



# UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

Posgrado en Ciencias Físicas

Instituto de Física

ESTUDIO DE SISTEMAS FOTÓNICOS ASIMÉTRICOS Y CUASI CRISTALINOS DE SILICIO POROSO, EFECTOS EN LA LOCALIZACIÓN DEL CAMPO E INFLUENCIA EN LA LUMINISCENCIA DE PUNTOS CUÁNTICOS

TESIS  
QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:  
DR. EN CIENCIAS (FÍSICA)

PRESENTA:  
RUIZ PÉREZ ATZIN DAVID

TUTOR PRINCIPAL:  
DR. JORGE ALEJANDRO REYES ESQUEDA, INSTITUTO DE FÍSICA

MIEMBROS DEL COMITÉ TUTOR  
DRA. ROCÍO NAVA LARA, INSTITUTO DE ENERGÍAS RENOVABLES.  
DRA. CITLALI SÁNCHEZ AKÉ, INSTITUTO DE CIENCIAS Y TECNOLOGÍA.

Ciudad Universitaria, Ciudad de México, junio del 2021



Universidad Nacional  
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

**Biblioteca Central**



**UNAM – Dirección General de Bibliotecas**  
**Tesis Digitales**  
**Restricciones de uso**

**DERECHOS RESERVADOS ©**  
**PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL**

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

## Resumen:

La fotónica estudia el transporte de luz en materiales cuya función dieléctrica  $\varepsilon(\vec{r})$  cambia de manera espacialmente ordenada. En arreglos periódicos la función es análoga a la distribución de partículas en un cristal. Como resultado, las propiedades de transporte de luz son análogas a las del transporte de electrones en el cristal: existen brechas de energía, energías permitidas y regiones de localización del campo.

En este trabajo se estudian los arreglos en una dimensión, donde la función dieléctrica se puede expresar como  $\varepsilon(\vec{r}) = \varepsilon(z)$ . Estos arreglos unidimensionales han encontrado una gran diversidad de aplicaciones en ramas como la medicina, la ingeniería, la ciencia básica, entre otras. Las aplicaciones aprovechan las regiones de alta reflexión (brechas fotónicas) o las de alta transmisión dentro de la brecha. En el primer caso con arreglos tipo Bragg y en el segundo con arreglos tipo microcavidad. Ambos son arreglos simétricos, pues el arreglo de Bragg tiene simetría de traslación y el arreglo tipo microcavidad simetría de espejo. Las propiedades que se derivan de esas simetrías han sido estudiadas de forma analítica y numérica, con el uso de técnicas como FDTD o el algoritmo de la matriz de transferencia.

Entre las propiedades que se estudian están: las regiones de alta reflexión, las regiones de alta transmisión, las regiones de localización de campo y regiones de altas densidades de estados. Todas ellas en dependencia con la función dieléctrica  $\varepsilon(z)$ .

Modificar las propiedades de simetría y las condiciones de incidencia y transmisión da lugar a localización crítica, direcciones permitidas y prohibidas no recíprocas, estados de alta transmisión no armónicamente distribuidos, entre otras. Estas respuestas no se pueden lograr con condiciones simétricas.

La herramienta que se ocupa, en este trabajo, para el estudio de esas propiedades es el método de la matriz de transferencia, tanto de forma analítica como numérica. Algunas de las respuestas encontradas comprueban experimentalmente fabricando arreglos con silicio poroso.

- a) Se deducen las condiciones relevantes para garantizar la conservación de las propiedades fotónicas, relajando las condiciones de simetría.
- b) Se estudian las asimetrías que compensan el efecto de reducción en la transmisión de luz en microcavidades debido a la diferencia de índices de refracción entre los medios de incidencia y transmisión, que al mismo tiempo mejoran la respuesta.
- c) Se calculan las densidades de estados y la intensidad del campo eléctrico en relación a la función dieléctrica en arreglos en secuencia de Fibonacci conjugado, para localizar numéricamente las regiones de relevancia, asociándolas a los espectros de reflexión.
- d) Se calculan las condiciones de camino óptico que garantizan que las regiones de altas densidades de estados en los bordes de las pseudobrechas de arreglos de Fibonacci conjugados se sintonicen con el pico de emisión de puntos cuánticos de CdSe/ZnS.
- e) Se muestran los resultados del estudio del proceso de formación de silicio poroso:
  - I. Se determina el tamaño de poro por medio del análisis de imagen de micrografías SEM.
  - II. Se determinan las temperaturas importantes durante el proceso de pasivación.
  - III. Se aplica la aproximación de medio efectivo para obtener los índices de refracción para al menos dos porosidades distintas.

- IV. Se determinan los corrimientos en los espectros de reflectancia inducidos por la oxidación del silicio poroso y la introducción de puntos cuánticos de CdSe/ZnS en los poros, y el resto de caracterizaciones necesarias para formar estructuras fotónicas con silicio poroso.
- f) Se muestran los espectros de reflectancia de estructuras de silicio poroso que reproducen experimentalmente las conclusiones acerca de las asimetrías.
  - g) Se muestran los resultados de fabricar arreglos de silicio poroso en secuencia de Fibonacci conjugado que favorecen el acoplamiento fuerte entre los fotones de estados localizados y los excitones de los puntos cuánticos.
  - h) Como resultado de ese acoplamiento se observan y estudian los picos resultantes del acoplamiento fuerte (separación de Rabi) entre los fotones propios de la simetría de largo alcance y los excitones. El fenómeno de acoplamiento se estudia usando como referencia el espectro de emisión de los puntos cuánticos en solución coloidal, que depende de sus dimensiones espaciales, el material del que están formados y la dispersión de tamaños.

### **Publicaciones:**

- a) Artículo: A. D. Ruíz Pérez, M. B. de la Mora, J. L. Benítez, R. Castañeda-Guzmán, J. A. Reyes-Esqueda, y M. Villagrán-Muniz, «In situ study of porous silicon thin films thermal oxidation by pulsed laser photoacoustics», *Semicond. Sci. Technol.*, vol. 33, n.o 8, p. 085001, ago. 2018, doi: 10.1088/1361-6641/aacbe4
- b) Artículo: A. D. Ruiz-Pérez y J.-A. Reyes-Esqueda, «Generalization of microcavities: Effects of asymmetry in the field localization and transmittance for supported microcavities», *Photonics and Nanostructures - Fundamentals and Applications*, vol. 45, p. 100915, jul. 2021, doi: 10.1016/j.photonics.2021.100915.
- c) Tesis de licenciatura del Alumno Iván Montaña Jaramillo dirigida por el autor de esta tesis durante el periodo de doctorado, titulada: Estudio de los efectos de un cátodo vibrante durante la síntesis de películas simples de silicio poroso. 2021

### **Presentaciones en congresos:**

- d) MRS 2019: Photonic Joined Structures- Microcavity enhancement.
- e) LamLibs CSI XLI 2019: Porous silicon porosity determination by photoacoustic spectroscopy.

# Indice

<b>Introducción</b> .....	<b>1</b>
<b>Capítulo I</b> .....	<b>5</b>
<b>Resumen</b> .....	<b>5</b>
<b>I Matriz de transferencia</b>	
I.I Fundamentos del método de la matriz de transferencia.....	7
I.II Soluciones a la ecuación del campo eléctrico	
I.II.i Método iterativo .....	12
I.II.ii Aproximación WKB.....	13
I.III Método de múltiples reflexiones .....	16
I.IV Método de ondas planas .....	18
I.V Reflexión y transmisión de ondas planas.....	19
<b>Capítulo II</b> .....	<b>23</b>
<b>Resumen</b> .....	<b>23</b>
<b>II Análisis de estructuras fotónicas</b>	
II.I Solución de una película simple .....	24
II.II Solución arreglos multicapas periódico .....	26
II.III Función de dispersión .....	28
II.IV Brechas fotónicas.....	29
II.V Relaciones de reciprocidad .....	35
II.VI Fase de la reflectancia.....	36
II.VII Arreglos infinito tipo Bragg .....	37
II.VIII Regiones de alta transmitancia.....	38
II.VIII.i Cavity de Fabry-Perot.....	39
II.VIII.ii Microcavity (generalización) .....	39
II.VIII.iii Estructura semisimétrica.....	40
II.VIII.iv Estructura asimétrica .....	41
II.VIII.v Alta transmitancia sin simetría perfecta .....	44
1 Arreglos aleatorios .....	44
2 Arreglos de Fibonacci .....	45
3 Arreglos de Fibonacci conjugado .....	50
II.IX Atenuación del campo eléctrico en una estructura periódica .....	54
II.X Efectos del número de capas .....	55
II.XI Densidad de estados .....	56
II.XII Factor de Purcell.....	58
<b>Capítulo III</b> .....	<b>63</b>
<b>Resumen</b> .....	<b>63</b>
<b>III Puntos cuánticos</b>	
III.I Emisión de cuerpo negro .....	64

III.II Coeficientes de Einstein .....	65
III.III Ensanchamiento de líneas de emisión .....	67
III.IV Pozo de potencial finito .....	68
III.V Heteroestructuras dieléctricas.....	70
III.VI Masa efectiva en heteroestructuras.....	73
III.VII Puntos cuánticos esféricos.....	75
<b>Capítulo IV .....</b>	<b>80</b>
<b>Resumen .....</b>	<b>80</b>
<b>IV Polaritones (Separación de Rabi)</b>	
IV.I Osciladores acoplados .....	81
IV.II Excitón en un campo armónico .....	83
IV.III Átomo de dos niveles.....	86
IV.IV Acoplamiento fotón-excitón.....	89
<b>Capítulo V .....</b>	<b>97</b>
<b>Resumen .....</b>	<b>97</b>
<b>V Silicio poroso</b>	
V.I Generalidades .....	98
V.II Determinación del índice de refracción.....	106
V.III Síntesis de silicio poroso .....	110
<b>Capítulo VI .....</b>	<b>116</b>
<b>Resumen .....</b>	<b>116</b>
<b>VI Resultados</b>	
VI.I Microcavidades asimétricas.....	118
VI.I.i Microcavidad asimétrica óptima.....	121
VI.II Estudio de la luminiscencia en arreglos de Fibonacci conjugado .....	127
<b>Capítulo VII .....</b>	<b>139</b>
<b>VII Conclusiones.....</b>	<b>139</b>
<b>Anexo A.....</b>	<b>141</b>
<b>Anexo B .....</b>	<b>148</b>

## Introducción

La Fotónica estudia la generación, la detección y el control del transporte de fotones en los materiales. Tiene un gran número de aplicaciones en las telecomunicaciones, la medicina, la generación de energía eléctrica, el estudio de principios fundamentales, nuevas fuentes de luz y en muchas otras áreas de la ciencia. Las aplicaciones aprovechan los efectos resultantes del control espacial de la función dieléctrica  $\varepsilon(\vec{r})$ .

Un arreglo fotónico permite controlar  $\varepsilon(\vec{r})$  a partir de la unión de materiales con diferentes funciones dieléctricas  $\varepsilon_x(\vec{r})$ . Si un arreglo fotónico es tal que su función dieléctrica cambia únicamente en una dirección, que se etiqueta con la coordenada  $z$ , se describe como  $\varepsilon(\vec{r}) = \varepsilon(z)$  y se dice que el arreglo es unidimensional. Este trabajo se centra en los arreglos unidimensionales.

Con frecuencia los arreglos fotónicos son uniones que cumplen con condiciones de simetría de corto o largo alcance, análogas a las presentes en las distribuciones de átomos (centros dispersivos) que forman los cristales sólidos. Y de forma similar a los cristales, esas condiciones garantizan la formación de brechas, o intervalos espectrales en los cuales una onda con energía y dirección dentro de la brecha no puede propagarse a través del medio.

Introducir un defecto en la simetría de corto alcance forma estados permitidos en las brechas, caracterizados por una alta transmisión y frecuentemente asociados a la longitud de onda resonante o longitud de onda del doble del tamaño del defecto (en el espacio fase). Por esa razón, esos estados se han asociado a las simetrías del arreglo y se suelen estudiar en circunstancias ideales, en las que el medio de incidencia es el mismo que el medio de transmisión. De no cumplirse esta última condición en arreglos con simetría de espejo, como las microcavidades, hay una reducción de la transmitancia, una reducción del máximo de intensidad de campo eléctrico en el defecto, una reducción de la densidad de estados la longitud de onda resonante, etc.

En este trabajo se revisan las condiciones, en longitudes de onda particulares, que conservan las propiedades de estados permitidos y brechas, aun cuando no existe simetría alguna. Además, se muestra como una asimetría permite, no solo compensar el efecto que resulta de condiciones de incidencia y transmisión distintas, sino que mejora la respuesta. Las condiciones predichas se comprueban experimentalmente formando los arreglos óptimos con silicio poroso.

Por otro lado, las simetrías de corto alcance interesan a la fotónica, entre otras razones, por su interacción con las fuentes de luz [1, 2]. En particular con fuentes de luz dentro de la estructura fotónica, que en comparación con aquellas que están acopladas externamente, reducen las fugas de luz.

El estudio de las fuentes de luz está directamente asociado con el transporte de la luz [3], la intensidad máxima del campo en función de la posición y las densidades de estados, ya que la densidad de estados es inversamente proporcional a la velocidad de propagación [4]. Dado que en los arreglos simétricos las altas densidades de estado se localizan en los estados permitidos en las brechas, es frecuente que se estudie la emisión en esos estados [5].

En ese sentido, lo que hace atractivo a los arreglos no simétricos en secuencia de Fibonacci, son propiedades como: el incremento de las densidades con un reducido número de capas, una mejor

respuesta en los bordes de las brechas comparado con las microcavidades, un comportamiento espectral no armónico tipo fractal [6], una localización de campo extendida, entre otras. Esas propiedades se preservan en los arreglos en secuencia de Fibonacci conjugada, agregando estados de transmisión perfecta [7].

En este trabajo se estudian las regiones de localización del campo de arreglos de Fibonacci conjugado y su acoplamiento con la emisión de puntos cuánticos de CdSe/ZnS en solución coloidal, es decir, los polaritones fotón-excitón resultantes del acoplamiento entre los estados de alta densidad de estados del arreglo fabricado en silicio poroso en secuencia de Fibonacci conjugado y los excitones de puntos cuánticos dentro de la estructura.

Como resultado del acoplamiento se observa la separación del pico simple, característico de los puntos cuánticos en solución coloidal, en un espectro de dos picos o separación de Rabi, propia de un acoplamiento fuerte.

Para fabricar el arreglo en silicio poroso e introducir los puntos cuánticos en sus poros, se estudian las condiciones de fabricación, las temperaturas umbrales en el proceso de oxidación, los corrimientos espectrales de las brechas derivados de la oxidación y a la introducción de los puntos cuánticos, las características de los poros como el tamaño longitudinal y transversal de poro, etc. Una caracterización cuidadosa permite obtener arreglos con un error de  $\pm 7$  nm en la región de alta densidad de estados, en este caso el borde de la pseudo-brecha, lo que es muy importante debido a que el ancho del pico de emisión de los puntos cuánticos es de 30 nm.

Una ventaja importante del silicio poroso, además del alto contraste, el bajo costo de fabricación en comparación con otras técnicas y la capacidad para formar arreglos con alta precisión, es que permite la fabricación de estructuras activas con técnicas muy baratas, basta con sumergir las estructuras o depositar por goteo para obtenerlas.

Como resultado de este trabajo se presentan dos artículos como primer autor y la introducción a un tercer trabajo que no pudo ser terminado debido al acceso limitado al laboratorio durante el periodo de la pandemia de covid, con los temas:

- a) Caracterización in situ del proceso de oxidación del silicio poroso.
- b) Generalización de micro cavidades soportadas usando asimetrías.
- c) Estudio de la emisión de puntos cuánticos en estructuras de silicio poroso de Fibonacci conjugado.

Además, se dirigió la tesis del alumno de licenciatura Ivan Montaña Jaramillo: Estudio de los efectos de un cátodo vibrante durante la síntesis de películas simples de silicio poroso, que se defenderá entre Abril y Mayo del 2021.

Y se participó en 2 congresos internacionales presentando trabajos:

- MRS 2019: Photonic Joined Structures-Microcavity enhancement
- LambLibs CSI XLI 2019 Porous silicon porosity determination by photoacoustic spectroscopy.

La tesis se estructura en los siguientes capítulos:

- I. **Matriz de transferencia.** En este capítulo se hace la deducción de la matriz de transferencia. Se exploran distintos enfoques que se encuentran frecuentemente en la bibliografía y desde el punto de vista del autor pueden causar confusión, dado que no sólo los coeficientes son distintos, sino también las condiciones que limitan el uso de cada una de las técnicas. El análisis no es exhaustivo, ya que existen muchos métodos más, como el usado para plasmones, que forma la matriz con los coeficientes de Fresnel.
- II. **Análisis de estructuras fotónicas:** En este capítulo se estudian las propiedades de los arreglos fotónicos a partir del formalismo de la matriz de transferencia. Se describen las diferencias entre las distintas simetrías, cristalina conmensurable y no conmensurable, cuasi cristalina, semi-simétrica, no simétrica y aleatoria.
- III. **Puntos cuánticos:** En este capítulo se hace una introducción a los puntos cuánticos y su proceso de emisión, así como la influencia de las densidades de estados en los procesos de emisión.
- IV. **Polaritones (Separación de Rabi).** En este capítulo se estudia el fenómeno de acoplamiento fuerte, sus características más importantes y su origen, así como las condiciones que lo favorecen.
- V. **Síntesis y caracterización de silicio poroso.** En este capítulo se estudia el proceso de síntesis de silicio poroso y las caracterizaciones necesarias para poder emplearlo como matriz en una secuencia fotónica que contenga nano partículas.
- VI. **Resultados.** En este capítulo se mencionan los resultados del estudio de fotónica obtenidos durante el periodo de doctorado, aunque se omite lo relativo al proceso de oxidación (primer artículo publicado), dado que a pesar de ser un estudio necesario para comprender como evitar la degradación de los puntos cuánticos en la estructura, no es un proceso que se pueda entender con los fundamentos teóricos descritos en los capítulos anteriores, en su caso habría sido necesario una sección relativa a las propiedades de espectros ATR (interpretación y origen), así como de fotoacústica y procesos de oxidación de la superficie rica en hidrogeno del silicio poroso recién sintetizado. Es consecuencia, se presentan los resultados relativos a:
  - a. Solución al problema de soporte: Se estudian las razones por las cuales una estructura no simétrica puede alcanzar una mejor respuesta comparada con una estructura simétrica cuando las condiciones de frontera favorecen a la asimétrica.
  - b. Luminiscencia en arreglos de Fibonacci conjugados. Se muestra una aplicación de la interacción de las regiones de alta densidad de estados, en una estructura fotónica cuasi cristalina, con la luminiscencia de puntos cuánticos, es decir, como el acoplamiento fuerte genera una separación del espectro de emisión, separación de Rabi. Esta separación es interesante por varias razones
    - i. Porque se muestra el acoplamiento fuerte a pesar de que no existe una definición de factor de calidad de la cavidad.
    - ii. Porque el acoplamiento no es con fotones resonantes como en la microcavidad, donde la resonancia está asociada a la solución de una caja de potencial finita, sino con los fotones propios de una simetría de largo alcance
    - iii. Porque los niveles de largo alcance no son equidistantes (son no conmensurables), lo que puede ser atractivo pues no es eficiente en

procesos no lineales, que pueden resultar en la reducción de la eficacia por la no saturación de un sistema con niveles energéticamente equidistantes como la caja de potencial.

- iv. Las regiones de acoplamiento se observan en una estructura completamente continua y sin regiones de muy bajo índice de refracción. Debe recordarse que una condición que favorece el acoplamiento fuerte es una región donde el campo máximo cambia rápidamente favoreciendo el momento dipolar del excitón, eso se puede lograr introduciendo una tercera región con un índice de refracción muy bajo. El autor considera que el origen de esta propiedad es la localización crítica del campo presente en algunas estructuras no cristalinas, como las estructuras en secuencia de Fibonacci, aunque aún no lo ha mostrado.
- c. **Conclusiones.** En éste último apartado se destacan los resultados finales alcanzados durante el proyecto y se plantean algunos temas de estudio a futuro relativos a los efectos de acoplamiento fuerte entre las regiones de alta densidad de estados de arreglos fotónicos y otros sistemas.

## Bibliografía

- [1] Z. Wang *et al.*, «Novel Light Source Integration Approaches for Silicon Photonics: Novel Light Source Integration Approaches for Silicon Photonics», *Laser Photonics Rev.*, vol. 11, n.º 4, p. 1700063, jul. 2017, doi: 10.1002/lpor.201700063.
- [2] H. N. Paulsen, K. M. Hilligse, J. Thøgersen, S. R. Keiding, y J. J. Larsen, «Coherent anti-Stokes Raman scattering microscopy with a photonic crystal fiber based light source», *Opt. Lett.*, vol. 28, n.º 13, p. 1123, jul. 2003, doi: 10.1364/OL.28.001123.
- [3] Y. Zhao, Y.-N. Zhang, Q. Wang, y H. Hu, «Review on the Optimization Methods of Slow Light in Photonic Crystal Waveguide», *IEEE Trans. Nanotechnol.*, vol. 14, n.º 3, pp. 407-426, may 2015, doi: 10.1109/TNANO.2015.2394410.
- [4] G. A. Ozin, A. C. Arsenault, L. Cademartiri, y Royal Society of Chemistry (Great Britain), *Nanochemistry: a chemical approach to nanomaterials*. 2015.
- [5] W. E. Hayenga y M. Khajavikhan, «Unveiling the physics of microcavity lasers», *Light Sci. Appl.*, vol. 6, n.º 8, pp. e17091-e17091, ago. 2017, doi: 10.1038/lsa.2017.91.
- [6] E. Maciá, «Optical engineering with Fibonacci dielectric multilayers», *Appl. Phys. Lett.*, vol. 73, n.º 23, pp. 3330-3332, dic. 1998, doi: 10.1063/1.122759.
- [7] R. Nava, J. Tagüeña-Martínez, J. A. del Río, y G. G. Naumis, «Perfect light transmission in Fibonacci arrays of dielectric multilayers», *J. Phys. Condens. Matter*, vol. 21, n.º 15, p. 155901, abr. 2009, doi: 10.1088/0953-8984/21/15/155901.

## Capítulo I.

### Matriz de Transferencia

#### Resumen:

Existen varias formas de resolver la ecuación de onda asociada al transporte de luz en medios dieléctricos: la solución analítica, la solución por diferencias finitas, los métodos de matriz de transferencia, etc. En este capítulo se hace un repaso de la teoría general de la matriz de transferencia para resolver las ecuaciones de Maxwell. Si bien esta revisión no es exhaustiva, tiene la intención de mostrar algunas de las técnicas que se ocuparon para el estudio de las brechas fotónicas, y dar un respaldo teórico a los supuestos empleados durante el estudio de las propiedades del silicio poroso, los espectros de reflectancia y las densidades de estados.

Es conveniente hacer la revisión, dado que no todas las formas de deducir la matriz de transferencia permiten trabajar de manera directa con índices de refracción complejos, y algunas son más fáciles de tratar en problemas específicos: al estudiar las brechas fotónicas (o bandas prohibidas), los espectros de transmitancia y reflectancia, la densidad de estados, etc.

En el presente capítulo se reproducen diversas formas de expresar la matriz de transferencia, con la intención de interpretar correctamente las fórmulas que relacionan sus componentes con las propiedades de los arreglos fotónicos. Los métodos revisados son:

- Método de la solución de la ecuación de onda a partir de la suma de dos soluciones particulares. En este método se resuelven las ecuaciones de Maxwell usando el método de separación de variables, donde la constante de separación corresponde a la ley de Snell. La matriz de transferencia deducida no puede ocuparse si los índices son complejos. Las soluciones son ecuaciones de Riccati.
- Método iterativo: Este método resuelve el problema de forma iterativa, partiendo de una solución particular o de la variable de separación descrita en el primer método. El método iterativo se compara con la aproximación WKB para mostrar que todo medio inhomogéneo es equivalente a un medio estratificado. Esto es una posible solución al problema de usar un sustrato estratificado como modelo para las aproximaciones por elipsometría.
- Método de reflexiones múltiples. En este método se construye la matriz de transferencia a partir de expresar las ecuaciones de Fresnel de forma matricial. El formalismo no necesita ninguna modificación al estudiar índices de refracción complejo.
- Método de ondas viajeras. En este método se asume que la solución a las ecuaciones de onda es la superposición de dos ondas planas, una viajando a la izquierda y otra a la derecha.

