wehrspohn, L. C. Andreani, C. Hermann, O. Hess, U. Gösele, Silicon-based two-dimensional photonic crystal waveguides, *Photonics Nanostruct* 1 (2003) 1-13
- [14] Aram MH, Khorasani S (2014) Efficient Analysis of Photonic Crystal Slabs. *J Laser Opt Photonics* 1: 111.
- [15] Louis de Broglie "The Reinterpretation of Wave Mechanics" *Foundations of Physics*, Vol. 1 No. 1 (1970).
- [16] "The Feynman Lectures on Physics Vol. I Ch. 30: Diffraction". www.feynmanlectures.caltech.edu. Retrieved 2019-04-25.
- [17] Hecht, Eugene (2002), *Optics* (4th ed.), United States of America: Addison Wesley, ISBN 978-0-8053-8566-3
- [18] Maxwell, J. C., *Treatise on Electricity and Magnetism*, 3rd edition (1891), 2 vols., reprint, Dover, New York (1954).
- [19] C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*. (Wiley, NY, 1996)
- [20] Jackson, J. D. 1998. *Classical Electrodynamics*. 3rd ed. New York: Wiley.
- [21] M. Born, E. Wolf, *Principles of Optics: Electromagnetic Theory of Propagation, Interference and Diffraction of Light*, 7th Edn. (Cambridge University Press, 1999)
- [22] V M Carrillo-Vázquez and J G Murillo, 2015 *Journal of Physics: Conference Series* 582 012053
- [23] Bahaa E. A. Saleh 1991, *Fundamentals of Photonics*, Columbia University, John Wiley.

[24] A. Taflove. S. C. Hagness 2000, Computational Electrodynamics, The Finite-Difference Time-Domain Method, Boston, London, ARTECH HOUSE.