Para cada técnica se muestra cómo obtener los coeficientes de transmitancia y reflectancia. Esto con la intención de mostrar las formas más comunes que se pueden encontrar en la literatura, en la que no siempre se explica cuál de ellas se ha empleado. Por último, la elección del método que se aplica en cada uno de los análisis empleados en este trabajo se ha hecho a partir de la facilidad operativa.

Dado que se puede considerar útil conocer el desarrollo de las propiedades de cada modelo, en el presente trabajo se desarrollan de forma explícita y en general.

## I.I Fundamentos del método de la matriz de transferencia.

Durante este proyecto, se estudiaron los efectos de arreglos fotónicos en el espectro visible. Dado que la longitud de onda del campo que se estudia es del orden de  $10^3$  veces la rugosidad de las interfases, se asumen que son planas [1], esa es una condición necesaria para la validez de los modelos.

La descripción más extendida en la literatura es la solución directa de las ecuaciones de Maxwell. La deducción siguiente se basa en el texto clásico de Born [2], que parte de las ecuaciones del campo electromagnético sin fuentes de corriente magnética:

$$\nabla \cdot \vec{D} = \rho \quad (1)$$

$$\nabla \cdot \vec{B} = 0 \quad (2)$$

$$\nabla \times \vec{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \quad (3)$$

$$\nabla \times \vec{H} = \frac{4\pi}{c} \vec{j} + \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} \quad (4)$$

$$\nabla \cdot \vec{j} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0 \quad (5)$$

A partir de las relaciones constitutivas, que dependen únicamente de la posición y la frecuencia angular:  $D(r, \omega) = \varepsilon(r, \omega)E(r, \omega)$ ,  $H(r, \omega) = \mu^{-1}(r, \omega)B$  y  $j(r, \omega) = \sigma(r, \omega)E(r, \omega)$ , y en ausencia de cargas libres y corrientes, se obtienen las relaciones:

$$\nabla \times \left( \frac{1}{\mu} \nabla \times \vec{E} \right) + \nabla \times \frac{\partial \vec{H}}{\partial t} = 0 \quad (6)$$

$$\nabla \times \left( \frac{1}{\mu} \nabla \times \vec{E} \right) + \frac{\varepsilon}{c^2} \ddot{\vec{E}} = 0 \quad (7)$$

Usando que  $\nabla \times u\mathbf{V} = u\nabla \times \mathbf{V} + (\nabla u) \times \mathbf{V}$  y  $\nabla \times \nabla \times = \nabla(\nabla \cdot) - \nabla^2$

$$\nabla^2 \vec{E} - \frac{\varepsilon\mu}{c^2} \ddot{\vec{E}} + (\nabla \log \mu) \times (\nabla \times \vec{E}) - \nabla(\vec{E} \cdot \nabla(\log \varepsilon)) = 0 \quad (8)$$

donde se usó  $\nabla \cdot \vec{D} = \varepsilon \nabla \cdot \vec{E} + \vec{E} \cdot \nabla \varepsilon = 0$ .

Por otro lado, si la solución es una función armónica, entonces se cumplen las siguientes relaciones:

$$\nabla \times \vec{E}(r) = i\omega \vec{B}(r) \quad (9)$$

$$\nabla \times \vec{H}(r) = -i\omega \vec{D}(r) + j(r) \quad (10)$$

Esas relaciones generales son válidas para el caso particular de un arreglo fotónico unidimensional, en el cual los materiales son isotrópicos excepto en una dirección o, en otras palabras, son arreglos donde la función dieléctrica únicamente depende de una variable espacial.

$$\varepsilon(\vec{r}) = \varepsilon(z), \quad \mu(\vec{r}) = \mu(z). \quad (11)$$

A partir de aquí se asumirá que la solución es una onda plana.

Se define el plano de polarización como el plano formado por el vector del campo eléctrico y el vector de propagación. Por lo tanto, en el vacío el plano de polarización de un haz linealmente polarizado es constante.

Cuando un haz de luz linealmente polarizado incide en la interfase plana de dos medios dieléctricos con distinto índice de refracción, se dice que la polarización es transversal eléctrica (*TE* o tipo s) si el plano de polarización y el plano de incidencia, formado por la normal a la interfase y el vector de propagación, son perpendiculares. En caso de que el plano de polarización sea paralelo al plano de incidencia, se tratará de polarización transversal magnética (*TM* o tipo p). Las polarizaciones *TE* y *TM* son independientes. Según esto y de las ecuaciones (9) y (10)

$$\vec{H} = \sqrt{\frac{\varepsilon}{\mu}} \vec{s} \wedge \vec{E} \quad y \quad \vec{E} = \sqrt{\frac{\mu}{\varepsilon}} \vec{s} \wedge \vec{H} \quad (12)$$

donde  $\vec{s}$  es la dirección de propagación. Esto implica que todas las propiedades deducidas para las ondas transversal-eléctricas son directamente aplicables a las ondas transversal-magnéticas cambiando  $\vec{E}$  por  $\vec{H}$  y  $\mu$  por  $\varepsilon$ .

En el sistema de referencia formado por la normal a la superficie,  $\hat{e}_z = \hat{n}$ , el vector en el plano de incidencia perpendicular a la normal de la interfase  $\hat{e}_y$  y el vector transversal  $\hat{e}_x$ : una onda *TE* tendrá componentes nulas  $E_z$  y  $E_y$ . Entonces, la componente  $x$  del campo eléctrico es descrita por una ecuación de segundo orden:

$$\nabla^2 \vec{E} - \frac{\varepsilon(z)\mu(z)}{c^2} \ddot{\vec{E}} + \nabla \ln \mu(z) \wedge (\nabla \wedge \vec{E}) + \nabla(\vec{E} \cdot \nabla \ln \varepsilon(z)) = 0 \quad (13)$$

es:

$$\partial_x^2 E_x + \partial_y^2 E_x + \partial_z^2 E_x - \frac{\varepsilon\mu}{c^2} \ddot{E}_x + \partial_y \log(\mu) \partial_y E_x - \partial_z \log(\mu) \partial_z E_x + \partial_x(E_x \partial_x \log \varepsilon) = 0 \quad (14)$$

$$\therefore \partial_y^2 E_x + \partial_z^2 E_x - n_0^2 k_0^2 \ddot{E}_x = \partial_z \log(\mu) \partial_z E_x \quad (15)$$

donde  $n_0 = \varepsilon\mu$ . Y se ocupó que  $\partial_x \varepsilon = 0$  y la ley de Gauss eléctrica para mostrar que  $\partial_x E_x = 0$ . La ecuación (15) es separable.

Si la constante de separación es  $k_0 \alpha$ , la solución para la componente en dirección  $\hat{e}_x$  es una onda:

$$E_x = U(z)e^{ik_0\alpha y}e^{i\omega t} \quad (16)$$

Por otro lado, de las ecuaciones de Maxwell que relacionan los rotacionales de los campos con las derivadas temporales de los mismos, en un medio sin fuentes, asumiendo una dependencia armónica con el tiempo y con las condiciones para ondas TE:

$$\begin{aligned} \partial_y E_x + \frac{\{i\omega\mu(z)\}}{c} H_z &= 0 & \partial_x H_y - \partial_y H_x &= 0 \\ \partial_z E_x - \frac{\{i\omega\mu(z)\}}{c} H_y &= 0 & \partial_z H_x - \partial_x H_z &= 0 \\ \frac{\{i\omega\mu(z)\}}{c} H_x &= 0 & \partial_y H_z - \partial_z H_y + \frac{\{i\varepsilon(z)\omega\}}{c} E_x &= 0 \end{aligned} \quad (17)$$

De la ecuación para  $E_x$  (16), las relaciones anteriores y proponiendo dos funciones  $W(z)$  y  $V(z)$  tales que:

$$H_z = W(z)e^{i(k_0\alpha y - \omega t)} \quad (18)$$

$$H_y = V(z)e^{i(k_0\alpha y - \omega t)} \quad (19)$$

Se obtienen las siguientes relaciones para las amplitudes en  $z$ .

$$U'(z) = ik_0\mu(z)V(z) \quad (20)$$

$$V'(z) = ik_0(\alpha W(z) + \varepsilon(z)U(z)) \quad (21)$$

$$\alpha U(z) + \mu(z)W(z) = 0 \quad (22)$$

donde  $U'$  denota derivada respecto a  $z$ . Por lo tanto sustituyendo (22) en (21)

$$V'(z) = ik_0 \left( \varepsilon(z) - \frac{\alpha^2}{\mu(z)} \right) U(z) \quad (23)$$

Si  $\alpha = 0$ , la incidencia es normal, la componente en dirección  $\hat{e}_z$  del campo magnético (22) es nula y la ecuación diferencial acoplada tiene como única diferencia los factores de permitividad y permeabilidad.

De las ecuaciones (21) y (23), se obtiene una ecuación de onda acoplada de segundo orden para las amplitudes:

$$\frac{d^2 U}{dz^2} - \frac{d(\log \mu(z))}{dz} \frac{dU}{dz} + k_0^2(n^2 - \alpha^2)U = 0 \quad (24)$$

$$\frac{d^2V}{dz^2} - \frac{d \left[ \log \left( \varepsilon(z) - \frac{\alpha^2}{\mu(z)} \right) \right]}{dz} \frac{dV}{dz} + k_0^2(n^2 - \alpha^2)V = 0 \quad (25)$$

Nuevamente las ecuaciones para ondas *TM* tendrán la misma forma, haciendo las sustituciones  $\mu$  por  $\varepsilon$  y  $E_i$  por  $H_i$ .

La función  $U(z)$  tiene en general una solución compleja ( $U(z) = |U(z)|e^{i\phi(z)}$ ), donde las superficies de amplitud constante  $|E_x|$  no son las superficies de fase constante  $\phi(z) + k_0\alpha y = \text{constante}$ . En ese caso un desplazamiento sobre la superficie de fase constante cumple:

$$\phi'(z)dz + k_0\alpha dy = 0 \quad (26)$$

En una onda plana  $\phi(z) = k_0nz \cos\theta$ , donde  $\theta$  es el ángulo entre la normal a la superficie de fase constante con el vector  $\hat{e}_z$ . Sustituyendo la fase en la ecuación anterior y tomando en cuenta que:

$$\tan \theta = -\frac{dz}{dy} \Rightarrow \alpha = n \sin\theta \quad (27)$$

Recuperando la ley de Snell, para  $\alpha$  contante. Esto es importante, ya que el análisis siguiente solo será aproximadamente *valido si la parte imaginaria del índice de refracción puede ser despreciada*. En ese caso, la solución para una ecuación de segundo orden se construye sumando dos funciones linealmente independientes que cumplen:

$$U'_{1,2} = ik_0\mu V_{1,2} \quad (28)$$

$$V'_{1,2} = ik_0 \left( \varepsilon - \frac{\alpha^2}{\mu} \right) U_{1,2} \quad (29)$$

De las ecuaciones (28) y (29):

$$\frac{d}{dz}(U_1V_2 - U_2V_1) = 0 \quad (30)$$

Por lo tanto, la matriz cuyos elementos son las soluciones de las funciones tiene determinante constante:

$$\begin{vmatrix} U_1 & V_1 \\ U_2 & V_2 \end{vmatrix} = D_0 = cte = \begin{vmatrix} U_1 & U'_1 \\ U_2 & U'_2 \end{vmatrix} \begin{pmatrix} -i \\ \frac{-i}{k\mu} \end{pmatrix} \quad (31)$$

Note que el determinante puede extraer factores constantes de una columna, lo que nos permite establecer  $D_0 = 1$ , esta propiedad es muy empleada en la literatura como una restricción del sistema de soluciones. Usando la relación (31) las soluciones forman un sistema de ecuaciones invariante, que cumple:

$$\text{Wronskiano} = D_0 \quad (32)$$

$$(U_1U'_2 - U'_1U_2) \frac{-i}{k\mu} = D_0\mu \Rightarrow \frac{(U_1U'_2 - U'_1U_2) \frac{-i}{k}}{U_1^2} = \frac{\mu}{U_1^2} \quad (33)$$

$$\frac{d}{dz} \frac{U_2}{U_1} \frac{-i}{k} = \frac{\mu D_0}{U_1^2}$$

Por lo tanto, las soluciones cumplen con la relación  $U_2 = ikD'_0 U_1 \int \left(\frac{\mu}{U_1^2}\right) dz$  [3]. En particular para dos parejas de soluciones:

$$\begin{aligned} U_1 &= f(z), & U_2 &= F(z) \\ V_1 &= g(z), & V_2 &= G(z) \end{aligned} \quad (34)$$

$$f(0) = G(0) = 0 \text{ y } F(0) = g(0) = 1 \quad (35)$$

Por lo que, si las condiciones iniciales para el problema son  $U(0) = U_0$ ,  $V(0) = V_0$ , entonces las soluciones se obtienen al multiplicar las condiciones iniciales por una matriz unimodular.

$$\begin{pmatrix} U(z) \\ V(z) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} F(z) & f(z) \\ G(z) & g(z) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_0 \\ V_0 \end{pmatrix} \quad (36)$$

O de forma equivalente:

$$\begin{pmatrix} U_0 \\ V_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} g(z) & -f(z) \\ -G(z) & F(z) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U \\ V \end{pmatrix} \quad (37)$$

donde se usó (31). Tomando en cuenta que el determinante es constante:

$$\begin{vmatrix} g(z) & -f(z) \\ -G(z) & F(z) \end{vmatrix} = |M| = 1 = D_0 \quad (38)$$

La matriz  $M$  relaciona las componentes de los campos en un plano  $z = 0$  con un plano  $z$  constante. Para ondas  $TE$ ,  $M$  relaciona a  $E_x$  y  $H_y$ , mientras que para ondas  $TM$ ,  $M$  relaciona las componentes  $H_x$  y  $H_y$ . Esta posibilidad de relacionar ondas  $TM$  o  $TE$  con una matriz de transferencia resulta de la proporcionalidad de las componentes  $\hat{e}_z$  con a las componentes  $\hat{e}_x$ .

Las soluciones generales para las ecuaciones  $U$  y  $V$  son soluciones de Riccati. Para mostrarlo basta con derivar la razón entre las funciones:

$$\frac{dR}{dz} = \frac{d}{dz} \left( \frac{U}{V} \right) = \frac{U'}{V} - \frac{U}{V^2} V' = \frac{U'}{V} - \frac{R^2 V'}{U} = ik \left[ \left( \varepsilon - \frac{\alpha^2}{\mu} \right) R^2 - \mu \right] \quad (39)$$

donde se usaron las relaciones (20) y (23). Por otro lado.

$$\frac{V'}{V} = -ik \left( \varepsilon - \frac{\alpha^2}{\mu} \right) \frac{U}{V} = ik \left( \varepsilon - \frac{\alpha^2}{\mu} \right) R \quad (40)$$

$$V(z) = V_0 e^{-ik \int_{z_0}^z \left( \varepsilon - \frac{\alpha^2}{\mu} \right) R(z) dz} \quad (41)$$

$$U(z) = R(z)V(z) \quad (42)$$

Para conocer el comportamiento de una onda monocromática en un medio estratificado basta con conocer los elementos de la matriz  $M$ , donde  $M$  es la matriz característica.

## I.II Soluciones a la ecuación del campo eléctrico

### I.II.i Método iterativo:

Para resolver el campo eléctrico de la ecuación (24), se factoriza la permeabilidad  $\mu$ , llegando a la expresión:

$$\frac{d}{dz} \left( \frac{U'}{\mu} \right) - k^2 \left( \varepsilon - \frac{\alpha^2}{\mu} \right) U = 0 \quad (43)$$

Que se resuelve analíticamente al asumir como solución una función de la forma

$$U_i = \sum_{n=0}^{\infty} k^{2n} U_{in} \quad (44)$$

para  $i=1,2$ .

La solución debe cumplir con la condición de determinante constante y en particular evaluado en  $z = 0$ . Entonces si  $U_1(0) = 1$ ,  $U_1'(0) = 0$ ,  $U_2(0) = 0$ ,  $U_2'(0) = -ik\mu$ , en el tiempo 0:

$$\frac{d}{dz} \left( \frac{U_{i,0}}{\mu} \right) = 0 \quad (45)$$

$$\frac{d}{dz} \left( \frac{U_{i,n}}{\mu} \right) = - \left( \varepsilon - \frac{\alpha^2}{\mu} \right) U_{i,n-1} \quad (46)$$

Por lo tanto:

$$U_{1,0} = 1 \quad (47)$$

$$U_{1,1} = - \int_0^z \mu \left[ \int_0^z \left( \varepsilon - \frac{\alpha^2}{\mu} \right) dz \right] dz \quad (48)$$

$$U_{1,n} = - \int_0^z \mu \left[ \int_0^z \left( \varepsilon - \frac{\alpha^2}{\mu} \right) dz \right] U_{1,n-1} dz \quad (49)$$

$$U_{2,0} = -ik \int_0^z \mu dz \quad (50)$$

$$U_{2,n} = \int_0^z \mu \left[ \int_0^z \left( \varepsilon - \frac{\alpha^2}{\mu} \right) U_{2,n-z} dz \right] dz \quad (51)$$

La ecuación  $U_2$  es una función imaginaria, siempre que, tanto la permeabilidad como la permitividad sean reales o, en otras palabras, se trata de un medio no absorbente. En ese caso se define:

$$iU_2 = \sum_{n=0}^{\infty} k^{2n} U_{i2} \quad (52)$$

Ya que el determinante de la matriz de transferencia es constante:

$$M = \begin{pmatrix} -\frac{U'_2}{k\mu} & -iU_2 \\ -\frac{iU'_1}{k\mu} & U_1 \end{pmatrix} \quad (53)$$

Si los elementos de la diagonal son reales y los elementos fuera de la diagonal son puramente imaginarios se trata de la matriz característica de un medio no absorbente.

Considerando los primeros dos términos de las series, en un medio donde la longitud de onda es mayor al camino óptico, y recordando que  $\varepsilon - \frac{\alpha^2}{\mu} = n^2 \cos^2 \theta_i$ , la matriz resultante es:

$$M = \begin{bmatrix} 1 - k^2 \int_0^z \left( \mu \varepsilon \cos^2 \theta_i \int_0^z \mu dz \right) dz & ik \int_0^z \mu dz \\ ik \int_0^z \mu \varepsilon \cos^2 \theta_i dz & 1 - k^2 \int_0^z \left( \mu \int_0^z \mu \varepsilon \cos^2 \theta_i dz \right) dz \end{bmatrix} \quad (54)$$

Note que la matriz  $M$ , despreciando los términos de orden superior, tiene determinante igual a uno. De la matriz anterior, como se mostrará más adelante, se pueden calcular los coeficientes de transmitancia y reflectancia (55) y (56). Para mayor detalle se puede consultar el artículo clásico en el que se basa este desarrollo [3].

$$r = \frac{R}{I_0} = \frac{\sqrt{\frac{\varepsilon_0}{\mu_0}} \cos \theta_0 \left( M_{11} + \sqrt{\frac{\varepsilon_1}{\mu_1}} \cos \theta_1 M_{12} \right) - \left( M_{21} + \sqrt{\frac{\varepsilon_1}{\mu_1}} \cos \theta_1 M_{22} \right)}{\sqrt{\frac{\varepsilon_0}{\mu_0}} \cos \theta_0 \left( M_{11} + \sqrt{\frac{\varepsilon_1}{\mu_1}} \cos \theta_1 M_{12} \right) + \left( M_{21} + \sqrt{\frac{\varepsilon_1}{\mu_1}} \cos \theta_1 M_{22} \right)} \quad (55)$$

$$t = \frac{T}{I_0} = \frac{2 \sqrt{\frac{\varepsilon_0}{\mu_0}} \cos \theta_0}{\sqrt{\frac{\varepsilon_0}{\mu_0}} \cos \theta_0 \left( M_{11} + \sqrt{\frac{\varepsilon_1}{\mu_1}} \cos \theta_1 M_{12} \right) + \left( M_{21} + \sqrt{\frac{\varepsilon_1}{\mu_1}} \cos \theta_1 M_{22} \right)} \quad (56)$$

### I.II.ii Aproximación WKB:

El método WKB es una aproximación válida para una variación de la constante de permeabilidad lenta.

Resolviendo la ecuación (43) para ondas  $TE$  [4, 5] empleando el cambio de variable  $U = K(\xi)\bar{U}$ ,  
 $\xi = \vec{k} \int^z \sqrt{\varepsilon\mu - \alpha^2} dz$  y  
 $K = \frac{\mu}{\sqrt{\varepsilon\mu - \alpha^2}}$ :

$$U = U_0 \frac{\sqrt{\mu}}{\sqrt[4]{\varepsilon\mu - \alpha^2}} e^{\pm ik \int^z \sqrt{\varepsilon\mu - \alpha^2} dz} \quad (57)$$

donde  $k$  es el número de onda. En el caso de ondas planas propagándose en medios homogéneos con superficies planas, el argumento de la integral es simplemente el desplazamiento en la dirección  $\hat{e}_z$ ;  $\int^z \sqrt{\varepsilon\mu - \alpha^2} dz = (n^2 \cos^2 \theta_i) \int^z dz$ .

Note que las soluciones linealmente independientes seno y coseno tienen solución exacta cuando la función dentro de la raíz es constante o sus derivadas son despreciables. En caso contrario es una aproximación cuyo ajuste dependerá de su variación.

Usando en la expresión (53) con las soluciones seno y coseno y poniendo cuidado a las condiciones iniciales, es decir si:

$$K_0 = \frac{\mu(0)}{\sqrt{\varepsilon(0)\mu(0) - \alpha^2(0)}} \quad (58)$$

Entonces:

$$M = \begin{bmatrix} \sqrt{\frac{\varepsilon\mu - \alpha^2 K_0}{\mu}} \cos(\xi) & i \sqrt{\frac{K_0 \mu}{\varepsilon\mu - \alpha^2}} \sin(\xi) \\ i \sqrt{\frac{\varepsilon\mu - \alpha^2}{\mu K_0}} \sin(\xi) & \sqrt{\frac{\mu}{\varepsilon\mu - \alpha^2 K_0}} \cos(\xi) \end{bmatrix} \quad (59)$$

Para el caso de propagación de una onda plana en un medio continuo  $\alpha = n \sin \theta$ , entonces, las ecuaciones para las ecuaciones  $U$  y  $V$  (24) son:

$$\frac{d^2 U}{dz^2} + (k_0^2 n^2 \cos^2 \theta) U = \frac{d^2 V}{dz^2} + (k_0^2 n^2 \cos^2 \theta) V = 0 \quad (60)$$

Ocupando la relación entre las primeras derivadas y las funciones originales para  $U$  y  $V$ , se tienen las siguientes soluciones:

$$U(z) = A \cos(k_0 n \cos \theta) + B \sin(k_0 n \cos \theta) \quad (61)$$

$$V(z) = i \sqrt{\frac{\varepsilon}{\mu}} \cos \theta (-B \cos(k_0 n \cos \theta) + A \sin(k_0 n \cos \theta)) \quad (62)$$

Por lo tanto las funciones independientes  $U_{1,2}$  y  $V_{1,2}$  forman la matriz

$$M(z) = \begin{pmatrix} \cos(k_0 n z \cos \theta) & -\frac{i}{p} \sin(k_0 n z \cos \theta) \\ -ip \sin(k_0 n z \cos \theta) & \cos(k_0 n z \cos \theta) \end{pmatrix} \quad (63)$$

donde  $p$  dependerá de si es una onda  $TE$  o  $TM$

$$TE \quad p = \sqrt{\epsilon/\mu} \cos \theta \quad (64)$$

$$TM \quad p = \sqrt{\mu/\epsilon} \cos \theta \quad (65)$$

Los valores propios de la matriz  $M$  son:  $\lambda_{\pm} = \cos(k_0 n z \cos \theta) \pm \sin(k_0 n z \cos \theta)$

Y los vectores propios son:  $v_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{1+\frac{1}{p^2}}} \left( \pm \frac{i}{p}, 1 \right)$

En el caso de un arreglo en capas homogéneas  $M = \prod_i M_i$ , donde  $M_i$  es la matriz característica del  $i$ -ésimo sustrato. Cada matriz está descrita por los elementos:

$$m_{(i)11} = m_{(i)22} = \cos \beta_{(i)} \quad (66)$$

$$m_{12} = -\frac{i}{p_{(i)}} \sin \beta_{(i)} \quad (67)$$

$$m_{(i)21} = -ip_{(i)} \sin \beta_{(i)} \quad (68)$$

donde para ondas  $TE$ :

$$\beta_i = k_0 n_i z_i \cos \theta_i \quad (69)$$

$$p_i = \sqrt{\frac{\epsilon_i}{\mu_i}} \cos \theta_i \quad (70)$$

O para ondas  $TM$

$$p_i = \sqrt{\frac{\mu_i}{\epsilon_i}} \cos \theta_i \quad (71)$$

Sin embargo, la definición de  $p_i$  de las ecuaciones (69), (70) y (71), es válida cuando  $\alpha = n \sin(\theta)$ , en otro caso para ondas  $TE$ :

$$p_i = \frac{\sqrt{\epsilon_i \mu_i - \alpha^2}}{\mu_i} \quad (72)$$

y

$$\beta_i = k \sqrt{\epsilon_i \mu_i - \alpha^2} \quad (73)$$

A segundo orden la matriz de una región homogénea es:

$$M_i = \begin{pmatrix} I - \frac{\beta_i^2}{2} & \frac{i\beta_i}{p_i} \\ i\beta_i p_i & I - \frac{\beta_i^2}{2} \end{pmatrix} \quad (74)$$

Una sucesión de capas tendrá a segundo orden la matriz asociada:

$$M = \begin{pmatrix} I - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\beta_n^2}{2} - \sum_{n=2}^{\infty} \beta_n p_n \left( \sum_{m=1}^{n-1} \frac{\beta_m}{p_m} \right) & i \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\beta_n}{p_n} \\ i \sum_{n=1}^{\infty} \beta_n p_n & I - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\beta_n^2}{2} - \sum_{n=2}^{\infty} \frac{\beta_m}{p_m} \left( \sum_{m=1}^{n-1} \beta_m p_m \right) \end{pmatrix} \quad (75)$$

En ese caso las sumas pueden ser cambiadas por integrales:

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{\beta_n}{2} \rightarrow \frac{k^2}{2} \int^z (\varepsilon\mu - \alpha^2) dz = 0 \quad (76)$$

$$\sum_{n=2}^{\infty} \beta_n p_n \left( \sum_{m=1}^{n-1} \frac{\beta_m}{p_m} \right) \rightarrow k^2 \int^z \left( \varepsilon(z') - \frac{\alpha^2}{\mu(z')} \right) \int^{z'} \mu(z'') dz'' dz' \quad (77)$$

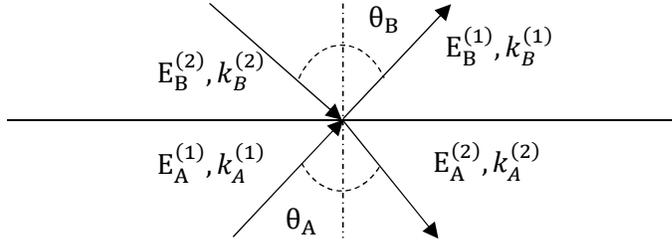
$$\sum_{n=2}^{\infty} \frac{\beta_m}{p_m} \left( \sum_{m=1}^{n-1} \beta_m p_m \right) \rightarrow k^2 \int^z \mu(z') \int^{z'} \left( \varepsilon(z'') - \frac{\alpha^2}{\mu(z'')} \right) dz'' dz' \quad (78)$$

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{\beta_n}{p_n} \rightarrow k \int^z \mu dz' \quad \sum_{n=1}^{\infty} \beta_n p_n \rightarrow \int^z \left( \varepsilon(z'') - \frac{\alpha^2}{\mu(z'')} \right) dz'' \quad (79)$$

Lo anterior implica que **un medio inhomogéneo se comporta de forma análoga a un medio estratificado**, ecuación (54), y las conclusiones de uno u otro sistema son equivalentes. La estratificación es una de las hipótesis del modelo de elipsometría, además de eso, hay reportes de una estratificación de la porosidad observable por micrografías de microscopía electrónica de barrido (SEM por sus siglas en inglés) en capas de silicio poroso [6, 7]. Otra propiedad importante para el modelo de elipsometría es la biaxialidad, para mayores referencias con respecto a la biaxialidad propia de los arreglos inhomogéneos, consultar [3]

### I.III Método de múltiples reflexiones

Este método construye la matriz de transferencia a partir de los coeficientes de Fresnel y al cambio de fase de las ondas al viajar por el medio. Éste método es de más fácil acceso en libros de multicapas y fuentes fiables de internet, por ejemplo, el texto de Pochi [8].



**Figura I-1** Diagrama de incidencia de una onda plana en la frontera de dos dieléctricos. Las condiciones de frontera dependerán de las funciones dieléctricas de los medios y de la polarización.

A partir del diagrama de la incidencia de un rayo de luz en la interfase de dos medios con índices de refracción  $n_A$  y  $n_B$ , *Figura I-1*, se observa que el campo se escribe como:

$$E = E_A^{(1)} \exp \left[ i \left( K_A^{(1)} \cdot x - \omega t \right) \right] + E_A^{(2)} \exp \left[ i \left( K_A^{(2)} \cdot x - \omega t \right) \right] \quad (80)$$

De las condiciones de frontera para ondas *TE*, que cumplen con la ley de Snell,  $\frac{\sin \theta_A}{\sin \theta_B} = \frac{n_B}{n_A}$ .

$$E_A^{(1)} + E_A^{(2)} = E_B^{(2)} + E_B^{(1)} \quad (81)$$

$$n_A \cos \theta_A \left( E_A^{(1)} - E_A^{(2)} \right) = n_B \cos \theta_B \left( E_B^{(1)} - E_B^{(2)} \right) \quad (82)$$

Al reescribir las condiciones de frontera en las partes par e impar del campo:

$$E_+ = E^{(1)} + E^{(2)}, \quad E_- = (E^{(1)} - E^{(2)})/i \quad (83)$$

Se deduce que la matriz de transferencia que relaciona el campo entre dos medios separados por una interfase plana, será el producto de dos matrices [8], las llamadas matriz de interfase o dinámica "*D*", ecuación (84), y la matriz de propagación "*P*", ecuación (85).

$$D_{TE} = \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ n_i \cos \theta_i & -n_i \cos \theta_i \end{pmatrix}, \quad D_{TM} = \begin{pmatrix} \cos \theta_i & \cos \theta_i \\ n_i & -n_i \end{pmatrix}, \quad (84)$$

$$P_{TE, TM} = \begin{pmatrix} e^{in_i k_0 \cos \theta_i} & 0 \\ 0 & e^{-in_i k_0 \cos \theta_i} \end{pmatrix} \quad (85)$$

A diferencia de las matrices vistas hasta ahora, no hace falta hacer ningún cambio a sus componentes para que sigan siendo válidas cuando los índices de refracción son complejos. Entonces, las matrices de interfase  $T_{12}$  y  $T_{21}$  serán el producto de las matrices dinámicas de cada interfase  $T_{12} = D_1^{-1} D_2$  [9], por lo tanto:

$$T_{12} = T_{AB} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \frac{n_A \cos \theta_A}{n_B \cos \theta_B} \end{pmatrix} \quad (86)$$

$$T_{21} = T_{21}^{-1} = T_{BA} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \frac{n_B \cos \theta_B}{n_A \cos \theta_A} \end{pmatrix} \quad (87)$$

Los coeficientes de reflectancia y transmitancia de la interfase se calculan como la razón entre la amplitud del rayo incidente y el reflejado (o transmitido según corresponda):

$$\begin{pmatrix} E_t \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_i \\ E_r \end{pmatrix} = D_1^{-1} D_2 P_2 \begin{pmatrix} E_i \\ E_r \end{pmatrix} \quad (88)$$

$$t = \frac{E_t}{E_i} = \frac{A_{11}A_{22} - A_{12}A_{21}}{A_{22}} \quad (89)$$

$$r = \frac{E_r}{E_i} = -\frac{A_{21}}{A_{22}} \quad (90)$$

Otra ventaja de esta notación es la facilidad con la que se calcula la intensidad relativa del campo eléctrico. En un punto arbitrario  $s$ , para una estructura de ancho  $h$  ( $s \leq h$ ), la relación entre los campos incidente, reflejado y transmitido está dada por:

$$\begin{pmatrix} A_{11}(s, h) & A_{12}(s, h) \\ A_{21}(s, h) & A_{22}(s, h) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E(s)_{derecha} \\ E(s)_{izquierda} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_t \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_i \\ E_r \end{pmatrix} \quad (91)$$

donde los términos  $(s, h)$  son los coeficientes calculados desde el punto  $s$  hasta el final de la estructura, o punto  $h$ , y los campos  $E(s)$  son los campos en el punto  $s$  que viajan a la izquierda o la derecha. Considerando que la onda incidente viaja de izquierda a derecha, entonces la intensidad de campo eléctrico es:

$$|\vec{E}|^2 = |E(s)_{izquierda}|^2 + |E(s)_{derecha}|^2 \quad (92)$$

$$|\vec{E}|^2 = \frac{A_{11}^2(s, h) + A_{21}^2(s, h)}{A_{11}^2} |E_i|^2 \quad (93)$$

El campo eléctrico dentro del dieléctrico depende directamente de las condiciones de frontera.

#### I.IV Método de ondas planas

En el siguiente método los coeficientes de la matriz de transferencia se deducen de considerar el cambio de amplitud de ondas propagándose en un medio formado por múltiples capas, donde la  $n$ -ésima interfase está en una posición denotada como  $z_n$ . Asumiendo que el campo es la suma de ondas planas viajando en el medio  $z_n$  y  $z_{n+1}$ , entonces, se puede describir el campo eléctrico como:

$$\psi_n = \alpha_n e^{ik_n z} + \beta_n e^{-ik_n z} \quad (94)$$

En la interfase, tanto la función como su derivada son continuas. Por lo tanto, en  $z = z_n$  se cumple que  $\psi_{n-1}|_{z_n} = \psi_n|_{z_n}$  y  $\frac{d\psi_{n-1}}{dz}|_{z_n} = \frac{d\psi_n}{dz}|_{z_n}$ . Esas condiciones implican que:

$$\alpha_{n-1} e^{ik_{(n-1)}z_n} + \beta_{n-1} e^{-ik_{(n-1)}z_n} = \alpha_n e^{ik_n z_n} + \beta_n e^{-ik_n z_n} \quad (95)$$

$$k_{(n-1)} (\alpha_{n-1} e^{ik_{(n-1)}z_n} + \beta_{n-1} e^{-ik_{(n-1)}z_n}) = k_n (\alpha_n e^{ik_n z_n} + \beta_n e^{-ik_n z_n})$$

La matriz de transferencia en ese caso será [10]:

$$\begin{pmatrix} \alpha_n \\ \beta_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \left(1 + \frac{k_{n-1}}{k_n}\right) e^{i(k_{n-1}-k_n)z_n} & \frac{1}{2} \left(1 - \frac{k_{n-1}}{k_n}\right) e^{i(k_{n-1}+k_n)z_n} \\ \frac{1}{2} \left(1 - \frac{k_{n-1}}{k_n}\right) e^{i(k_{n-1}+k_n)z_n} & \frac{1}{2} \left(1 + \frac{k_{n-1}}{k_n}\right) e^{-i(k_{n-1}-k_n)z_n} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_{n-1} \\ \beta_{n-1} \end{pmatrix} \quad (96)$$

Esta matriz cumple que:

$$\det A_n = \frac{k_{(n-1)}}{k_n} \quad (97)$$

El determinante de una estructura será el determinante del producto de los determinantes de las matrices que componen el medio, por lo tanto, si va de un medio "a" a un medio "b":

$$\det A = \frac{q_a}{q_b} \quad (98)$$

### I.V Reflexión y transmisión de ondas planas .

Como se ha mostrado, existen muchos más métodos de matriz de transferencia, que operan de forma diferente y si bien son equivalentes no se pueden mezclar entre ellos. En general se elige el que más convenga para resolver el problema que se enfrente. Por ahora no se expondrán más métodos, en cambio, se calcularán los coeficientes de reflexión y transmisión conociendo los elementos de la matriz de transferencia.

Considerando la solución del campo electromagnético, en el sistema de referencia del plano de incidencia, para una onda plana tipo TE, que incide en un medio estratificado de ancho  $z_i$ , con una dirección de propagación  $\hat{s}_i = (0, \sin \theta_i, \cos \theta_i)$ . En esas condiciones, el campo eléctrico transversal es  $\vec{E}_t = (E_x, 0, 0)$  y el campo magnético asociado es  $\vec{H} = \sqrt{\frac{\epsilon}{\mu}} \hat{s} \wedge \vec{E}$ . Entonces, dado que las componentes tangenciales de los campos son continuas [11]:

$$E_{\text{incidente}} + E_{\text{reflejado}} = E_{\text{transmitido}} \quad (99)$$

$$U_0 = R + I_0 \quad (100)$$

$$U(z_i) = T \quad (101)$$

Usando la relación entre los campos magnético y eléctrico de una onda plana (12):

$$H_{\text{incidente}} + H_{\text{reflejado}} = H_{\text{transmitido}} \quad (102)$$

$$V_0 = \sqrt{\frac{\epsilon_0}{\mu_0}} \cos \theta_0 (R - I_0) \quad (103)$$

$$V(z_i) = \sqrt{\frac{\epsilon_{z_i}}{\mu_{z_i}}} \cos \theta_{z_i} T \quad (104)$$

donde  $I_0$  es la amplitud del rayo incidente,  $R$  es la amplitud del rayo reflejado y  $T$  la amplitud del rayo transmitido. Usando la relación de matriz de transferencia (37), que se usa en el resto de la sección a menos de que mencione lo contrario, en el punto  $z_i$ :

$$\begin{pmatrix} R + I_0 \\ \sqrt{\frac{\epsilon_0}{\mu_0}} \cos \theta_0 (I_0 - R) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} T \\ \sqrt{\frac{\epsilon_{z_i}}{\mu_{z_i}}} \cos \theta_{z_i} (T) \end{pmatrix} \quad (105)$$

En ese caso la reflectancia, la transmitancia y la intensidad del campo eléctrico son:

$$r = \frac{R}{I_0} = \frac{\sqrt{\frac{\epsilon_0}{\mu_0}} \cos \theta_0 (M_{11} + \sqrt{\frac{\epsilon_1}{\mu_1}} \cos \theta_1 M_{12}) - (M_{21} + \sqrt{\frac{\epsilon_1}{\mu_1}} \cos \theta_1 M_{22})}{\sqrt{\frac{\epsilon_0}{\mu_0}} \cos \theta_0 (M_{11} + \sqrt{\frac{\epsilon_1}{\mu_1}} \cos \theta_1 M_{12}) + (M_{21} + \sqrt{\frac{\epsilon_1}{\mu_1}} \cos \theta_1 M_{22})} \quad (106)$$

$$t = \frac{T}{I_0} = \frac{2 \sqrt{\frac{\epsilon_0}{\mu_0}} \cos \theta_0}{\sqrt{\frac{\epsilon_0}{\mu_0}} \cos \theta_0 (M_{11} + \sqrt{\frac{\epsilon_1}{\mu_1}} \cos \theta_1 M_{12}) + (M_{21} + \sqrt{\frac{\epsilon_1}{\mu_1}} \cos \theta_1 M_{22})} \quad (107)$$

$$|\vec{E}|^2 = \left( (M_{11}(s, h) + M_{21}(s, h) n_3 \cos \theta_3)^2 + \frac{(M_{21}(s, h) + M_{22}(s, h) n_3 \cos \theta_3)^2}{n_2 \cos \theta_2} \right) * \quad (108)$$

$$\left( \frac{2 n_0 \cos \theta_0 E_i}{n_0 \cos \theta_0 (M_{11} + M_{21} n_3 \cos \theta_3) + (M_{21} + M_{22} n_3 \cos \theta_3)} \right)^2$$

$$(109)$$

$$r = \frac{\sqrt{\frac{\varepsilon_0}{\mu_0}} U_2' + k\mu_{z_i} \sqrt{\frac{\varepsilon_{z_i}}{\mu_{z_i}}} U_1 - i \left( U_1' - k\mu_{z_i} \sqrt{\frac{\varepsilon_0 \varepsilon_{z_i}}{\mu_0 \mu_{z_i}}} U_2 \right)}{\sqrt{\frac{\varepsilon_0}{\mu_0}} U_2 - k\mu_{z_i} \sqrt{\frac{\varepsilon_{z_i}}{\mu_{z_i}}} U_1 + i \left( U_1' + k\mu_{z_i} \sqrt{\frac{\varepsilon_0 \varepsilon_{z_i}}{\mu_0 \mu_{z_i}}} U_2 \right)}$$

En general, los coeficientes están en función de las “admitancias” de la  $n$ -ésima región  $\varepsilon_{z_n}$  (que es constante entre interfases), del medio de incidencia ( $\varepsilon_0$ ), del medio de transmisión ( $\varepsilon_1$ ), y los elementos de la matriz característica. Por lo tanto, los coeficientes de transmisión y reflexión de flujo de campo eléctrico, descritos por el vector de Pointing son:

$$\mathcal{R} = |r|^2, \quad \mathcal{T} = \sqrt{\frac{\mu_0 \varepsilon_1 \cos \theta_1}{\mu_1 \varepsilon_0 \cos \theta_0}} |t|^2 \quad (110)$$

Para ondas *TM*:

$$\mathcal{R} = |r|^2, \quad \mathcal{T} = \sqrt{\frac{\mu_1 \varepsilon_0 \cos \theta_1}{\mu_0 \varepsilon_1 \cos \theta_0}} |t|^2 \quad (111)$$

Usando la relación entre el campo transmitido y reflejado:

$$\mathcal{R} + \mathcal{T} = |r|^2 + \frac{p_1}{p_0} |t|^2 = 1 \quad (112)$$

donde:

$$p_i = n_i \cos \theta_i \quad (113)$$

Por ejemplo, usando (107), el coeficiente de flujo de campo es:

$$t = \frac{T}{I_0} = \frac{4 \sqrt{\frac{\varepsilon_0 \varepsilon_1}{\mu_0 \mu_1}} \cos \theta_0 \cos \theta_1}{\left| \sqrt{\frac{\varepsilon_0}{\mu_0}} \cos \theta_0 (M_{11} + \sqrt{\frac{\varepsilon_1}{\mu_1}} \cos \theta_1 M_{12}) + (M_{21} + \sqrt{\frac{\varepsilon_1}{\mu_1}} \cos \theta_1 M_{22}) \right|^2} \quad (114)$$

Para un medio con variación homogénea de la permitividad eléctrica, a partir de la ecuación (55) y sus cambios de variable (59) y con la ecuación (106), el coeficiente de reflectancia es:

$$r = \frac{\left( \left( \sqrt{\frac{\varepsilon_0}{\mu_0}} \cos \theta_0 \sqrt{\frac{K_0}{K_{z_0}}} - \sqrt{\frac{\varepsilon_1}{\mu_1}} \cos \theta_1 \sqrt{\frac{K_{z_0}}{K_0}} \right) \cos \xi + i \left( \sqrt{\frac{\varepsilon_0 \varepsilon_1}{\mu_0 \mu_1}} \sqrt{K_0 K_{z_0}} - \frac{1}{\sqrt{K_0 K_{z_0}}} \right) \sin \xi \right)}{\left( \sqrt{\frac{\varepsilon_0}{\mu_0}} \sqrt{\frac{K_0}{K_{z_0}}} \cos \theta_0 + \sqrt{\frac{\varepsilon_1}{\mu_1}} \sqrt{\frac{K_{z_0}}{K_0}} \cos \theta_2 \right) \cos \xi + i \left( \sqrt{\frac{\varepsilon_0 \varepsilon_1}{\mu_0 \mu_1}} \sqrt{K_0 K_{z_0}} + \frac{1}{\sqrt{K_0 K_{z_0}}} \right) \sin \xi} \quad (115)$$

las cantidades  $K_0$  y  $K_{z_0}$  dependen de las propiedades del medio homogéneo en las interfases o puntos  $z = 0$  y  $z = z_0$ , respectivamente.

## Bibliografía

- [1] D. E. Wiese, Phd tesis: "Diseño y aplicaciones de estructuras fotónicas de silicio poroso", IER Morelos: UNAM, 2019.
- [2] M. B. a. E. Wolf, Principles of optics, Electromagnetic theory of propagation, interference and diffraction of light., Great Britain: Pergamon Press, 1970.
- [3] F. Abeles, «Recherches su la propagation des ondes électromagnétiques sinusoidales dans les milieux stratifiés application aux couches minces,» *Ann. de Physique*, p. 777, 1950.
- [4] M. P. P. Closa, «The WKB Approximation: An application to the alpha decay,» Departamento de Física Fonamental., Barcelona, --.
- [5] S. A. Schelkunoff, «Solution of linear and slightly nonlinear differential equations,» *Quart. Appl. Math.* 3, Vols. %1 de %2Free Access: <http://www.ams.org/journals/qam/1946-03-04/>, pp. 336-347, 1946.
- [6] Y. Afandi, G. Parish y A. Keatin, «Compesatin porosity gradient to produce flat, micromachined porous silicon structures,» *Microporous an Mesoporous Materials*, nº 284, pp. 427-433, 2019.
- [7] Y. Afandi, G. Parish y A. Keating, «Study of Porosity Gradient in Released Porous Silicon Microstructures,» de *2018 Conference on Optoelectronic and Microelectronic Materiasl and Devices (COMMAD)*, IEEE, 2018.
- [8] Y. Pochi, Optical waves in layered media, J. Wiley & Sons, 1988.
- [9] M. Kohmoto, «Localization in Optics: Quasiperiodic Media,» *Physical Review Letters*, vol. 58, nº 23, pp. 2436-2437, 1987.
- [10] J. Lekner, Theory of Reflection, Reflection and transmission of electromagnetic particle and acoustic waves, Switzerland: Springer International Publising., 2016.
- [11] E. Hecht, Optica, Tercera edición ed., Madrid: Addison Wesley, 2000.

## Capítulo II.

### Análisis de estructuras fotónicas usando la matriz de transferencia

#### Resumen

Una vez desarrollada la herramienta básica para el análisis de los arreglos multicapas, en esta sección se estudian las propiedades de los arreglos y las relaciones entre los coeficientes que conforman la matriz de transferencia.

Entre las propiedades de mayor interés para este trabajo están: las brechas fotónicas, las densidades de estados, las propiedades de los defectos tipo “micro cavidad”, las regiones de localización de campo y alta transmitancia.

Esas propiedades se calculan a partir de los coeficientes de la matriz de transferencia de capas simples y la propiedad de determinante constante. Por esa razón primero se calculan los coeficientes de reflexión y transmisión para una película simple, seguido de los mismos coeficientes para un arreglo completamente ordenado, o cristal fotónico tipo Bragg, como se le conoce en la literatura.

A partir de ahí se deducen la función de dispersión, las longitudes de onda de los bordes de las brechas fotónicas, las propiedades de las brechas en función de la conmensurabilidad de las capas que conforman el arreglo, las diferencias entre las brechas y estados permitidos para ondas TE y TM, la relación de reciprocidad, las fases de los coeficientes de reflexión y transmisión, las densidades de estados, se generaliza el concepto de microcavidad eliminando la condición de simetría y otras propiedades interesantes para el estudio de la fotónica.

Se estudian también propiedades de arreglos no cristalinos, los arreglos de Fibonacci. Los arreglos de Fibonacci son arreglos multicapas con una simetría de largo alcance o cuasi cristalina, que se logra a partir de una regla de superposición simple. Se calculan sus propiedades: densidades de estados y espectros de reflectancia. Ambas propiedades son esenciales para modificar y entender el fenómeno de separación de Rabi en arreglos de Fibonacci con simetría conjugada.

Debe destacarse el antecedente de los trabajos de M. Maksimovic [1], donde estudia la separación del modo localizado simple de una microcavidad en un modo múltiple, y de Mher G [2] que trata de explicar el comportamiento de los cuasi cristales en una dimensión a partir de los efectos de separación de modos en microcavidades.

Por último, se revisa brevemente el efecto Purcell, que origina el cambio de tiempo de vida media en la luminiscencia en regiones con diferente densidad de estados, que forma parte de las evidencias más confiables de la inmersión de partículas luminiscentes en un arreglo fotónico.

## II.1 Solución de una película simple.

Los coeficientes de reflectancia y la transmitancia de una capa homogénea se calculan a partir de los coeficientes de Fresnel en el sistema de referencia del plano de incidencia.

Suponiendo que no hay fuentes, es decir, la carga libre es nula y no hay corrientes inducidas por el campo eléctrico, entonces las componentes tangenciales del campo eléctrico y magnético son continuas. En ese caso, para las ondas transversal eléctricas:

$$E_x^i = E_x^r + E_x^t \quad (1)$$

$$E_y^i = E_y^r = E_y^t = 0 \quad (2)$$

$$H_x^i = H_x^r = H_x^t = 0 \quad (3)$$

$$n_i \cos \theta_i E_x^i = n_i \cos \theta_r E_x^r + n_t \cos \theta_t E_x^t \quad (4)$$

donde los índices  $r, t, i$  son la amplitud de la onda reflejada, transmitida e incidente respectivamente. Tomando en cuenta que  $\cos \theta_r = -\cos \theta_i$ :

$$E_x^r = \frac{n_i \cos \theta_i - n_t \cos \theta_t}{n_i \cos \theta_i + n_t \cos \theta_t} E_x^i \quad (5)$$

$$E_x^t = \frac{2n_i \cos \theta_i}{n_i \cos \theta_i + n_t \cos \theta_t} E_x^i \quad (6)$$

(5) y (6) son los coeficientes de Fresnel. Entonces, los coeficientes de reflexión y de transmisión para una interfase con índices de refracción  $n_1$  y  $n_2$  son:

$$r_{ij} = \frac{p_i - p_j}{p_i + p_j} \quad (7)$$

$$t_{ij} = \frac{2p_i}{p_i + p_j} \quad (8)$$

Donde  $p_x = n_x \cos \theta_x$ .

Considerando una onda  $TE$ , que viaja de un medio 1 a través de un medio 2 hasta un medio 3, de la matriz característica del medio homogéneo, ecuación (61) capítulo 1, se tiene:

$$m_{11} = m_{22} = \cos \beta \quad (9)$$

$$m_{12} = -\frac{i}{p_2} \sin \beta \quad (10)$$

$$m_{21} = -ip_2 \sin \beta \quad (11)$$

donde:

$$\beta = k_0 n_2 h \cos \theta_2 \quad (12)$$

Sustituyendo en la ecuación para la transmitancia, ecuación (105) capítulo 1:

$$t = \frac{2p_1}{\left(\cos \beta - \frac{i}{p_2} \sin \beta p_3\right) + (-ip_2 \sin \beta + \cos \beta p_3)} = \frac{2p_1}{f(p_i)} \quad (13)$$

Sumando valores nulos para reducir la expresión y escribiendo sólo las iniciales de las funciones trigonométricas para hacer más compacta la notación ( $\cos \beta = c$  y  $\sin \beta = s$ ):

$$f(p_i) * p_2 = c(p_1 p_2 + p_3 p_2) - is(p_3 p_1 - p_2^2) + is(p_1 p_2 + p_3 p_2 - p_3 p_1 - p_2^2) - is(p_1 p_2 + p_3 p_2 - p_3 p_1 - p_2^2) + c(p_1 p_2 + p_3 p_2 + p_3 p_1 + p_2^2) - c(p_1 p_2 + p_3 p_2 + p_3 p_1 + p_2^2)$$

$$f(p_i) * p_2 = e^{-i\beta} (p_1 + p_2)(p_3 + p_2) + e^{i\beta} (p_1 - p_2)(p_2 - p_3) - f(p_i) * p_2 \quad (14)$$

Sustituyendo (14) en (13) y en esta expresión los coeficientes de transmisión (8) y reflexión (7), se obtiene para la transmitancia:

$$t = \frac{t_{12} t_{23} e^{i\beta}}{1 + r_{12} r_{23} e^{2i\beta}} \quad (15)$$

De forma similar, se puede deducir la relación para la reflectancia.

$$r = \frac{r_{12} + r_{23} e^{2i\beta}}{1 + r_{12} r_{23} e^{2i\beta}} \quad (16)$$

(15) y (16) son las ecuaciones de Airy, usualmente obtenidas a partir de suponer que una onda plana es reflejada múltiples veces en una interfase y la onda final es la superposición de ondas donde el camino óptico total en el medio central es  $2\beta$  [3].

En cuanto a la reflectancia, es el cuadrado de la norma de un número complejo, es decir la norma de (16):

$$\mathcal{R} = |r|^2 = \frac{r_{12}^2 + r_{23}^2 + 2r_{12} r_{23} \cos(2\beta)}{1 + r_{12}^2 r_{23}^2 + 2r_{12} r_{23} \cos(2\beta)} \quad (17)$$

$$\mathcal{T} = \frac{t_{12}^2 t_{23}^2}{1 + r_{12}^2 r_{23}^2 + 2r_{12} r_{23} \cos(2\beta)} \frac{n_3 \cos \theta_3}{n_1 \cos \theta_1} \quad (18)$$

La reflectancia entonces tiene máximos y mínimos que pueden ser localizados con la derivada de (17), que está modulada por  $\sin(2\beta)$ . Las películas con camino óptico  $m * \pi$ , donde  $m$  es un número

entero, tendrán un máximo o mínimo de reflectancia. Entonces  $h = \frac{m\lambda_0 n_2}{4 \cos \theta_2}$ , o en incidencia normal  $h = \frac{n_i \lambda_0}{4}$ , es la condición de máxima o mínima reflectancia frecuentemente ocupada en los arreglos fotónicos.

Cuando  $m$  es impar  $\cos 2\beta = -1$  y cuando  $m$  es par  $\cos 2\beta = 1$ , por lo que la reflectancia será:

$$\mathcal{R}_{m \text{ impar}} = \left( \frac{r_{12} - r_{23}}{1 - r_{12}r_{23}} \right)^2; \quad \mathcal{R}_{m \text{ par}} = \left( \frac{r_{12} + r_{23}}{1 + r_{12}r_{23}} \right)^2 \quad (19)$$

En incidencia normal:

$$\mathcal{R}_{m \text{ impar}} = \left( \frac{n_1 n_3 - n_2^2}{n_1 n_3 + n_2^2} \right)^2; \quad \mathcal{R}_{m \text{ par}} = \left( \frac{n_1 - n_3}{n_1 + n_3} \right)^2 \quad (20)$$

Para el caso impar, si  $n_2 = \sqrt{n_1 n_3}$  entonces  $\mathcal{R} = 0$ ; para el caso par, la reflectancia (y por lo tanto la transmitancia por conservación de la energía) no depende explícitamente del índice de refracción del medio 2 si  $h = \frac{m\lambda_0}{2 \cos \theta_2}$ , aunque el espesor está en función del ángulo transmitido al medio 2.

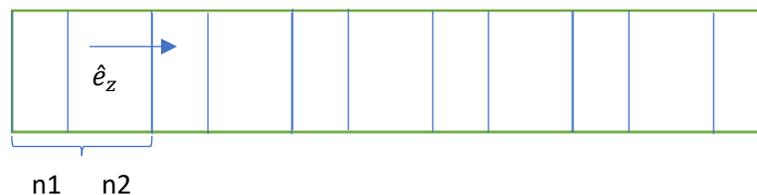
Asimismo, note una característica importante de la reflexión, mientras mayor sea el contraste de los índices de refracción  $n_2$  y  $n_3$ , mayor será la reflectancia máxima de la capa simple. La segunda derivada para incidencia normal implica que habrá un máximo de reflectancia cuando

$$\frac{d^2 \mathcal{R}}{dH^2} < 0 \Rightarrow (-1)^m (r_{12} r_{13}) (1 + r_{23}^2 r_{12}^2 - r_{12}^2 - r_{23}^2) < 0 \Rightarrow n_2 > n_3 \quad (21)$$

La última relación es resultado de la expresión explícita para  $r_{12} * r_{13}$ .

## II.II Solución de arreglos multicapas periódicos.

Cuando se estudian las ondas asociadas a los electrones en materiales cristalinos, se suele usar un potencial periódico, en función de las coordenadas espaciales [4]. Para el caso de un arreglo de capas de materiales dieléctricos, donde la constante dieléctrica depende únicamente de la variable  $z$ , que varía periódicamente, *Figura II-1*, la matriz de transferencia es el producto de las matrices características de bicapas que se repiten  $N$  veces.



**Figura II-1** Arreglo periódico de dos materiales dieléctricos con distinto índice de refracción  $n_i$  ( $i=1, \dots, \infty$ )

La matriz de transferencia  $M$  para ondas  $TE$  de un arreglo de dos capas, es el producto de las matrices  $M_a$  y  $M_b$ . Cada matriz está descrita por los elementos:

$$\begin{aligned} m_{(a,b)11} = m_{(a,b)22} &= \cos \beta_{(a,b)} & m_{12} &= -\frac{i}{p_{(a,b)}} \sin \beta_{(a,b)} \\ m_{(a,b)21} &= -ip_{(a,b)} \sin \beta_{(a,b)} \end{aligned} \quad (22)$$

donde para ondas  $TE$ :

$$\beta_{a,b} = k_0 n_{a,b} z_{a,b} \cos \theta_{a,b} \quad p_{a,b} = \sqrt{\frac{\varepsilon_{a,b}}{\mu_{a,b}}} \cos \theta_{a,b} \quad (23)$$

O para ondas  $TM$

$$p_{a,b} = \sqrt{\frac{\mu_{a,b}}{\varepsilon_{a,b}}} \cos \theta_{a,b} \quad (24)$$

donde el coeficiente  $p_{a,b}$  de las ecuaciones (24) y (23), es válido para el caso particular de ondas planas. Si el medio es estratificado periódicamente, como el mostrado en la *Figura II-1*, la función dieléctrica tiene una simetría de traslación:

$$\varepsilon(z + hm) = \varepsilon(z) \quad \mu(z + hm) = \mu(z) \quad (25)$$

donde  $m$  es un número entero menor o igual al número total de capas  $N$ , y tiene la misma forma que el potencial periódico de un cristal. Por esa razón los denominan cristales fotónicos y tienen propiedades análogas [5].

Si cada bicapa tiene matriz característica  $M_0$ , entonces la matriz de todo el arreglo será  $M = M_0^N$ , los elementos de la matriz de transferencia para la bicapa son:

$$M_{11} = m_{a11} * m_{b11} + m_{a12} * m_{b21} = \cos \beta_a \cos \beta_b - \frac{p_b}{p_a} \sin \beta_a \sin \beta_b \quad (26)$$

$$M_{22} = m_{a22} * m_{b22} + m_{a21} m_{b12} = \cos \beta_a \cos \beta_b - \frac{p_a}{p_b} \sin \beta_a \sin \beta_b \quad (27)$$

$$M_{12} = m_{a11} * m_{b12} + m_{a12} * m_{b2} = -\frac{i \cos \beta_a \sin \beta_b}{p_b} - \frac{i \cos \beta_b \sin \beta_a}{p_a} \quad (28)$$

$$\begin{aligned} M_{21} &= m_{a21} * m_{b11} + m_{a22} * m_{b21} \\ &= -ip_a \cos \beta_b \sin \beta_a - ip_b \cos \beta_a \sin \beta_b \end{aligned} \quad (29)$$

Como la matriz de transferencia resulta de elevar una matriz unitaria a la  $N$ -ésima potencia, los elementos que resultan están caracterizados por los polinomios de Tchébychev [6]:

$$M^n = \begin{bmatrix} M_{11}S_{n-1}(x) - S_{n-2}(x) & M_{12}S_{n-1}(x) \\ M_{21}S_{n-1}(x) & M_{22}S_{n-1}(x) - S_{n-2}(x) \end{bmatrix} \quad (30)$$

donde:

$$x = \frac{M_{11} + M_{22}}{2}$$

$$x = \cos \beta_a \cos \beta_b - \frac{1}{2} \left( \frac{p_a}{p_b} + \frac{p_b}{p_a} \right) \sin \beta_a \sin \beta_b \quad (31)$$

y

$$S_N = \frac{\sin[(N+1) \cos^{-1} x]}{\sqrt{1-x^2}} \quad (32)$$

Si el camino óptico de las bicapas es igual, es decir  $\beta_a = \beta_b$ , y a incidencia normal,  $\beta = knh$ ,  $x$  es una función de senos y cosenos al cuadrado, por lo que tiene soluciones puramente imaginarias.

$$x = \cos^2 \beta - \frac{1}{2} \left( \frac{n_a}{n_b} + \frac{n_b}{n_a} \right) \sin^2 \beta \quad (33)$$

Eso implica que el  $\sin x$ , es una función hiperbólica en función del número de capas, por lo tanto, *la reflectancia crece exponencialmente en relación con el número de capas*. En particular, cuando se cumple la condición de camino óptico de un cuarto de longitud de onda  $\beta = \frac{\pi}{2}$  la matriz característica es diagonal:

$$M_{2N} = \begin{bmatrix} \left(-\frac{n_3}{n_2}\right)^N & 0 \\ 0 & \left(-\frac{n_2}{n_3}\right)^N \end{bmatrix} \quad (34)$$

y la reflectancia es:

$$R_{2N} = \left( \frac{1 - \frac{n_0}{n_{z_i}} \left(\frac{n_2}{n_3}\right)^{2N}}{1 + \frac{n_0}{n_{z_1}} \left(\frac{n_2}{n_3}\right)^{2N}} \right)^2 \quad (35)$$

### II.III Función de dispersión.

La matriz de transferencia para una capa simple homogénea es:

$$T_{n_i,z} = \begin{pmatrix} \cos(k_{z,n}z) & i \frac{\sin(k_{z,n}z)k_0}{k_{z,n}} \\ -i \frac{k_{z,n} \sin(k_{z,n}z)}{k_0} & \cos(k_{z,n}z) \end{pmatrix} \quad (36)$$

donde  $k_{z,n} = k_0 n \cos \phi_n$  y  $\phi_n$  es el ángulo de propagación respecto a la normal de la interfase.

El determinante de la matriz es constante, para (36) es igual a 1, recordando que para ondas TM hace falta multiplicar por el inverso de la función dieléctrica [7].

Para un arreglo fotónico, se define el estado propio o vector propio de un material de ancho  $L$ , como aquel que puede propagarse de  $-\infty \rightarrow \infty$ . Es decir, usando la relación entre campos incidentes, reflejados y transmitidos, la onda propia relacionará el campo reflejado y el transmitido sin tomar en cuenta la parte incidente:

$$T \begin{pmatrix} 1 \\ -n_i \cos \phi_i \end{pmatrix} = A \begin{pmatrix} 1 \\ n_t \cos \phi_t \end{pmatrix} \quad (37)$$

Con  $A$  una constante distinta de 0. En incidencia normal esta relación se escribe como:

$$T_{11} - T_{12}n_i \cos \phi_i = A; \quad T_{21} - T_{22}n_i \cos \phi_i = A n_t \cos \phi_t \quad (38)$$

$$T_{11}n_t \cos \phi_t - T_{12}n_i n_t \cos \phi_i \cos \phi_t - T_{21} + T_{22}n_i \cos \phi_i = 0 \quad (39)$$

De forma implícita, la ecuación (39) depende del vector de onda, a partir del cual se escriben los elementos de la matriz de transferencia y en general, tiene una solución imaginaria.

Recordando que  $k_z = n_z k_0 \cos \phi$ , con  $k_z^2 = \frac{n^2 \omega^2}{c^2} - |k_{\parallel}|^2$ , cuando  $k_z$  es imaginario, existen soluciones reales para la frecuencia siempre que  $|k_{\parallel}| > \Im(k_z)$ , entonces la señal es atenuada en la dirección  $z$ . Una solución en general es una solución amortiguada, esto explica por qué cerca de las regiones de resonancia puede haber estados de alta transmitancia y baja reflectancia, como el caso de la amplitud de un oscilador amortiguado cerca de la frecuencia de resonancia.

#### II.IV Brechas fotónicas.

De forma similar a las soluciones para la ecuación de onda de los electrones en un cristal, la solución para la ecuación de onda del campo electromagnético en un arreglo periódico, cumple con las condiciones de periodicidad, o condiciones de Floquet-Bloch [8]. Eso es, el campo electromagnético después de un periodo del arreglo, debe ser el campo inicial multiplicado por un cambio de fase. Por lo tanto

$$T(\vec{d})\phi(0) = e^{i\vec{k}_z \cdot \vec{d}}\phi(0) = e^{iqd}\phi(0) \quad (40)$$

Esa es la relación de valores propios.

Tomando en cuenta eso y que el determinante de  $T$  es igual a 1, la ecuación que relaciona los vectores de onda con las energías de estados permitidos es:

$$T_{11}T_{22}\lambda^{-1} - (T_{11} + T_{22}) - T_{12}T_{21}\lambda^{-1} + \lambda = 0 \quad (41)$$

$$\lambda^2 - (T_{11} + T_{22})\lambda + 1 = 0 \quad (42)$$

$$(43)$$

$$\lambda_{\pm} = \frac{(T_{11} + T_{22}) \pm \sqrt{(T_{11} + T_{22})^2 - 4}}{2} = e^{iqd} \phi(0)$$

$$\lambda_+ + \lambda_- = 2 \cos(qd) = T_{11} + T_{22} \quad (44)$$

Si  $\lambda$  es un valor propio, entonces  $1/\lambda$  también lo es.

La norma del valor propio es 1 en el caso de estar en la región permitida, en caso contrario un valor propio tendrá norma menor a 1 y el otro tendrá norma mayor a 1, entonces sólo uno de los valores propios tendrá sentido físico, pues el campo para el valor propio con norma menor a 1 es atenuado y para el otro es incrementado infinitamente.

La constante de decaimiento del campo en la estructura, será definida por la forma del valor propio  $\lambda = e^{iqd} e^{-\gamma}$ , explícitamente la constante es:

$$\gamma = \frac{\ln|\lambda|}{d} \quad (45)$$

Tomando en cuenta que en la región prohibida la solución debe ser un complejo, la parte real debe ser  $n\pi$  y la parte imaginaria que describe la atenuación del campo, es:

$$\text{Im}(\lambda) = \text{acosh}\left(\frac{T_{11} + T_{22}}{2}\right) \quad (46)$$

O usando la ecuación (42)

$$\text{Im}(\lambda) = \ln\left(\frac{(T_{11} + T_{22}) \pm \sqrt{(T_{11} + T_{22})^2 - 4}}{2}\right) \quad (47)$$

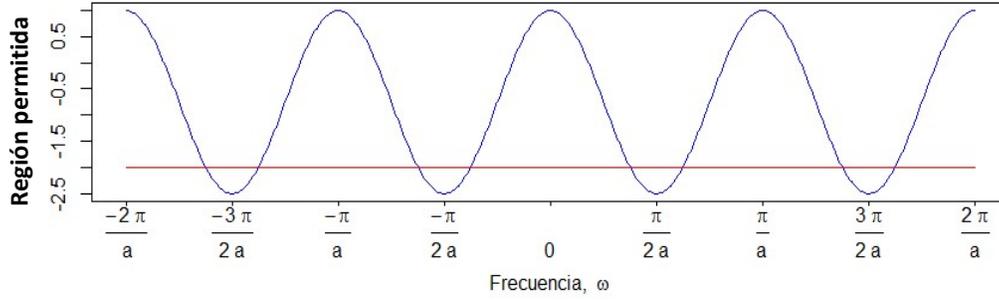
Por otro lado, la ecuación (44) impone condiciones para la frecuencia. Dado que la función coseno tiene valores limitados entre 1 y -1, existen soluciones permitidas y prohibidas. Esas regiones son diferentes para arreglos simétricos y no simétricos.

La matriz de transferencia en incidencia normal es:

$$T_{n_i z} = \begin{pmatrix} \cos(k_0 n_i z) & \frac{i \sin(k_0 n_i z)}{n_i} \\ i n_i \sin(k_0 n_i z) & \cos(k_0 n_i z) \end{pmatrix} \quad (48)$$

El periodo del arreglo fotónico es formado por dos capas; si los materiales de cada capa tienen índices y vectores de onda  $k_1 = n_1 k_0$  y  $k_2 = n_2 k_0$ , la matriz de la bicapa es:

## Arreglo de caminos opticos simétricos



**Figura II-2** Regiones prohibidas de un arreglo periódico de materiales formado por capas de camino óptico idéntico, el eje de las frecuencias está normalizado en relación con  $a$ .

$$T_{n,a} = \begin{pmatrix} \cos(k_1 z) \cos(k_2 z) + \frac{n_2}{n_1} \sin(k_1 z) \sin(k_2 z) & i \left( \frac{\sin(k_1 z) \cos(k_2 z)}{n_1} + \frac{\sin(k_2 z) \cos(k_1 z)}{n_2} \right) \\ i [n_1 \sin(k_1 z) \cos(k_2 z) + n_2 \sin(k_1 z) \cos(k_2 z)] & \cos(k_1 z) \cos(k_2 z) + \sin(k_1 z) \sin(k_2 z) \frac{n_1}{n_2} \end{pmatrix} \quad (49)$$

Cuando un arreglo es simétrico las capas tienen el mismo camino óptico  $k_1 z_1 = k_2 z_2 = \frac{a_0 \omega}{c}$ , con  $c$  la velocidad de la luz en el vacío. La relación que se deriva de la condición de vector propio es la misma que la ecuación (31):

$$2 \cos(qd) = 2 \cos^2(a\omega) - \sin^2(a\omega) \left( \frac{n_2}{n_1} + \frac{n_1}{n_2} \right) \quad (50)$$

Que está siempre bien definida para  $qd = 0$ , es decir  $\omega = 0$ . El coeficiente que multiplica a la función seno es mayor o igual a 2, pues los índices son diferentes y mayores a 1. Es decir, suponiendo sin pérdida de generalidad que  $n_2 > n_1 > 1$

$$2\beta = \frac{n_2^2 + n_1^2}{n_1 n_2} \geq \frac{2n_1^2}{n_1^2} \quad (51)$$

En el caso de la igualdad de índices de refracción la función está siempre bien definida y no hay brecha, en otro caso el centro de la brecha sucede cuando la función seno es máximo y la función coseno es mínimo, es decir en  $\omega_m = \frac{\pi}{2a}$  y los bordes de la brecha están en la condición límite para valores negativos:

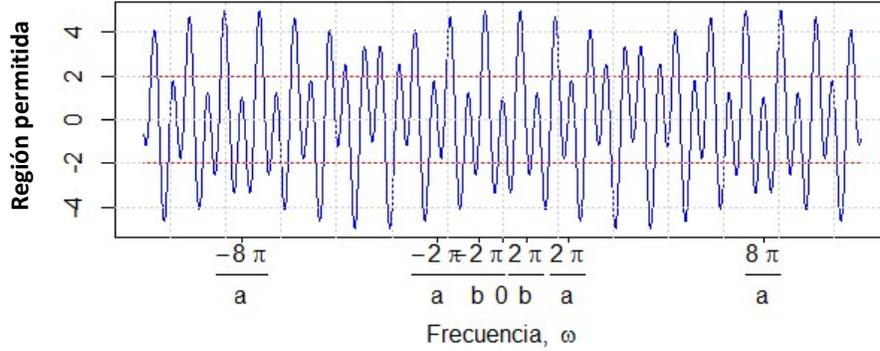
$$-1 = \cos^2(a\omega) - \beta \sin^2(a\omega) \quad (52)$$

$$\sin(a\omega) = \pm \sqrt{\frac{2}{1 + \beta}} \quad (53)$$

La condición es una función periódica, con el mismo periodo que la función  $\cos^2 \theta$ , es decir tiene un periodo de  $\frac{\pi}{a}$ , como muestra la *Figura II-2*.

Por lo que la razón del ancho de brecha entre centro de brecha ( $\omega_m$ ), que es una cantidad invariante ante escalamientos, es de la forma.

## Arreglo de caminos opticos no simétricos



**Figura II-3** Bandas de un arreglo no simétrico, las brechas dependen de la constante  $\beta = 2.5$ , (necesariamente mayor a 2) y las relaciones de camino óptico, los números  $a$  y  $b$ . En este caso  $a=4$  y  $b=11$ .

$$\frac{\Delta\omega}{\omega_m} = \frac{4a}{\pi} \sin^{-1} \left( \sqrt{\frac{2}{1+\beta}} \right) - 2 \quad (54)$$

Otra forma de aproximar el ancho de brecha es suponer que la condición límite de la ecuación (52) sucede en el ángulo  $\omega_0 \pm \Delta\omega$ , y dado que eso sucede en el ángulo normalizado  $\delta = \frac{\pi}{2} \left( \frac{\omega}{\omega_0} \right)$ , el coseno puede aproximarse a 0. A primer orden:

$$\frac{\Delta\omega}{\omega_0} \approx \frac{2}{\pi} \sin^{-1} \sqrt{\frac{2n_1n_2}{n_1^2+n_2^2}} \approx \frac{2}{\pi} \sin^{-1} \left( \frac{n_2-n_1}{n_2+n_1} \right) \quad (55)$$

Por otro lado, para arreglos con índices de refracción similares, pero aproximando el ancho de brecha por medio de perturbaciones, esta aproximación está disponible en la literatura [5], la relación es:

$$\frac{\Delta\omega}{\omega_m} \approx \frac{\Delta\varepsilon}{\varepsilon} \left( \frac{\sin\left(\frac{\pi d}{a}\right)}{\pi} \right) \quad (56)$$

El caso de capas con caminos ópticos distintos tiene un comportamiento diferente, si bien el punto  $\omega = 0$  sigue siendo un valor válido para la relación, las bandas se dividen en un número finito de brechas. Considerando que los caminos ópticos ahora son  $k_1z_1 = \frac{a_0\omega}{c}$  y  $k_2z_2 = \frac{b_0\omega}{c}$ , y suponiendo que  $a$  y  $b$  son conmensurables, entonces la función sigue siendo periódica y aparecen bandas prohibidas para los valores positivos, es decir, ya no hay puntos de contacto entre las bandas. La posición del centro de la banda prohibida principal está en la frecuencia:

$$\frac{\omega(n_a a + n_b b)}{c} = (2n - 1)\pi \quad (57)$$

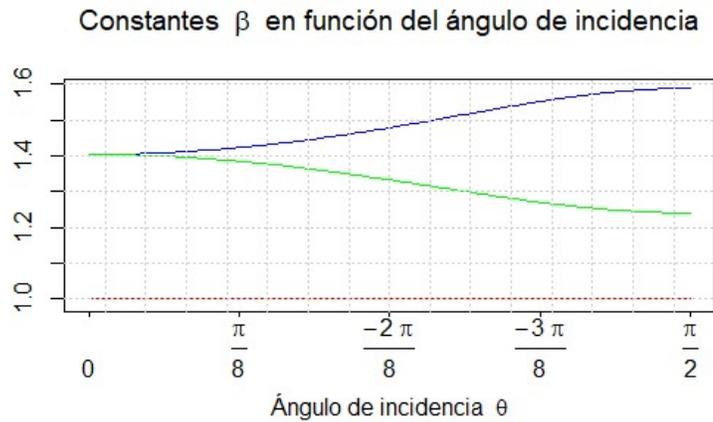
La *Figura II-3* muestra la condición de estados permitidos para constantes  $a = 4$ ,  $b = 11$ ,  $\beta = 2.5$ . La cantidad de bandas en cada periodo depende de la razón entre las constantes  $a$ ,  $b$  y  $\beta$ . Este efecto puede ser empleado para modificar el ancho de las brechas [9]

En la literatura es frecuente que se destaque la diferencia entre los anchos de bandas prohibidas, para ondas tipo TE y TM. Esta diferencia se explica cualitativamente en función del cambio de la constante  $\beta$  de la ecuación(51). En las ecuaciones (58) y (59) se muestra la constante  $\beta$  para ambas condiciones, los subíndices  $a$  y  $b$  están hacen referencia a las propiedades de la capa A y B de una capa doble AB, respectivamente. Por ejemplo,  $\theta_a$  es el ángulo director de propagación de la onda en la capa A:

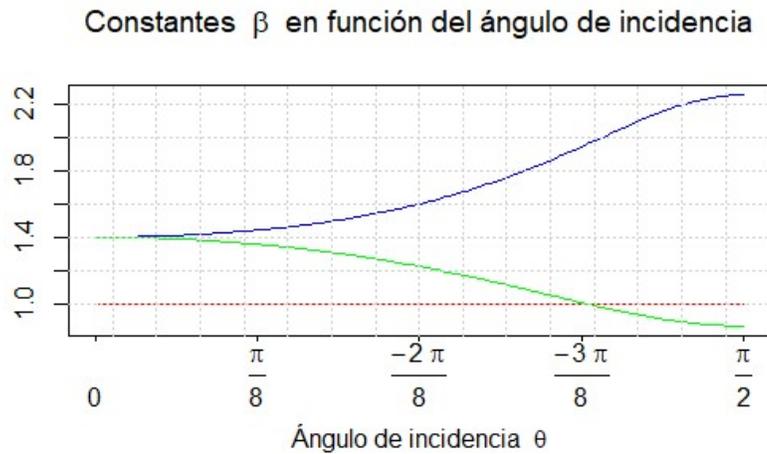
$$\beta_{TE} = \frac{1}{2} \left( x_{TE} + \frac{1}{x_{TE}} \right), \quad x_{TE} = \frac{n_a \cos \theta_a}{n_b \cos \theta_b} = \sqrt{\frac{n_a^2 - n_i \sin^2 \theta_i}{n_b^2 - n_i \sin^2 \theta_i}} \quad (58)$$

$$\beta_{TM} = \frac{1}{2} \left( x_{TM} + \frac{1}{x_{TM}} \right), \quad x_{TM} = \frac{n_b \cos \theta_a}{n_a \cos \theta_b} = \left( \frac{n_b^2}{n_a^2} \right) x_{TE} \quad (59)$$

La *Figura II-4* ilustra el comportamiento de las constantes  $\beta_{TE}$  y  $\beta_{TM}$ , en función del camino óptico. Se puede de forma equivalente describir el comportamiento en función de la frecuencia, pero en esta representación se observa que el ancho de banda depende de la dirección de incidencia.



**Figura II-4** Comportamiento de la constante  $\beta$  para capas con índices de refracción  $n_a = 2.33$ ,  $n_b = 1.66$ ,  $n_i = 1$ , que son los índices de refracción del silicio poroso estudiado en este trabajo para una longitud de onda de  $500 \text{ nm}$ . Nótese que la constante para ondas TE siempre es mayor a 1 y siempre es mayor a la de las ondas tipo TM.



**Figura II-5** Comportamiento de la constante  $\beta$  para capas con índices de refracción  $n_a = 2.33$ ,  $n_b = 1.66$ ,  $n_i = 2.1$ , que tiene un estado permitido en la brecha prohibida, para el ángulo descrito en la condición de igualdad de la ecuación (60). Y que puede ser logrado con silicio poroso.

Para una onda TE la constante es siempre mayor a 1 y siempre creciente por encima de la constante para la onda TM. Eso implica que un espejo siempre tiene ancho de banda de alta reflectancia (región prohibida) más ancho para ondas TE en relación con ondas TM.

Por otro lado, para las ondas TM existen condiciones para las cuales la función  $x_{TM} < 1$  y, por ser continua, la igualdad a 1 es cumplida en al menos un punto, por lo que, de la inecuación (60), cumple la igualdad en ese ángulo y el espejo tendrá al menos un punto (ángulo de incidencia) de transmisión permitida, *Figura II-5*.

$$\sin^2 \theta_i \geq \frac{n_b^2 n_a^2}{n_1^2 (n_a^2 + n_b^2)} \quad (60)$$

$$n_1^2 > \frac{n_a^2 n_b^2}{n_a^2 + n_b^2} \quad (61)$$

## II.V Relaciones de reciprocidad.

El principio de reversibilidad para ondas tipo  $p$  y tipo  $s$  es resultado de las condiciones de frontera de la interfase [10].

$$r_{ab} = -r_{ba} \quad (62)$$

$$\frac{t_{21}}{n_2 \cos \theta_2} = \frac{t_{12}}{n_1 \cos(\theta_1)} \quad (63)$$

donde el orden de las letras indica la dirección de incidencia y transmisión,  $r_{ab}$  es la reflectancia de una onda propagándose desde el medio  $a$  al medio  $b$ .

En el capítulo anterior se mostró que la matriz de transferencia relaciona el campo transmitido y reflejado con el incidente. Si una onda viaja de izquierda a derecha desde un medio  $a$  a través de un sustrato descrito por la matriz de transferencia  $A$ , hasta un medio  $b$ , entonces, usando la descripción de ondas viajeras, cuarto método del capítulo uno:

$$e^{ik_{az}z} + r e^{-ik_{az}z} \leftarrow A \rightarrow t e^{ik_{bz}z} \quad (64)$$

$$\begin{pmatrix} t_{ab} \\ 0 \end{pmatrix} = A \begin{pmatrix} 1 \\ r_{ab} \end{pmatrix} \quad (65)$$

De forma equivalente, para una onda que viaja de derecha a izquierda el sistema está descrito por:

$$\begin{pmatrix} r_{ba} \\ 1 \end{pmatrix} = A \begin{pmatrix} 0 \\ t_{ba} \end{pmatrix} \quad (66)$$

De donde:

$$t_{ba} = \frac{1}{A_{22}} \quad (67)$$

$$r_{ba} = \frac{A_{12}}{A_{22}} \quad (68)$$

Entonces:

$$r_{ab} = -r_{ba} \quad (69)$$

$$\det A * t_{ba} = t_{ab} \quad (70)$$

Usando la ecuación (63) del capítulo I:

$$k_{za}t_{ab} = k_{zb}t_{ba} \quad (71)$$

recuperando la relación de reversibilidad obtenida a partir de las condiciones de continuidad de campo eléctrico:

$$\frac{t_{ba}}{n_b \cos \theta_b} = \frac{t_{ab}}{n_a \cos \theta_a} \quad (72)$$

## II.VI Fase de la reflectancia.

El cambio de fase es muy importante en el comportamiento de los arreglos fotónicos, pues permite conocer cuándo se pueden alcanzar estados resonantes [9]. Como en el caso de la reflexión total interna, el cambio de fase de una onda en la región de la brecha no es constante[6]. Para calcular el cambio de fase en la brecha, considere la forma del valor y vector propios en esta región. Suponiendo una estructura infinita, el vector propio y el campo incidente están relacionados por [11]

$$\left( \frac{1+r}{n_1(1-r)} \right) \propto \text{vector propio} = \begin{pmatrix} a \\ ib \end{pmatrix} \quad (73)$$

donde las constantes en los componentes del vector propio deben ser reales en la región prohibida. De esta relación la reflectancia:

$$r = \frac{in_1a - b}{in_1a + b} \quad (74)$$

$$\Rightarrow |r| = 1$$

$$\arg r = \pi - 2 \arctan\left(\frac{an_1}{b}\right) \quad (75)$$

En general el argumento de la reflectancia depende de la frecuencia y será 0 en la frecuencia de resonancia si la capa más externa es la de menor índice de refracción o  $\pi$  en el caso de que sea la de mayor índice de refracción [12]. Esto es importante para entender los procesos de interferencia en las películas delgadas y a su vez el modelo de interferencia que explica la alta transmisión en arreglos asimétricos.

Para la reflectancia fuera de la brecha, considerando el primer método expuesto en el capítulo I y la ecuación (64), que relaciona las ondas según su dirección de propagación para ondas planas tipo  $s$ , el campo eléctrico (primer componente) y el campo magnético (segunda componente) están relacionados de la forma siguiente [13]:

$$\begin{pmatrix} te^{ik_{zb}z_L} \\ ik_{zb}te^{ik_{zb}z_L} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{ik_{za}z_0} + re^{-ik_{za}z_0} \\ ik_{za}(e^{ik_{za}z_0} - re^{-ik_{za}z_0}) \end{pmatrix} \quad (76)$$

donde el sustrato o medio termina en  $z_L$ .

Despejando  $r$  y  $t$  de (76), se obtiene la expresión para la reflectancia y la transmitancia respectivamente:

$$r = e^{2ik_{za}z_0} \frac{k_{za}k_{zb}A_{12} + A_{21} + i(k_{za}A_{22} - k_{zb}A_{11})}{k_{za}k_{zb}A_{12} - A_{21} + i(k_{zb}A_{11} + k_{za}A_{22})} \quad (77)$$

$$t = e^{i(k_{za}z_0 - k_{zb}z_L)} \frac{2ik_{za}}{k_{za}k_{zb}A_{12} - A_{21} + i(k_{zb}A_{11} + k_{za}A_{22})} \quad (78)$$

$$R = |r|^2 = \frac{(k_{za}k_{zb}A_{12} + A_{21})^2 + (k_{za}A_{22} - k_{zb}A_{11})^2}{(k_{za}k_{zb}A_{12} - A_{21})^2 + (k_{zb}A_{11} + k_{za}A_{22})^2} \quad (79)$$

Note que en caso de transmitancia nula, el resultado es congruente con que la reflectancia tiene norma 1.

$$r = -e^{2ik_{za}z_0} \frac{A_{11} + ik_{za}A_{12}}{A_{11} - ik_{za}A_{12}} \quad (80)$$

$$\arg r = 2 \arctan\left(\frac{k_{za}A_{12}}{A_{11}}\right) + 2ik_{za}z_0 \quad (81)$$

## II.VII Arreglos infinitos tipo Bragg.

Con el formalismo desarrollado hasta ahora, podemos explorar los estados permitidos en la brecha fotónica. En particular, cuando un arreglo de capas se compone de una sucesión infinita de bicapas, como la expuesta durante el análisis de las brechas, conocido como espejos tipo Bragg, todos los resultados asociados a las bicapas expuesto anteriormente son válidos. Es frecuente que se busquen diseños que muestren transmitancia perfecta o al menos alta transmitancia. En ese caso la matriz total debe ser la identidad.

Eso es posible cuando el argumento de los elementos de la matriz de transferencia es  $m\pi$ . Es decir, si el número de cambios de fase es par, la estructura será simplemente la identidad multiplicada por el cambio de fase y si el número es impar será menos la identidad,  $A = \pm I$ .

En el caso de que las capas tengan un camino óptico a incidencia normal de  $\frac{\pi}{4}$  o de cumplir la condición  $\frac{\lambda}{4}$ , la matriz formada por N capas con índices de refracción  $n_h$  (índice alto) y  $n_l$  (índice bajo) será:

$$\begin{pmatrix} \left(-\frac{n_h}{n_l}\right)^N & 0 \\ 0 & \left(-\frac{n_l}{n_h}\right)^N \end{pmatrix} = A \quad (82)$$

Por lo que la reflectancia crece exponencialmente con el número de bicapas:

$$R = \left| \frac{\frac{n_b}{n_a} \left(\frac{n_h}{n_l}\right)^{2N} - 1}{\frac{n_b}{n_a} \left(\frac{n_h}{n_l}\right)^{2N} + 1} \right|^2 \quad (83)$$

En general, como muestra Born (1970) [6], para toda matriz unimodular, la  $N$ -ésima potencia  $A^N$  tendrá elementos:

$$A^N = \begin{pmatrix} A_{11}S_N - S_{N-1} & A_{12}S_N \\ A_{21}S_N & A_{22}S_N - S_{N-1} \end{pmatrix} \quad (84)$$

donde:

$$S_N = \frac{\sin(N\phi)}{\sin \phi} \quad (85)$$

$$\cos \phi = \frac{1}{2} \text{traza}(A) = \frac{1}{2} (A_{11} + A_{22}) \quad (86)$$

Que requiere para su demostración la relación de unicidad y las identidades de recurrencia:

$$\begin{aligned} A_{11}A_{22} - A_{12}A_{21} &= 1 \\ 2 S_N \cos \phi - S_{N-1} &= S_{N+1} \end{aligned} \quad (87)$$

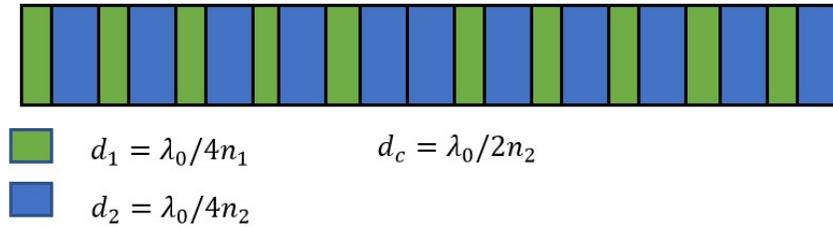
Usando la relación  $\sigma_N = \frac{S_{N-1}}{S_N}$ , la reflectancia es:

$$r = -e^{2ik_{za}z_0} \frac{q_1 q_2 A_{12} + A_{21} + i q_1 (A_{22} - \sigma_N) - i q_2 (A_{11} - \sigma_N)}{q_1 q_2 A_{12} - m_{21} + i q_1 (A_{22} - \sigma_N) + i q_2 (A_{11} - \sigma_N)} \quad (88)$$

Qué es análogo a una bicapa si  $\sigma_N \rightarrow 0$  o al sustrato si  $\sigma_N \rightarrow \infty$ . Esos casos suceden en las raíces del  $\sin(N\phi)$  o  $\sin((N-1)\phi)$ , es decir el espejo tendrá oscilaciones conforme cambie la longitud de onda o el ángulo de incidencia, pasará de estados altamente reflectivos a estados transparentes.

## II.VIII Regiones de alta transmitancia.

Reiterando, las regiones de alta transmitancia corresponden a situaciones donde la matriz de transferencia es la unidad o el cambio de fase de la señal en el medio equivale a  $\pi$  o  $2\pi$ . Los siguientes ejemplos no exploran exhaustivamente las posibilidades que deben cumplirse para que una sucesión de materiales tenga como matriz de transferencia a la identidad. Solamente se muestran algunos ejemplos que cumplen con las condiciones de: ser medios no absorbentes, tener interfases planas, la radiación incide en la dirección normal, el camino óptico es constante en la frecuencia de resonancia, el medio de incidencia y transmisión es aire, índice de refracción constante y alto contraste, definido como la diferencia entre los índices de refracción de las capas que forman el arreglo.



**Figura II-6** Arreglo en forma de microcavidad, formado por dos arreglos de Bragg conjugados.

### II.VIII.i El arreglo de una capa o cavidad de Fabry-Perot:

Los arreglos de Fabry-Perot han sido frecuentemente empleados como filtros y sus estados transparentes están bien estudiados en la literatura por ejemplo [14].

Para una película sin absorción, cuando el medio de incidencia es igual al de transmisión, el camino óptico es  $\phi = \frac{4\pi}{\lambda} d \cos \theta$ , la reflectancia  $r = |r|e^{i\phi_r}$  y  $F = 4|r|^2/(1 - |r|^2)^2$ , entonces:

$$\frac{I_t}{I_0} = \frac{1}{1 + F \sin^2 \left( \frac{\phi - \phi_r}{2} \right)} \quad (89)$$

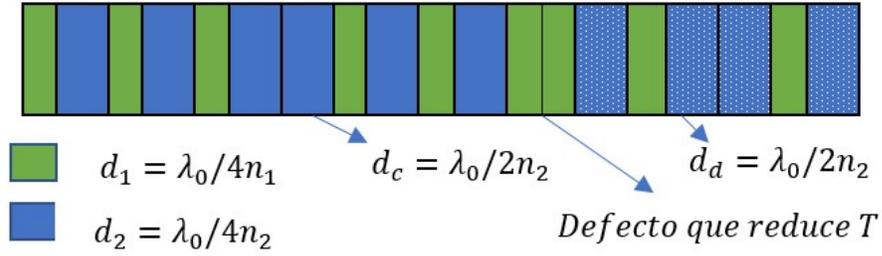
$\phi_r/2 = (0, \pi)$ , 0 cuando la reflexión es del medio más denso al menos denso y  $\pi$  cuando es del menos denso al más denso. En ese caso la transmisión será perfecta,  $(I_t/I_0)=1$ , sin importar la reflectancia en la interfase, cuando el argumento de la función seno es igual a  $0, \pi, 2\pi, \dots$ , sin embargo, el mínimo dependerá de  $|r|$ .

Por esa razón un arreglo periódico de bicapas, o arreglo de Bragg, también será transparente en esas condiciones, es decir, si el camino óptico de las dobles capas equivale a un cambio de fase de  $\frac{\pi}{2}$  por capa. En ese caso la matriz de transferencia es  $\pm I$ , positivo si hay un número par de periodos y  $-I$  en el caso de haber un número impar [15].

### II.VIII.ii Microcavidad (generalización):

La microcavidad es un arreglo como el mostrado en la *Figura II-6*, que se forma por dos espejos de Bragg en un orden conjugado. Se define que dos secuencias de múltiples capas, formadas por al menos dos materias, por ejemplo,  $D_1$  y  $D_2$ , son conjugadas si: la segunda es la permutación de la primera, es decir, si cada capa  $D_1$  del primer arreglo es sustituida por una capa  $D_2$ . Así, el arreglo de Bragg  $D_1 D_2 D_1 D_2$  tendrá como conjugado al arreglo  $D_2 D_1 D_2 D_1$ .

Cuando el camino óptico de todas las capas es  $d = \frac{\lambda_0}{4n}$ , las matrices de transferencia a incidencia normal para una onda con longitud de onda  $\lambda_0$  de cada bicapa son diagonales, y sus valores propios son recíprocos, como muestra la ecuación (82). Por lo tanto, a primer orden, el producto es.



**Figura II-7** Arreglo semisimétrico, compuesto de dos microcavidades completas. En general las microcavidades no necesitan estar formadas del mismo material, sólo tener la misma frecuencia de resonancia. La textura de las capas azules es para resaltar que la condición no está en el índice de refracción sino en el camino óptico.

$$A(\lambda_0) = \begin{pmatrix} \left(-\frac{n_h}{n_l}\right)^N & 0 \\ 0 & \left(-\frac{n_l}{n_h}\right)^N \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \left(-\frac{n_l}{n_h}\right)^N & 0 \\ 0 & \left(-\frac{n_h}{n_l}\right)^N \end{pmatrix} = I \quad (90)$$

En la región de resonancia, debido a que el producto de matrices es asociativo, sin tomar en cuenta los efectos en la brecha fotónica, cualquier estructura de bicapas en las condiciones descritas forman un arreglo de alta transmitancia. Ese es el caso de los arreglos de bicapas ordenados de forma conjugada, es decir, cualquier arreglo con simetría de espejo:

$$A_1 A_2 A_3 A_4 A'_4 A'_3 A'_2 A'_1 = I \quad (91)$$

donde las matrices primadas son las correspondientes a arreglos conjugados, pues  $A_n A'_n = I$ , es decir, el termino conjugado es aplicado a la celda unitaria. En general, la simetría de espejo no es necesaria. Basta con que el producto de las matrices de transferencia de los arreglos sea la identidad, como en los siguientes dos ejemplos, disponibles en la literatura, aunque explicados en una forma mucho más complicada que en este análisis.

### II.VIII.iii Unión de arreglos tipo microcavidad y Fabry-Perot en secuencia (II Estructura semisimétrica).

Uno de los resultados publicados durante este proyecto de doctorado está relacionado con **estructuras sin simetrías aparentes**. Para mostrar el efecto de una pérdida paulatina de la simetría, se parte de un arreglo con simetría de espejo y se modifica hasta llegar a una secuencia como la mostrada en la ecuación (91), que se puede modificar de forma general a un arreglo no simétrico y de transmitancia perfecta en  $\lambda_0$ .

El arreglo sin simetría de espejo más sencillo es el arreglo semisimétrico o localmente simétrico, *Figura II-7*, formado por dos microcavidades con la misma condición de camino óptico, *una puede o no ser la conjugada de la otra*, aunque las capas tendrán un orden conjugado local, como lo es el

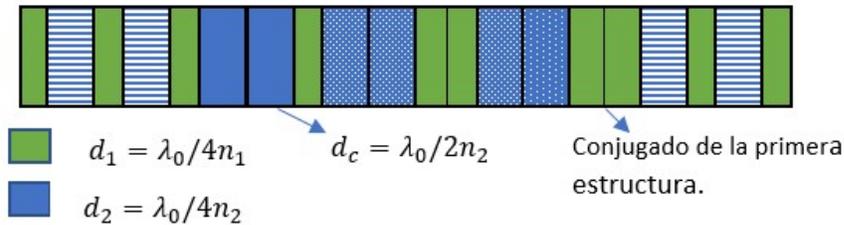


segunda al filtro de Fabry-Perot resultante de encimar capas de camino óptico de  $d = \frac{\lambda}{4n}$ . El tamaño del espejo de Bragg es irrelevante, únicamente la fase es afectada dependiendo del número par o impar de *bicapas*.

Tanto el caso semisimétrico como el asimétrico, son la unión de estructuras de alta transmitancia transmitancia, similares a la serie de la ecuación (91).

Las estructuras conjugadas van en lados opuestos y la secuencia de estructuras debe garantizar que, por la propiedad de asociatividad, el producto de las matrices sea la identidad, es decir, *la identidad sólo puede ser colocada entre dos estructuras o una al lado de otra*.

Siguiendo las observaciones anteriores, se propone una nueva secuencia, no reportada hasta ahora, la secuencia (94), como una forma más general para obtener sistemas de transmitancia perfecta en



**Figura II-9** Arreglo sin simetría alguna. Se trata de una estructura que tiene transmisión perfecta en la longitud de onda de resonancia.

la resonancia. La condición suficiente para que la transmitancia sea perfecta es que el producto asociado de matrices sea un producto de matrices identidad.

$$A_3 A_1 A'_1 A'_2 A_2 A'_3 = I \tag{94}$$

donde  $A_i$  puede ser cualquier arreglo simétrico, entonces  $A'_i = A_i^{-1}$ .

Las estructuras primadas son el arreglo conjugado, pues en caso contrario, al unir dos estructuras habrá una secuencia habrá dos capas con el mismo índice de refracción, que al unirse formarán un defecto, ese defecto reducirá la transmitancia, como sucede al unir las microcavidades lateralmente *Figura II-7*.

Al insertar arreglos transparentes a la mitad de un arreglo transparente, el resultado es un arreglo simétrico con un número impar de capas, como el estudiado en [15]. Un ejemplo de una estructura que cumple con las ecuaciones (94) y las condiciones de matriz diagonal, se muestra en la *Figura II-9*. Este arreglo no tiene ni simetría de espejo ni semisimetría.

La alta transmitancia del arreglo de Zhukovsky y de la *Figura II-7*, que quedó pendiente, se explica sin emplear el método de la matriz de transferencia, describiendo el comportamiento de los arreglos a través de las simetrías del campo eléctrico dentro de cada capa.

El campo eléctrico dentro de una región de índice de refracción constante cumple con condiciones de simetría y paridad, descrita por la ecuación tipo corriente para el campo eléctrico que se cumple en los arreglos fotónicos [15].

$$E(2\bar{z}_m - (z_{m+1} + z_m))E'(z) + E(z)E'(2\bar{z}_m - (z_{m+1} + z_m)) = Q_m = cte \quad (95)$$

donde  $z \in (z_m, z_{m+1})$ . Es decir, la “corriente de campo eléctrico” en cada microcavidad o estructura con simetría es constante.

En  $\bar{z}_m = (z_m + z_{m+1})$ , la corriente es un medio de la corriente total, y que en general es la condición de simetría antes mencionada. Por esa razón, primero, el campo alcanza un máximo y un mínimo en cada interfase; segundo, los campos en las interfases son simétricos en relación con el punto medio de cada capa, es decir, la intensidad del campo eléctrico para incidencia normal dentro de la estructura oscila o es constante, por lo que para conocer la envolvente bastará con conocer el campo en las interfases y el punto medio y tercero, la definición de banda de aire y banda de medio, clásica del campo en arreglos fotónicos, es solamente una representación pues la definición citada frecuentemente, por ejemplo en [8], no es correcta, a diferencia de la solución para electrones en estructuras cristalinas, donde las bandas están asociadas a la energía promedio del electrón [4].

Siguiendo la descripción de Kalozoumis, la corriente escalada es definida como:

$$v_m \equiv \frac{Q_m}{E(z_m)E(z_{m+1})} \quad (96)$$

La suma de las corrientes escaladas, intercambiando el signo, es una cantidad global que sólo depende del campo y su derivada en los extremos.

$$\mathcal{L} \equiv \sum_{m=1}^N (-1)^{m-1} v_m = \frac{E'(z_0)}{E(z_0)} - (-1)^N \frac{E'(z_N)}{E(z_N)} \quad (97)$$

El campo eléctrico es en general complejo, por lo que en coordenadas polares:

$$\mathcal{L} = i[\varphi'(z_0) - (-1)^N \varphi'(z_N)] + \left[ \frac{E'(z_0)}{E_0(z_0)} - (-1)^N \frac{E'_0(z_N)}{E(z_N)} \right] \quad (98)$$

Para evaluar la ecuación global (98) considere que el campo es continuo en los extremos del arreglo fotónico, si  $T=1$  entonces  $E(z_0) = E(z_N)$  y  $E'(z_0) = E'(z_N) = 0$  y si la frecuencia de la onda transmitida e incidente es la misma:

$$\mathcal{L} = i[k_0 - (-1)^N k(z_N)] \quad (99)$$

En el caso de que el medio de incidencia sea el mismo que el medio transmitido,  $\mathcal{L} = (0, 2ik_0)$ . Entonces cualquier arreglo fotónico que tenga  $\mathcal{L} = (0, 2ik_0, i(k_0 \pm k_{z_N}))$  tendrá transmisión perfecta.

## II.VIII.v Alta transmitancia sin simetrías perfectas.

Garantizar la transmitancia perfecta en la condición de resonancia, desde el punto de vista algebraico, no requiere de una condición de simetría y, como se mostrará, en general, es posible un estado permitido aun cuando no existe ninguna.

Un caso reportado y más general de transmitancia perfecta es la secuencia de arreglos de Fibonacci conjugado, sin embargo, tiene simetría de largo alcance. Debe tenerse en mente que, en general, esos arreglos tienen transmitancia perfecta en frecuencias que no se encuentran dentro de la brecha fotónica.

### 1. Arreglos aleatorios.

Partiendo de la ecuación (82) y la conmutatividad de matrices diagonales: **todo arreglo compuesto por un número igual de bicapas  $n_1n_2$  y  $n_2n_1$  tendrá alta transmitancia.** Este arreglo no está reportado en la literatura, pero dada la facilidad para mostrar su validez, se describirá rápidamente. Primero la demostración por inducción matemática.

- 1) Si el número de bicapas es 1, el resultado es una microcavidad de un ciclo.

$$A_1 A_1' = n_1 n_2 n_2 n_1 = I$$

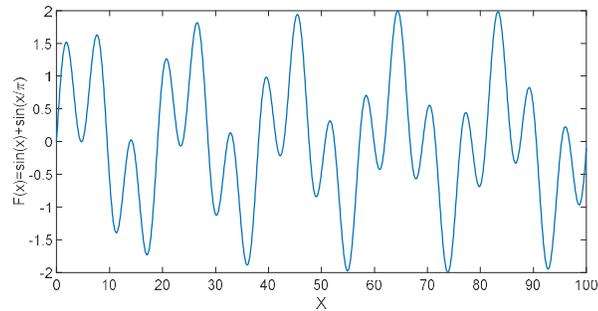
- 2) Suponiendo la validez para N.
- 3) Notando que en toda secuencia de bicapas siempre existe al menos una estructura con la secuencia:  $n_1 n_2 n_2 n_1$  o  $n_2 n_1 n_1 n_2$ .
- 4) Para el caso  $N + 1$ , al agregar la pareja de bicapas del punto anterior, dado que el producto de matrices es asociativo, siempre será posible eliminar al menos una pareja  $n_1 n_2 n_2 n_1$  o  $(n_2 n_1 n_1 n_2)$ , lo que reduce al sistema a un grupo de  $N$  parejas, demostrando la afirmación.

Lo anterior significa que para conseguir un arreglo de alta transmitancia en el centro de la brecha fotónica basta con ordenar al azar un conjunto de bicapas donde el número de bicapas  $n_1n_2$  y  $n_2n_1$  sea el mismo.

Un problema interesante es cuando el número de bicapas  $n_1n_2 > n_2n_1$ , donde en general no deberá haber alta transmitancia, entonces una alternativa es el formalismo de Kalozoumis, ya citado, pues el sobrante de capas formará un espejo de Bragg que tiene flujo de energía tendiente a 0, es decir,  $E(z_N) \approx 0$ , por lo tanto a partir de la condición de la ecuación (99):

$$\mathcal{L} = \frac{ik_0(e^{ik_0z_0} - re^{-ik_0z_0})}{e^{ik_0z_0} + re^{-ik_0z_0}} - (-1)^N \left( -\frac{ik(z_N)te^{-ik(z_N)z_N}}{te^{-ik(z_N)z_N}} \right) \quad (100)$$

$$\mathcal{L} \approx -k_0 \left( \frac{\sin(k_0z_0)}{\cos(k_0z_0)} \right) \quad (101)$$



**Figura II- 10** Superposición determinista de funciones armónicas  $f(x) = \sin(x) + \sin\left(\frac{x}{\pi}\right)$ . Es aparentemente periódica, sin embargo, no existe un vector tal que, al hacer una traslación un número entero de veces, se repita la fase.

$\mathcal{L} \approx 0$  en las raíces de la función seno, esto si antes del espejo de Bragg hay un cambio de fase de 0 o  $nk_0$ , que corresponden a las raíces de 0 y  $n\pi$  respectivamente.

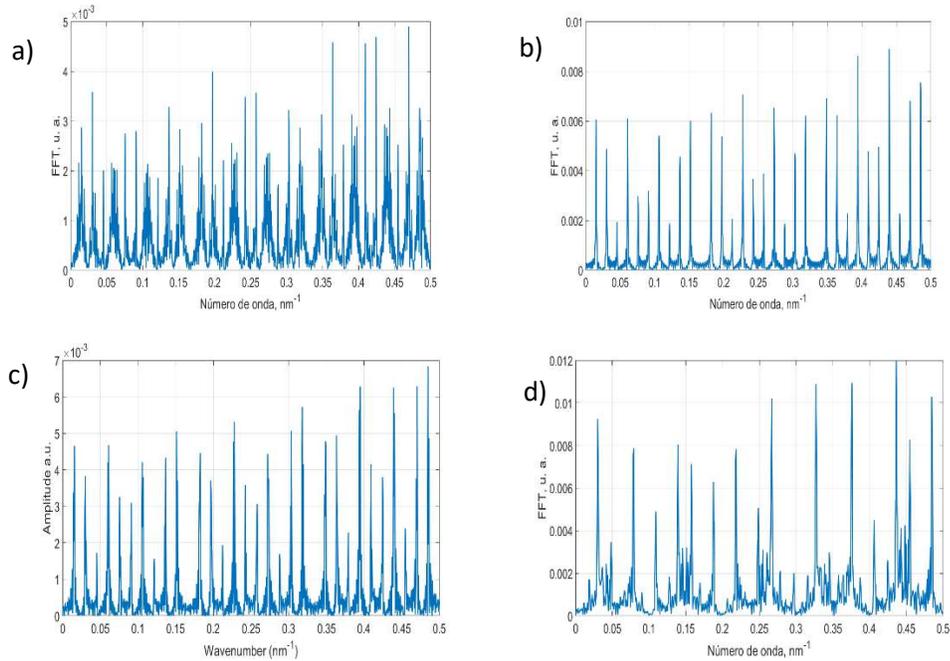
La desventaja de este formalismo es que la intensidad del campo dentro de un arreglo depende de toda la estructura, capítulo I. Es decir, es imposible calcular Q en general sin conocer la estructura completa antes de cualquier cálculo, por lo cual hasta este punto es imposible aplicar el método a partes del arreglo, caso distinto a la propuesta hecha en esta sección. El arreglo aleatorio es de los temas que se exploraron durante el doctorado y forma parte de los resultados, que corresponden al capítulo VI.

En los arreglos cuasi cristalinos o arreglos de Fibonacci, las propiedades de transmisión e intensidad del campo han sido ampliamente estudiados. Dado que no sólo tienen simetrías de largo alcance o espectros tipo fractal, sino que tienen una alta densidad en los bordes de las pseudobrechas que en general son más fáciles de reproducir experimentalmente, se convierten en un arreglo atractivo para dispositivos fotónicos.

## 2. Arreglos de Fibonacci

Un arreglo determinista tiene bien definidas las componentes espectrales, pero esas componentes no son conmensurables [17, 18], es decir no existe una relación racional entre los picos de la transformada de Fourier, como las soluciones armónicas que caracterizan a un arreglo cristalino. Sin embargo, la amplitud de la señal tiene un patrón aparentemente periódico. Una función determinista se muestra en la *Figura II- 10*.

El arreglo de Fibonacci es un caso particular de arreglo determinista, que se forma de una sucesión de capas en una secuencia análoga a los números de la serie de Fibonacci: 1, 1, 2, 3, 5, 8, 13, 21. Una propiedad importante de estos números es la razón entre elementos sucesivos, que tiende a un número irracional llamado número dorado  $\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{F_n}{F_{n-1}} = \frac{\sqrt{5}-1}{2} = 0.618033 \dots$ . El número dorado está asociado a las características fractales del arreglo, o a los factores de escalabilidad interna y externa [19].



**Figura II- 11** Derivada de las transformadas de Fourier de distintos arreglos de multicapas de función dieléctrica constante, a) Arreglo aleatorio, el espectro es una aproximación a ruido aleatorio, la aparente regularidad de la función es debida a la convolución propia de toda señal finita. b) Arreglo de Bragg, el espectro es el de una señal periódica o un conjunto de frecuencias armónicas. c) Microcavidad, el espectro muestra una ligera perturbación al arreglo de Bragg. d) El más interesante de los espectros el arreglo de Fibonacci, que muestra la existencia de picos bien definidos asociado a los estados localizados y a las simetrías de largo alcance.

En el caso del arreglo fotónico la  $n$ -ésima generación de la secuencia de Fibonacci se forma de la superposición de las dos generaciones anteriores  $S_n = [S_{n-1}S_{n-2}]$ , a las secuencias de capas iniciales se les llama generación 0 y generación 1, y en particular esas estructuras que pueden ser las capas simples A y B. Así, las primeras sucesiones de Fibonacci son:

$S_0$	A
$S_1$	B
$S_2$	BA
$S_3$	BAB
$S_4$	BABBA
$S_5$	BABBABAB
$S_6$	BABBABABBABBA
$S_7$	BABBABABBABBABABBABAB

Ya que no existe periodicidad en el arreglo o simetrías de traslación de corto alcance, no existen estados tipo Bloch, aunque si existen ondas que pueden transmitirse o localizarse, éstas son propias de las simetrías de largo alcance. Es interesante e ilustrativo comparar el comportamiento de la transformada de Fourier de los arreglos periódicos o espejos de Bragg y las microcavidades, que tienen espectros distribuidos armónicamente, *Figura II- 11*.

Una de las propiedades que sobresale de los arreglos cuasi cristalinos es que sus simetrías de largo alcance (representadas con picos en la transformada de Fourier) aparecen en generaciones pequeñas [19], en comparación con los picos de los arreglos cristalinos, que idealmente alcanzan su definición cuando la señal tiende a infinito.

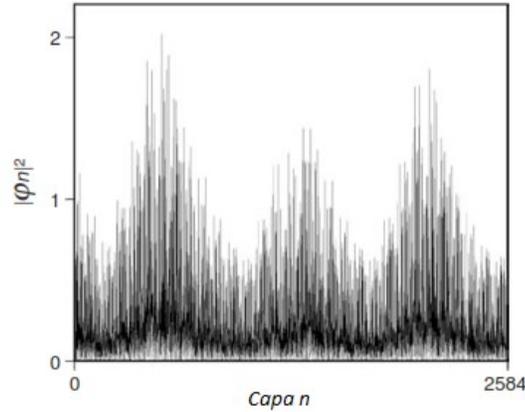
En la *Figura II- 11* se muestran los espectros de la derivada de la transformada de Fourier de muestras aleatoria y cristalinas a), b) y c), y la de Fibonacci d). El cálculo se hizo tomando en cuenta capas de 100 nm y la razón entre los índices de las capas es 3:2. Para interpretar la gráfica del espectro, es importante considerar que se trata del resultado de múltiples reflexiones, que en realidad deben representarse por deltas de Fourier multiplicadas por la reflectancia. Mientras más grande sea el espesor de las capas, mayor será la concentración de estados permitidos, en otras palabras, menor será la distancia entre los picos. Esa es la razón por la que se eligió un espesor pequeño. Por último, la distancia de muestreo está asociada al número de onda máximo y a su vez a la resolución, pues el número de puntos de los que se compone la función  $\varepsilon(z)$  determina la resolución en la transformada.

Dado que el arreglo es finito, para interpretar correctamente el espectro, es importante considerar el efecto de una ventana rectangular, la respuesta final será la convolución con la función  $\text{sinc}(k)$  [20]. Por esa razón puede aparecer una aparente periodicidad en todos los espectros. Además, dado que las regiones de índice constante son comunes a todos los arreglos, el pico de la menor frecuencia está presente en todas ellas. Sin embargo, se pueden comparar las respuestas.

La *Figura II- 11 a)* muestra el espectro de Fourier de un arreglo aleatorio, como se mencionó, la aparente regularidad del arreglo de ese espectro sigue el perfil de la función  $\text{sinc}^2(k)$ . Eso se debe a que la transformada de Fourier de una distribución aleatoria es ruido blanco.

La *Figura II- 11 b)* y la *Figura II- 11 c)* muestran los espectros de arreglos cristalinos, idénticos a los de un cristal unidimensional, es decir, bandas o picos angostos distribuidos armónicamente. De nuevo, el efecto de la modulación por la ventana cuadrada se hace presente. Para que no exista ese efecto se debe considerar un arreglo infinito. Los picos están asociados a estados de alta transmisión que además en el caso particular de los arreglos estudiados están asociados a campos localizados.

La *Figura II- 11 d)*, muestra el espectro de un arreglo de Fibonacci, donde se notan al menos dos características importantes: primero, la existencia de una simetría de largo alcance, es decir, que están presente picos bien definidos. Dichos picos, están asociados a estados localizados que no se distribuyen armónicamente a lo largo del espacio de Fourier, más bien siguen una secuencia fractal;



**Figura II- 12** Intensidad de la solución de la ecuación de onda en una estructura fotónica de Fibonacci, compuesta de 2584 capas, de un cuarto de longitud de onda y sin considerar la absorción. Figura de Sergey V. [7]

y segundo, que la dispersión de los picos es mucho más angosta que los picos en los arreglos simétricos.

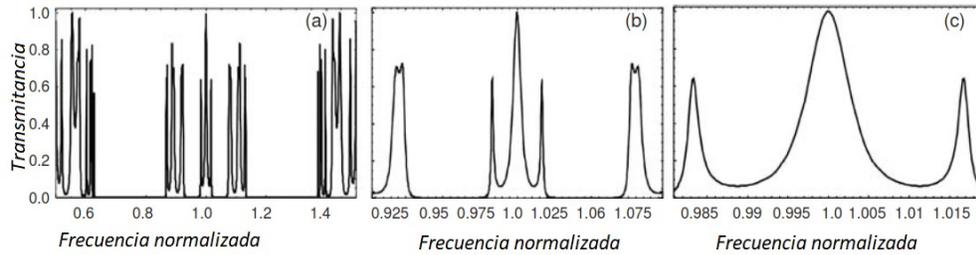
En cuanto a los estados de alta transmisión del campo, en los arreglos de Fibonacci, no comparten ninguna de las propiedades antes vistas en relación a un estado de alta transmitancia en la frecuencia de resonancia. Sin embargo, a pesar de que los arreglos de Fibonacci no permiten una solución de onda envolvente, que no tiene estados de transmisión perfecta, ni estados de campo extendido, ni estados de localización exponencial, propios de bandas continuas, ni puntos singulares de transmisión permitida, si cuentan con estados de alta transmitancia, pero a diferencia de los arreglos cristalinos, estos estados no forman una banda continua, más bien son estados aislados, es decir, justo como los arreglos fractales (arreglos tipo Cantor por ejemplo), forman bandas de estados aislados o bandas “continuo singulares” (*singular continuos band* [7]).

Estos estados de alta transmitancia tienen grandes fluctuaciones de campo y son denominadas estados de localización crítica. La *Figura II- 12* representa un estado de localización crítica para un arreglo de Fibonacci [7].

Con más detalle, como consecuencia de la falta de conmensurabilidad del arreglo, el espectro no cumple con la condición de periodicidad de un arreglo cristalino  $T(\omega) = T(\omega + m\omega) = T\left(\omega + \frac{mc8\pi n}{\lambda_0}\right)$ , donde  $m$  es un numero entero y  $d = \frac{\lambda_0}{4n}$  es la condición de camino óptico. Los arreglos de Fibonacci sin embargo cumplen con una condición de periodicidad (autosimilaridad) interna y una externa [21], la interna con un factor de 5.11 y la externa con una generación 6.

$$T_N\left(\omega_0 + \frac{\omega}{S}\right) \approx T_N(\omega_0 + \omega) \quad (102)$$

$$T_M\left(\omega_0 + \frac{\omega}{S}\right) \approx T_N(\omega_0 + \omega) \quad (103)$$



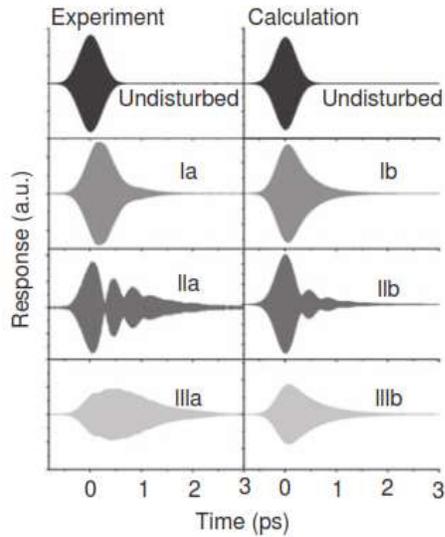
**Figura II- 13** Autosimilaridad aparente de estructuras de Fibonacci generación 10, recordando que mientras mayor sea la generación mayor será la autosimilaridad aparente. Las figuras a)-c) muestran la parte central del espectro a diferentes escalas con factores de 5.11 [22].

donde  $S$  es el factor de escala interno,  $N$  y  $M$  son las generaciones de Fibonacci que cumplen con la condición de  $N = 6m + M$ , la autosimilaridad se muestra en la Figura II- 13.

Los estados de localización crítica a bajas generaciones, la autosimilaridad y los estados aislados, han llamado la atención por sus posibles aplicaciones ópticas. Como consecuencia se han hecho estudios tratando de encontrar arreglos basados en la secuencia de Fibonacci que tengan comportamientos comunes con los arreglos cristalinos, por ejemplo, considerando la generación de estados de alta transmitancia en el centro de las brechas propios de la simetría de espejo. Como se discutió en la sección anterior, una forma de generar un estado de alta transmisión o transmisión casi perfecta en una distribución autosimilar, es ocupar la simetría de espejo en el arreglo de Fibonacci [23]. En esos estados, de forma similar a los arreglos cristalinos, hay un cambio en la magnitud del coeficiente de reflexión y un incremento en la densidad de estados, o lo que es equivalente, una reducción en la velocidad de propagación.

En general los cambios de reflectancia (picos en la transmitancia) corresponden a regiones de alta densidad de estados. Por esa razón se han estudiado los efectos de los ejes de las Pseudobrechas de arreglos de Fibonacci[24, 25], Dal Negro, por ejemplo, reporta el batimiento de pulsos de perfil Gaussiano de luz láser al reflejarse normalmente en un arreglo de Fibonacci en el borde de la pseudobrecha. En ese caso, las variaciones de la reflectancia están asociadas a un retardo diferenciado para cada longitud de onda. El experimento muestra un gran ajuste entre los espectros calculados teóricamente y los observados, *Figura II- 14*.

El método para obtener la respuesta esperada es considerar que el espectro de Fourier de la luz reflejada será el producto del perfil del pulso con la transformada de Fourier de la reflectancia. Para interpretar físicamente la observación debe recordarse que, en los ejes de las pseudobrechas de los arreglos de Fibonacci, la densidad de estados aumenta y que, de cumplirse, como en los arreglos cristalinos, que la densidad de estados está asociada al inverso de la velocidad de grupo, cada longitud de onda tendrá un retardo diferente.



**Figura II- 14** Batimiento de la intensidad de la luz al reflejarse en los ejes de la pseudobrecha de un arreglo de Fibonacci de generación 12 [24]

### 3. Arreglos de Fibonacci conjugado

El tema que origino este estudio fueron los efectos inducidos en los bordes de las pseudobrechas de los arreglos de Fibonacci conjugados, por esa razón una introducción a las propiedades de dichos arreglos es obligatoria.

Los arreglos de Fibonacci en secuencia conjugada son formados de la unión de dos arreglos de Fibonacci, donde uno es el conjugado del otro, es decir son idénticos excepto en que las capas B de uno de ellos son sustituidas por capas A y viceversa. El conjugando de las primeras series de Fibonacci, mostradas en la sección anterior son:

$S_0$	B
$S_1$	A
$S_2$	AB
$S_3$	ABA
$S_4$	ABAAB
$S_5$	ABAABABA
$S_6$	ABAABABAABAAB
$S_7$	ABAABABAABAABAABAABABA



$$T = \frac{4}{|M_j|^2 + 2} \quad (104)$$

donde  $|M_j|^2$  es la suma de los cuadrados de los cuatro elementos de la matriz de transferencia.

La ecuación corresponde a los espejos de Bragg, si el camino óptico de las capas es constante e igual a un medio de la longitud de onda, en ese caso la transmitancia será perfecta.

La constante de movimiento es:

$$I = x_{j+1}^2 + x_j^2 + x_{j-1}^2 - 2x_{j+1}x_jx_{j-1} - 1 \quad (105)$$

donde  $x_j = \frac{1}{2} \text{traza}(M_j)$ , de forma explícita.

$$I = \frac{1}{4} \sin^2 \delta_A \sin^2 \delta_B \left( \frac{n_A \cos \theta_A}{n_B \cos \theta_B} - \frac{n_B \cos \theta_B}{n_A \cos \theta_A} \right) \quad (106)$$

es nula en la condición de transmisión perfecta y máxima cuando el camino es de un cuarto de la longitud de onda. Con lo anterior y debido a que la matriz de transferencia es unimodal, la matriz de transferencia de cualquier arreglo de Fibonacci conjugado será el producto de matrices  $T_A$  y  $T_{A|B-B-B|A}$ :

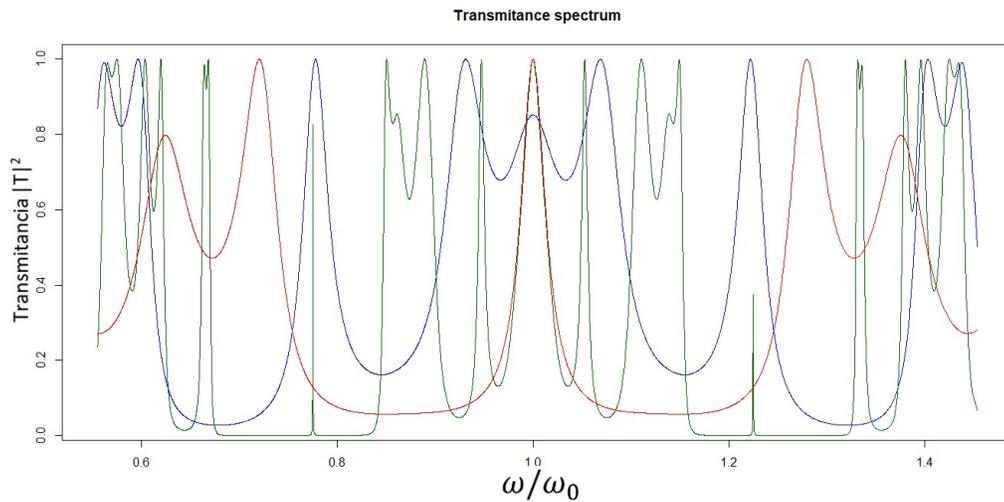
$$T_{A(B)} = \begin{pmatrix} \cos(k_0 n_A d_A \cos \theta_A) & -\sin(k_0 n_A d_A \cos \theta_A) \\ \sin(k_0 n_A d_A \cos \theta_A) & \cos(k_0 n_A d_A \cos \theta_A) \end{pmatrix} \quad (107)$$

$$T_{A|B-B-B|A} = \begin{pmatrix} \cos \delta_B & -u \sin \delta_B \\ u^{-1} \sin \delta_B & \cos \delta_B \end{pmatrix} \quad (108)$$

donde  $u = n_A \cos \theta_A / n_B \cos \theta_B$  y  $\delta_B = k_0 n_B d_B \cos \theta_B$ .

Suponiendo la unimodalidad, la transmitancia depende de la traza y la antitrazo:

$$T = \frac{4}{(M_{11} - M_{22})^2 + (M_{22} + M_{11})^2} \quad (109)$$



**Figura II-15** Estructuras de Fibonacci conjugadas con transmisión perfecta, en un medio de aire-aire. Para las generaciones  $G_5$  y  $G_8$  al menos una frecuencia de transmisión perfecta sucederá en el centro de la pseudobrecha, líneas roja verde respectivamente. Y para la generación  $G_6$ , línea azul, la transmisión será imperfecta en el centro de resonancia.

De tal forma que la transmisión perfecta sucederá cuando la traza del producto de las matrices sea  $\pm 2$ , es decir la matriz de transferencia es la identidad o la matriz de la secuencia de Fibonacci es la inversa de la conjugada. La *Figura II-15* muestra que esta condición no sucede necesariamente en el centro de la brecha del espejo de Bragg que se formaría usando las capas de un cuarto de camino óptico.

En general, la estructura cumple la condición de que la matriz sea la identidad para condiciones fuera de la condición de resonancia, mostrando que la transmitancia perfecta no está condicionada a una simetría de espejo [26]. Además de que los picos de alta transmitancia entre los arreglos de espejo y conjugado no coinciden, a pesar de que la estructura fractal y la constante de autosimilaridad siguen preservándose en ambos.

En el caso particular de generaciones  $2 + 3N$ , se observa que la estructura de Fibonacci tiene un total de capas  $N = N_{i-1} + N_i$ , por lo que los números, par o impar, de capas son cíclicos. Si la generación 0 es A y la generación 1 es B, entonces toda generación  $3N$  y  $3N + 1$  tendrán un número impar de capas y las generaciones  $2+3N$  tendrán un número par de capas. Dado que la unión entre una estructura y su estructura conjugada forma parejas completas, la unión cumplirá con las condiciones de un arreglo aleatorio para tener alta transmitancia, es decir se formará de bicapas AA, BB, AB y BA, con un número idéntico de capas AB y BA.

La secuencia Fibonacci conjugado para una generación impar cumplirá con tener un número de bicapas AB o BA extra, dependiendo de si la generación de Fibonacci, que es impar, termina en una capa A o B respectivamente. Es decir, todos los arreglos de Fibonacci con generación  $3N$  tendrán



$$\begin{aligned}
& \text{Im } \lambda \\
& = \ln \left( \frac{2 \cos^2(a\omega) - \sin^2(a\omega) \left( \frac{n_2}{n_1} + \frac{n_1}{n_2} \right) \pm \sqrt{\left( 2 \cos^2(a\omega) - \sin^2(a\omega) \left( \frac{n_2}{n_1} + \frac{n_1}{n_2} \right) \right)^2 - 4}}{2} \right) \quad (111)
\end{aligned}$$

La constante de decaimiento en la región prohibida alcanza un máximo en la condición de resonancia. Y las funciones  $S_N$  tienden exponencialmente a 0, del mismo modo que lo hace la transmitancia.

$$S_N^2 = \left[ \frac{\sinh(N \text{Im } \lambda)}{\sinh(\text{Im } \lambda)} \right]^2 \propto T \quad (112)$$

## II.X Efectos del número de capas.

Cuando el índice de refracción de las capas es complejo:  $n_a = n_{ra} + ik_a$  y  $n_b = n_{rb} + ik_b$ , la condición de transmisión, la reflectancia y la traza del sistema son complejos, ecuaciones (85), (86) y (87). En ese caso, tanto la reflectancia como la transmitancia alcanzan un máximo, por lo que llegará un punto en el cual, al agregar bicapas a un espejo de Bragg, no hay un incremento en la magnitud. Para estimar el número de bicapas en que sucederá esto, basta con observar cuando la forma compleja deja de influir en la función  $\sigma_n$

$$\sigma_n = \cos \phi - \sin \phi \cot N\phi \quad (113)$$

Si  $\phi = \phi_r + i\phi_i$ , entonces [27]

$$\cot N\phi = \frac{\cos N\phi_r \cosh N\phi_i - i \sin N\phi_r \sinh N\phi}{\sin N\phi_r \cosh N\phi_i + i \cos N\phi_r \sinh N\phi} \quad (114)$$

$$\cot N\phi = \frac{\cos N\phi_r (1 + e^{-2N\phi_i}) - i \sin N\phi_r (1 - e^{-2N\phi_i})}{\sin N\phi_r (1 + e^{-2N\phi_i}) + i \cos N\phi_r (1 - e^{-2N\phi_i})} \quad (115)$$

$$\cot N\phi = -i + \mathcal{O}(e^{-2N\phi_i}) \quad (116)$$

Por lo que la influencia de la absorción en la función  $\sigma_n$  decae exponencialmente con el número de capas, lo mismo sucederá con la reflectancia.

$$\sigma_n = e^{-i\phi} + \mathcal{O}(e^{2N\phi_i}) \quad (117)$$

Eso implica que la influencia de la parte imaginaria del índice de refracción en la reflectancia de los espejos de Bragg se reduce exponencialmente, que no implica que el material no absorba, sino que,

superado ese número de capas, los estados de transmisión perfecta (o alta transmitancia, en dependencia con las condiciones de frontera) ya no conservarán esa propiedad. La reflectancia máxima [12], menor a 1, a la que tenderá la reflectancia al incrementar el número de capas en la longitud de onda de resonancia es:

$$R(\lambda_0) = 1 - \frac{2\phi n_1(k_a + k_b)}{n_{ra}^2 - n_{rb}^2} + \mathcal{O}(k_a^2, k_a k_b, k_b^2) \quad (118)$$

## II.XI Densidad de estados.

Los cambios en la vida media de la emisión de fuentes luminiscentes y el acoplamiento fuerte de los polaritones de partículas luminiscentes con los modos asociados a un arreglo fotónico dependen directamente de las probabilidades de transición, en otras palabras, dependen de las densidades de estados [16]. En general los fenómenos derivados de la interacción luz-materia están relacionados con la densidad de estados, por ejemplo ver la referencia [28] y sus referencias.

El estudio de la densidad de estados es un tema interesante, ya que frecuentemente está ligado al origen de los efectos observables inducidos por arreglos fotónicos. Para estudiar la densidad de estados en una estructura, se la puede considerar como una inhomogeneidad en el espacio, ver S. V. Shukovsky [29] y sus referencias.

Un sistema espacialmente finito (un resonador cerrado o de paredes infinitas) tiene eigenvalores o niveles de energía permitidos discretos. Al incrementar la energía, la diferencia de energías entre estados sucesivos disminuye continuamente, hasta formar una distribución densa de estados. Así, la densidad de estados puede interpretarse como el número de estados discretos permitidos por unidad de energía (recordando que los arreglos de Fibonacci tienen bandas singulares que cumplen con esta condición). En una inhomogeneidad finita en un espacio infinito la densidad de estados pasa a ser una función continua  $\rho(\omega)$ .

El cambio de la densidad de estados, respecto al vacío  $\Delta\mathcal{N}(E)$ , es proporcional a la derivada del cambio de fase acumulado por el paquete de ondas durante la transmisión por la inhomogeneidad, es decir:

$$\Delta\mathcal{N}(E) = \frac{1}{\pi} \left( \frac{d\varphi}{dE} \right) \quad (119)$$

En el caso unidimensional, el cambio de la densidad de estados está descrito por la derivada de la fase de la transmisión:

$$\Delta\mathcal{N}(\omega) = \frac{1}{\pi} \frac{d(\varphi - \varphi_0)}{d\omega} \quad (120)$$

La densidad de estados debe cumplir restricciones de Barnett y Loudon [30], es decir, la integral de la densidad de estados entre frecuencias alta transmisión (condición de resonancia  $\lambda/2$ ) es constante. Por otro lado, si se remueve la inhomogeneidad  $\Delta\mathcal{N}(\omega) = 0$ , lo anterior implica que la integral en todas las frecuencias del espectro, del cambio de densidad de estados, siempre es nulo

$$\int_0^{\infty} \Delta \mathcal{N}(\omega) d\omega = 0 \quad (121)$$

En ausencia de cualquier inhomogeneidad, la ecuación para  $\rho(\omega)$  deberá ser la densidad en el vacío, es decir,  $1/c$ . Dado que la densidad de estados es inversamente proporcional a la velocidad de grupo [13]  $\rho(\omega) = \partial \vec{k} / \partial \omega$ , donde  $\vec{k}$  es el vector de cambio de fase, si el tamaño del arreglo fotónico es  $D$ , entonces el cambio de fase de la onda viajando en el vacío esa distancia será  $\omega D/c$ , por lo que si se define:

$$\rho(\omega) = \frac{d\phi}{d\omega} \frac{1}{D} \quad (122)$$

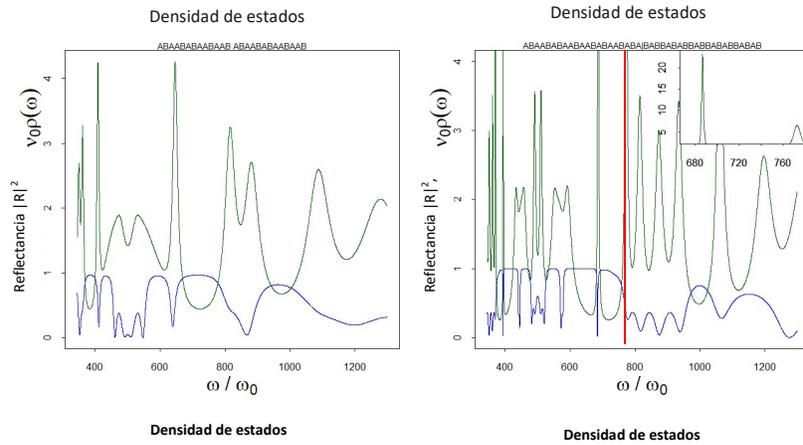
se cumple con las condiciones impuestas, de esa forma la densidad de estados será calculada en función de la parte imaginaria y real del coeficiente de transmisión  $T(\omega)$  pues  $\phi = \tan(\mathcal{J}(T)/\mathcal{R}(T))$ :

$$\rho(\omega) = \frac{\frac{d\mathcal{J}(T(\omega))}{d\omega} \mathcal{R}(T(\omega)) - \mathcal{J}(T(\omega)) \frac{d\mathcal{R}(T(\omega))}{d\omega}}{D|T(\omega)|^2} \quad (123)$$

La validez de la ecuación (123) se limita a arreglos unidimensionales en los que se puede despreciar la absorción. Además, se sigue cumpliendo con la condición observada en la literatura, la transmitancia  $|T(\omega)|^2 \propto \rho(\omega)$ , es decir que comparten picos [31], sin embargo, los picos de la transmitancia tienen un valor máximo de 1 y los de la densidad de estados están limitados únicamente por la ecuación (121), es decir, mientras más anchas sean las regiones prohibidas, mayor será la densidad de estados acumulada en una región espectral.

Además, mientras mayor sea la transmitancia alrededor de la frecuencia de resonancia y más angosta sea la región permitida, mayor será el valor de la densidad de estados. Cualitativamente mientras más les cueste entrar a las ondas con energía en los bordes de las bandas en la estructura, mayor será la densidad de estados y la amplitud de campo resonante en la región de alta transmisión. Eastham muestra que el perfil del campo depende de la forma de atenuación del campo dentro de los espejos de Bragg, más que de la posición de la resonancia [11].

Para elegir la estructura que usaremos en las pruebas experimentales, se hará el ajuste de la región disponible con mayor densidad de estados que sea posible reproducir. Para ilustrarlo se muestran las densidades de estado de las estructuras de Fibonacci conjugado junto con la reflectancia en función de la longitud de onda, *Figura II-16*.



**Figura II-16** Reflectancias y densidades de estados presentes en las regiones de alta transmitancia, para materiales sin absorción. La intensidad del campo localizado tiene que ver con la caída de reflectancia, mientras mayores sean las regiones prohibidas y exista una alta transmitancia mayor será la densidad de estados [11]. a) generación 6, b) Generación 7. La línea roja indica la posición del máximo de densidad de estados en el borde de la brecha.

## II.XII Factor de Purcell.

La emisión espontánea de luz depende tanto de las propiedades intrínsecas de los átomos, moléculas, partículas, nanocristales, etc., como de las condiciones del medio en que estén localizados físicamente, es decir, del entorno fisicoquímico.

En una cavidad óptica, la probabilidad de emisión y el tiempo de vida media a una frecuencia determinada, es proporcional a la densidad de estados, obedeciendo la predicción de Purcell [32]. La emisión espontánea de un fotón tiene una energía definida por el cambio de energía de las funciones de onda de los electrones en los estados inicial y final. Conocer dicha solución no implica describir por completo la probabilidad de transición, pues no hay nada en ella que obligue al sistema a cambiar espontáneamente. El origen de la emisión requiere del estudio de la electrodinámica cuántica, en 1930 Weisskopf y Wigner describieron exitosamente ese fenómeno, ellos demostraron que la tasa de emisión espontánea en el vacío es:

$$\Gamma_0 = \frac{\omega_0^3 \mu_{12}^2}{3\pi \epsilon_0 \hbar c^3} \quad (124)$$

donde  $\hbar\omega_0$  es la diferencia de energía entre el estado inicial y final y  $\mu_{12}$  es el elemento de la matriz dipolar entre esos estados.

Esa tasa es el inverso al tiempo de vida media, sin embargo, repetir los cálculos de Weisskopf-Wigner para emisores que no están en el vacío resulta en una tasa distinta [33].

$$\Gamma_g = \frac{2\pi \mu_{12}^2 E_0^2}{\hbar^2} \rho(\omega_0) \quad (125)$$

donde  $E_0$  es el campo eléctrico generado por un sólo fotón en la posición del emisor y  $\rho(\omega_0)$  es el número de modos electromagnéticos, por unidad de frecuencia y por unidad de volumen, disponibles para que haya emisión (tomando en cuenta la orientación de la transición dipolar relativa a los modos de polarización). Es decir, la emisión es proporcional al campo eléctrico que produce el mismo emisor en su propia localización.

En 1946 Purcell propuso que la emisión de un átomo es modificada en una cavidad. La razón entre las tasas de emisión en la cavidad y el vacío es el factor de Purcell. Si la frecuencia de resonancia de una microcavidad es la frecuencia de máxima emisión (frecuencia de energía de transición) del emisor, localizado en la región de máxima amplitud de campo, con polarización paralela al plano transversal de la cavidad y si el ancho de banda de emisión es menor al ancho de banda de estados permitidos de la microcavidad, el factor de Purcell es:

$$F_p = \frac{\Gamma_g}{\Gamma_0} = \frac{3Q\lambda^3}{4\pi^2 V_0} \quad (126)$$

donde  $\lambda$  es la longitud de onda asociada con la transición,  $Q$  es el factor de calidad de la cavidad y  $V_0$  es su volumen. Esto implica que, para incrementar la tasa de emisión, es necesario confinar el campo en estructuras *lo más pequeñas posibles que retengan la luz por un largo periodo* (recordando que la densidad de estados es proporcional a la velocidad de grupo solamente en arreglos con simetría de corto alcance o estados permitidos tipo Bloch [29]).

Una alternativa son los arreglos fotónicos, que en nuestro caso tienen dimensiones por encima del límite de difracción, aproximadamente  $0.1 \left(\frac{\lambda_0}{n}\right)^3$  [33], donde  $\lambda_0$  es la longitud de onda del vacío y  $n$  el índice de refracción del defecto de la microcavidad (tomando en cuenta a los emisores).

Este factor es la reducción del tiempo en la vida media y siempre es mayor a 1. Debe tomarse en cuenta que, además de los cambios inducidos por la densidad de estados, hay otros cambios a tomar en cuenta, como son: procesos de extinción asociados tanto a cambios producidos por la interacción de estados excitados con la superficie, el atrapamiento de cargas ( $\Gamma_{ex}^{em}$ ), cambios en la tasa de decaimiento en presencia de la estructura, pero sin tomar en cuenta la interacción con ésta, es decir la distribución de los emisores y la presencia dieléctrica, pero ignorando procesos de acoplamiento dipolares ( $\Gamma'_0$ ) y procesos no radiativos presentes en la ausencia de la cavidad ( $\Gamma_{nr}^{em}$ ), entre otros, en ese caso  $\Gamma_{tot} = \Gamma'_0 + \Gamma_{nr}^{em} + \Gamma_{ex}^{em}$ .

Cuando la eficiencia de radiación es pequeña en comparación con los efectos propios del emisor para disipar energía, la eficacia máxima puede aumentarse o reducirse:

$$Q_e = \frac{\Gamma_0}{\Gamma_0 + \Gamma_{nr}^{em}} \quad (127)$$

Cuando las partículas tienen eficiencias cercanas al 100%, como es el caso de los puntos cuánticos, la eficiencia sólo puede aumentarse.

En microcavidades los tiempos de vida media han sido aumentados por factores pequeños, donde el factor de Purcell es del orden de 1.4 [33] o en factores un poco mayores tratándose de estructuras

porosas [34]. En un cristal fotónico en dos dimensiones también hay muchos ejemplos con un factor de Purcell hasta de 8 [35].

Sin embargo, debe tenerse cuidado al analizar los datos experimentales, si lo único comparado es la intensidad y la distribución espectral de la luz emitida, el incremento resultante no necesariamente se deberá al factor de Purcell, pues el campo de la señal que excita está localizado en la región espacial donde están los emisores (puntos cuánticos), originando un incremento en la absorción y por lo tanto un incremento en la emisión.

Es posible sobrellevar este problema midiendo la respuesta en un sistema saturado, en ese caso los cambios en la luminiscencia serán independientes de la intensidad de la señal incidente [34]. Sin embargo, existe el riesgo de que los puntos cuánticos sean dañados o lo que es más probable en nuestro caso, que la estructura de PSi se degrade.

Otra alternativa es medir el espectro de emisión, efecto relacionado con cambios en la densidad de estados, la desintonización (*detuning*) de la señal original del emisor, donde el máximo de emisión cambia dentro de la región con estados permitidos en las estructuras. Sin embargo, este efecto también está relacionado con la distribución de los emisores, por esa razón la forma más confiable de observar un efecto debido al factor de Purcell es la caracterización de los tiempos de relajación del sistema.

## Bibliografía

- [1] M. Maksimovic, M. Hammer, y E. van Groesen, «Coupled optical defect microcavities in 1D photonic crystals and quasi-normal modes», San Jose, CA, feb. 2008, p. 689603, doi: 10.1117/12.762652.
- [2] M. Ghulinyan, «One-dimensional photonic quasicrystals», *ArXiv150502400 Cond-Mat Physicsphysics*, may 2015, Accedido: ago. 17, 2020. [En línea]. Disponible en: <http://arxiv.org/abs/1505.02400>.
- [3] S. Kaushik, «Vector Fresnel equations and Airy formula for one-dimensional multilayer and surface-relief gratings», *J. Opt. Soc. Am. A*, vol. 14, n.º 3, p. 596, mar. 1997, doi: 10.1364/JOSAA.14.000596.
- [4] C. Kittel, *Introduction to solid state physics*. New Delhi: Wiley Eastern Limited, 1976.
- [5] J. D. Joannopoulos, Ed., *Photonic crystals: molding the flow of light*, 2nd ed. Princeton: Princeton University Press, 2008.
- [6] M. Born y E. Wolf, *Principles of optics: electromagnetic theory of propagation, interference and diffraction of light*, 6th ed. Oxford ; New York: Pergamon Press, 1980.
- [7] S. V. Gaponenko, *Introduction to Nanophotonics*. Cambridge: Cambridge University Press, 2010.
- [8] S. G. Johnson y J. D. Joannopoulos, «Introduction to Photonic Crystals: Bloch's Theorem, Band Diagrams, and Gaps (But No Defects)», p. 16.
- [9] I. Kriegel y F. Scotognella, «Indium Tin Oxide Nanoparticle: TiO<sub>2</sub>: Air Layers for One-Dimensional Multilayer Photonic Structures», *Appl. Sci.*, vol. 9, n.º 12, p. 2564, jun. 2019, doi: 10.3390/app9122564.
- [10] P. Yeh, *Optical waves in layered media*. Hoboken, NJ: Wiley, 2005.
- [11] «Nanophotonics I: Quantum Theory of Microcavities - School of Physics - Trinity College Dublin». <https://www.tcd.ie/Physics/research/groups/qlamg/teaching/nanophotonics.php> (accedido ene. 31, 2021).
- [12] J. Lekner, *Theory of Reflection*, vol. 87. Cham: Springer International Publishing, 2016.
- [13] S. V. Zhukovsky, «Perfect transmission and highly asymmetric light localization in photonic multilayers», *Phys. Rev. A*, vol. 81, n.º 5, p. 053808, may 2010, doi: 10.1103/PhysRevA.81.053808.
- [14] W. T. Silfvast, *Laser Fundamentals*, 2.ª ed. Cambridge University Press, 2004.
- [15] P. A. Kalozoumis, C. Morfonios, N. Palaodimopoulos, F. K. Diakonou, y P. Schmelcher, «Local symmetries and perfect transmission in aperiodic photonic multilayers», *Phys. Rev. A*, vol. 88, n.º 3, p. 033857, sep. 2013, doi: 10.1103/PhysRevA.88.033857.
- [16] J. Tang, A. Ren, Z. Zhou, y Y. S. Zhao, «Strong Exciton–Photon Coupling in Dye-Doped Polymer Microcavities», *Macromol. Mater. Eng.*, vol. 305, n.º 10, p. 2000456, oct. 2020, doi: 10.1002/mame.202000456.
- [17] R. A. Solorzano Kraemer, *Periodizando los cuasicristales: dinámica en un gas de Lorentz cuasiperiódico/Tesis de doctorado*. UNAM, 2014.
- [18] J. E. S. Socolar y P. J. Steinhardt, «Quasicrystals. II. Unit-cell configurations», *Phys. Rev. B*, vol. 34, n.º 2, pp. 617-647, jul. 1986, doi: 10.1103/PhysRevB.34.617.
- [19] E. Maciá, «Optical engineering with Fibonacci dielectric multilayers», *Appl. Phys. Lett.*, vol. 73, n.º 23, pp. 3330-3332, dic. 1998, doi: 10.1063/1.122759.
- [20] D. Sundararajan, *The Discrete Fourier Transform: Theory, Algorithms and Applications*. WORLD SCIENTIFIC, 2001.

- [21] Z. Xiao y Z. Wang, «Propagation property of electromagnetic waves in fractal Cantor photonic crystals», *Optoelectron. Lett.*, vol. 3, n.º 4, pp. 318-320, jul. 2007, doi: 10.1007/s11801-007-6168-2.
- [22] S. V. Gaponenko, S. V. Zhukovsky, y A. V. Lavrinenko, «Electromagnetic waves in fractal nanostructures», San Diego, California, USA, ago. 2006, p. 632813, doi: 10.1117/12.682348.
- [23] X. Q. Huang, S. S. Jiang, R. W. Peng, y A. Hu, «Perfect transmission and self-similar optical transmission spectra in symmetric Fibonacci-class multilayers», *Phys. Rev. B*, vol. 63, n.º 24, p. 245104, may 2001, doi: 10.1103/PhysRevB.63.245104.
- [24] L. Dal Negro *et al.*, «Light Transport through the Band-Edge States of Fibonacci Quasicrystals», *Phys. Rev. Lett.*, vol. 90, n.º 5, p. 055501, feb. 2003, doi: 10.1103/PhysRevLett.90.055501.
- [25] V. Pellegrini, A. Tredicucci, C. Mazzoleni, y L. Pavesi, «Enhanced optical properties in porous silicon microcavities», *Phys. Rev. B*, vol. 52, n.º 20, pp. R14328-R14331, nov. 1995, doi: 10.1103/PhysRevB.52.R14328.
- [26] R. Nava, J. Tagüeña-Martínez, J. A. del Río, y G. G. Naumis, «Perfect light transmission in Fibonacci arrays of dielectric multilayers», *J. Phys. Condens. Matter*, vol. 21, n.º 15, p. 155901, abr. 2009, doi: 10.1088/0953-8984/21/15/155901.
- [27] J. Lekner, «Reflection by absorbing periodically stratified media», *J. Opt.*, vol. 16, n.º 3, p. 035104, mar. 2014, doi: 10.1088/2040-8978/16/3/035104.
- [28] S. V. Gaponenko, «Effects of photon density of states on Raman scattering in mesoscopic structures», *Phys. Rev. B*, vol. 65, n.º 14, p. 140303, mar. 2002, doi: 10.1103/PhysRevB.65.140303.
- [29] S. V. Zhukovsky y S. V. Gaponenko, «Constraints on transmission, dispersion, and density of states in dielectric multilayers and stepwise potential barriers with an arbitrary layer arrangement», *Phys. Rev. E*, vol. 77, n.º 4, p. 046602, abr. 2008, doi: 10.1103/PhysRevE.77.046602.
- [30] S. M. Barnett y R. Loudon, «Sum Rule for Modified Spontaneous Emission Rates», *Phys. Rev. Lett.*, vol. 77, n.º 12, pp. 2444-2446, sep. 1996, doi: 10.1103/PhysRevLett.77.2444.
- [31] K. Ohtaka, «Density of states of slab photonic crystals and the laser oscillation in photonic crystals», *J. Light. Technol.*, vol. 17, n.º 11, pp. 2161-2169, nov. 1999, doi: 10.1109/50.803007.
- [32] E. M. Purcell, H. C. Torrey, y R. V. Pound, «Resonance Absorption by Nuclear Magnetic Moments in a Solid», *Phys. Rev.*, vol. 69, n.º 1-2, pp. 37-38, ene. 1946, doi: 10.1103/PhysRev.69.37.
- [33] M. Pelton, «Modified spontaneous emission in nanophotonic structures», *Nat. Photonics*, vol. 9, n.º 7, pp. 427-435, jul. 2015, doi: 10.1038/nphoton.2015.103.
- [34] J. Wenger *et al.*, «Emission and excitation contributions to enhanced single molecule fluorescence by gold nanometric apertures», *Opt. Express*, vol. 16, n.º 5, p. 3008, 2008, doi: 10.1364/OE.16.003008.
- [35] D. Englund *et al.*, «Controlling the Spontaneous Emission Rate of Single Quantum Dots in a Two-Dimensional Photonic Crystal», *Phys. Rev. Lett.*, vol. 95, n.º 1, p. 013904, jul. 2005, doi: 10.1103/PhysRevLett.95.013904.

## Capítulo III.

### Puntos cuánticos

#### Resumen

La tecnología de los puntos cuánticos los ha colocado en un lugar preferente como emisores de luz, debido a la alta eficiencia de emisión y a la capacidad para modificar el espectro de emisión a partir del control del tamaño del cristal. Esas características los convierten en un medio altamente atractivo para activar estructuras de silicio poroso, siempre que el tamaño de poro sea lo suficientemente grande para contenerlos [1]. En este capítulo se hace una introducción al modelo de emisión de los puntos cuánticos.

La revisión parte de la descripción de la radiación de cuerpo negro como un proceso de emisión térmica asociado naturalmente a las densidades de estados, seguido por los coeficientes de Einstein, para visualizar cómo se describe el proceso de emisión espontánea a partir de la condición de emisión térmica. Por último, se revisa el proceso de emisión de puntos cuánticos esféricos, a partir de sus estados ligados, relacionando la dimensión del punto cuántico con las transiciones permitidas y las características de emisión.

### III.I Emisión de cuerpo negro.

Se define un cuerpo negro como un objeto que absorbe toda la radiación que incide en su superficie. Directamente de la definición se deduce que, en equilibrio térmico, un cuerpo negro no solo debe absorber, si no que emite la radiación de forma perfecta, eso quiere decir que emite la misma cantidad de energía que absorbe. La distribución espectral de la emisión depende únicamente de la temperatura, y la intensidad emitida por intervalo de frecuencias  $d\nu$  es:

$$i_\nu = \frac{8\pi h \nu^3}{c_0^3 \left( e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1 \right)} \quad (1)$$

donde  $k$  es la constante de Boltzmann,  $h$  es la constante de Planck,  $T$  es la temperatura y  $c_0$  es la velocidad de la luz en el vacío [2].

La ecuación (1) sigue siendo válida si el índice de refracción del medio cambia poco con respecto al vacío,  $n \approx 1$ . En caso contrario, dado que la longitud de onda se ve modificada por el índice de refracción  $\lambda = \lambda_0/n$ , la emisión por longitud de onda pasa a ser:

$$e_\lambda d\lambda = \frac{8\pi hc^2}{\lambda^5 \left( e^{\frac{hc}{\lambda kT}} - 1 \right)} d\lambda = \frac{8\pi n^2 hc_0^2 \nu^3}{c_0^4 \left( e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1 \right)} d\nu \quad (2)$$

donde  $c$  es la velocidad de la luz en el medio.

La ecuación 2 se puede explicar intuitivamente si se considera que la densidad de energía de radiación está en función de la intensidad, es decir, en un volumen en equilibrio térmico  $dE = u_\nu(\Omega) dA c dt d\Omega d\nu$ , donde  $u_\nu(\Omega)$  es la densidad de energía por unidad de ángulo sólido  $d\Omega$ ,  $dA c dt$  es el volumen de un cilindro con sección transversal  $dA$  que atraviesa un rayo de luz y  $dE = I_\nu(\Omega) dA dt d\Omega d\nu$ . Por lo que  $u_\nu(\Omega) = I_\nu(\Omega)/c$  [3].

Cuando Planck dedujo esta ecuación empleó como modelo de transición a la densidad de estados. Esta función generalmente se asocia a los modos permitidos en un volumen rectangular con frontera de reflectancia 1. La solución para los modos dentro de la caja cumple la condición para el vector de onda:  $\vec{k} = \frac{n\pi}{L_x} \hat{i} + \frac{m\pi}{L_y} \hat{j} + \frac{l\pi}{L_z} \hat{k}$ , esto implica que, para una onda plana, la función de dispersión es  $\omega^2 = c^2(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)$ .

En el espacio  $k$ , los modos permitidos se representan como un punto con coordenadas enteras y la magnitud del vector de onda es proporcional a la magnitud del vector de posición en ese espacio. Así el número de vectores de onda, con la misma polarización lineal, en una región  $r$  a  $r + dr$  es equivalente a dos octavos del volumen del espacio  $k$  asociado

$$dN(k) = \pi r^2 dr$$

Dado que  $k = \frac{\pi r}{L} = \frac{2\pi\nu}{c}$  entonces

$$dN(k) = \frac{L^3}{\pi^2} k^2 dk = \frac{V}{\pi^2} k^2 dk = \frac{8\pi v^2 V}{c^3} dv \quad (3)$$

La densidad de estados, modos, etc., para diferentes grados de libertad, en función de una variable cualquiera, se calcula por el producto de la función  $D(k)$ , definida a modo, con el diferencial del vector de onda respecto a la variable requerida.

$$D_3(k) = \frac{k^2}{2\pi^2}, \quad D_2(k) = \frac{k}{2\pi}, \quad D_1(k) = \frac{1}{\pi} \quad (4)$$

$$D(\omega) = D(k) \frac{dk}{d\omega}, \quad D(E) = D(k) \frac{dk}{dE}, \quad D(p) = D(k) \frac{dk}{dp}, \quad D(\lambda) = D(k) \frac{dk}{d\lambda} \quad (5)$$

En equilibrio térmico la energía por unidad de volumen será el número de estados multiplicado por la energía de esos estados, y su diferencial será la densidad de estados por energía promedio:

$$du = dN(v)\bar{E} = \frac{8\pi v^2}{c^3} \bar{E} dv. \quad (6)$$

De la distribución de Boltzman se deduce que  $\bar{E} = \frac{hv}{e^{hv/kT}-1}$  [4], es decir, la emisión de un fotón está asociada a la densidad de estados disponibles y a la probabilidad de que haya una partícula con la energía de ese fotón en el cuerpo negro.

### III.II Coeficientes de Einstein.

Cuando un conjunto de átomos o moléculas están en presencia de un campo de radiación, que puede excitar sus estados base, el decaimiento espontaneo se describe a partir de las probabilidades de emisión y absorción macroscópicas, o los tres coeficientes de Einstein, que no describen el comportamiento de un solo átomo, sino del conjunto.

El primer coeficiente, o coeficiente de emisión espontánea entre dos niveles de energía  $E_2$  y  $E_1$ :  $A_{21}$ , está asociado al proceso de emisión en una dirección arbitraria, o al tiempo de vida media del proceso de emisión:

$$\tau = \ln(2) / A_{21} \quad (7)$$

El coeficiente de emisión,  $j_\nu$ , se obtiene de multiplicar el coeficiente  $A_{21}$  por la densidad de partículas en el nivel superior  $n_2$ , por la energía emitida y dividir entre todos los ángulos disponibles de emisión, entonces, sin tomar en cuenta el perfil:

$$j_\nu = \frac{n_2 A_{21}}{4\pi} h\nu_{21} \quad (8)$$

El segundo coeficiente, coeficiente  $B_{12}$ , está asociado con la absorción. En general, la absorción depende de la intensidad o número de fotones que pueden excitar al átomo, y la población en los niveles de energía. Por lo que:

$$\dot{n}_2 = -\dot{n}_1 = n_1 I(\nu, \Omega) B_{12} \quad (9)$$

donde  $\dot{n}_2$  es el cambio de población en el segundo nivel, y suponiendo que solo hay intercambio de electrones entre el nivel 1 y 2, será el inverso del cambio en el nivel 1.

El tercer coeficiente,  $B_{21}$ , es un coeficiente que balancea las ecuaciones o coeficiente de emisión estimulada.  $B_{21}$  está asociado a la emisión de un fotón estimulada por la presencia de un fotón. El cambio de partículas en el estado superior será proporcional a la intensidad y al coeficiente  $B_{21}$ .

$$\dot{n}_1 = -\dot{n}_2 = n_2 B_{21} I(\nu, \Omega) \quad (10)$$

En equilibrio térmico el número de fotones emitidos y absorbidos debe ser el mismo, por lo tanto:

$$n_2 A_{21} = (n_1 B_{12} - n_2 B_{21}) I(\nu) \quad (11)$$

Dado que la ocupación de niveles energéticos disponibles en el cuerpo negro sigue la distribución de Boltzman:

$$\frac{n_1}{n_2} = \frac{g_1}{g_2} e^{h\nu/kT} \quad (12)$$

donde  $g_1$  y  $g_2$  se refieren a los pesos estadísticos de los niveles, la radiación, o el campo de emisión, está dada por la ecuación de Planck.

$$I(\nu) = \frac{dN(\nu)h\nu}{e^{h\nu/kT} - 1} \quad (13)$$

Por lo tanto:

$$I(\nu) = \frac{A_{21}}{\left(\frac{n_1}{n_2} - \frac{B_{21}}{B_{12}}\right) B_{12}} = \frac{dN(\nu)h\nu}{e^{h\nu/kT} - 1} \quad (14)$$

La igualdad se cumple si:

$$\begin{aligned} g_1 B_{12} &= g_2 B_{21} \\ A_{21} &= h\nu dN(\nu) B_{21} \end{aligned} \quad (15)$$

Es decir que conocer uno de los coeficientes basta para conocer al resto. La emisión está modelada no sólo por la ocupación de estados, sino además, por la cantidad de estados disponibles para emitir, si  $dN(\nu) = 0$ , como suceden en las brechas fotónicas,  $A_{21} = 0$ . Note que para estructuras soportadas no existe una brecha fotónica perfecta, como se discutió en la sección de efectos de número de capas del capítulo II.

### III.III Ensanchamiento de las líneas de emisión.

Cuando un conjunto grande de átomos o moléculas decae espontáneamente, emite en un ancho de banda o línea de perfil  $\phi(\nu)$ . Esa línea es modificada por diversos fenómenos térmicos. Los más comunes no están relacionados a la densidad de estados.

La función del perfil de emisión cumple con la restricción de:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \phi(\nu) d\nu = \phi(\nu_0) \Delta\nu = 1 \quad (16)$$

Lo que implica que mientras mayor sea el ancho de altura media de emisión  $\Delta\nu$ , menor será la altura de la intensidad máxima  $\phi(\nu_0)$ :

Simultáneamente la emisión cumple con el principio de incertidumbre de Heisenberg para el tiempo de vida media  $\tau$ , y la energía  $\Delta E$ :

$$\Delta\tau\Delta E \geq \hbar. \quad (17)$$

Muchos fenómenos pueden afectar la emisión más allá de la densidad de estados. Por ejemplo, el acoplamiento débil, la temperatura de los emisores, la población de átomos en diferentes estados de excitación, etc. En el caso de la influencia de los estados de ocupación térmicos, el perfil originalmente gaussiano, seguirá una distribución Lorentziana con ancho  $\Delta\nu \approx (2\pi\tau)^{-1}$  [5].:

$$\phi(\nu) = \frac{2}{\pi\Delta\nu} \left( \frac{1}{1 + 4(\nu - \nu_0)^2/\Delta\nu^2} \right) \quad (18)$$

Este ancho es el límite posible, o ensanchamiento natural, para una sola medición o para mediciones independientes, y no puede ser superado por la emisión espontánea, es decir, al reducir el ancho de la emisión, necesariamente se tiene que incrementar la vida media por encima del valor definido por (49).

La segunda razón más frecuente de ensanchamiento térmico del perfil, es generada por el efecto Doppler, resultado del movimiento térmico de los emisores.

Si se supone que la velocidad de los emisores respecto al detector es  $v_r$ , el corrimiento de frecuencia en el límite no relativista es  $|\Delta\nu| = -\frac{v_r}{c}\nu_0$ , note que se usa el valor absoluto y la norma de la velocidad, pues son los corrimientos máximos. Si los emisores siguen una distribución de velocidades Maxwelliana el perfil será gaussiano:

$$\phi(\nu) = \sqrt{\frac{4 \ln 2}{\pi}} \frac{1}{\Delta\nu} e^{-4 \ln 2 (\nu - \nu_0)^2 / \Delta\nu^2} \quad (19)$$

El ensanchamiento térmico será:

$$\Delta v = \sqrt{\frac{8 \ln 2 k T_k}{m}} \left(\frac{v_0}{c}\right) \quad (20)$$

donde  $T_k$  es la temperatura cinética [5]. Estos son los dos límites impuestos por la emisión térmica a temperatura constante, de donde se deduce que las primeras condiciones para reducir el ancho de emisión son: reducir la velocidad promedio de los emisores, cambiando el medio en que están inmersos o modificando la función de densidad de estados. Además, establece una relación mínima entre la dispersión de la emisión y el tiempo de vida media.

### III.IV Pozo de Potencial finito.

Más adelante se mostrará que un punto cuántico puede ser considerado como un pozo de potencial finito, siempre que se esté resolviendo la ecuación de onda de la envolvente de los electrones, por esa razón se hace un resumen de las características básicas del potencial rectangular finito.

En una dimensión un pozo de potencial finito está definido por la función:

$$V(x) = \begin{cases} V, & |x| > a \\ 0, & |x| < a \end{cases} \quad (21)$$

Que tiene soluciones  $u_E$ :

$$x < -a, \quad u_E'' = -\kappa^2 u_E, \quad u_E = A e^{\kappa x} \quad (22)$$

$$|x| < a, \quad u_E'' = -k^2 u_E, \quad u_E = C \cos kx + D \sin kx \quad (23)$$

$$x > a, \quad u_E'' = \kappa^2 u_E, \quad u_E = B e^{-\kappa x} \quad (24)$$

donde

$$\kappa^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E), \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}, \quad L^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2} = \kappa^2 + k^2 \quad (25)$$

Separando las soluciones en su parte par e impar se obtienen las condiciones para la energía de los estados propios:

$$\kappa a = ka \tan(ka) \quad -\kappa a = ka \cot(ka) \quad (26)$$

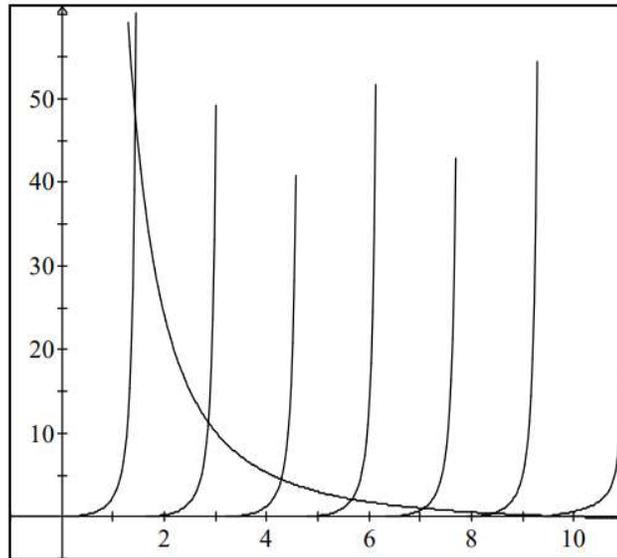
$$n\pi < ka < \left(n + \frac{1}{2}\right)\pi \quad \left(n + \frac{1}{2}\right)\pi < ka < (n + 1)\pi \quad (27)$$

Los valores propios del sistema para las soluciones pares e impares se encuentran resolviendo el sistema de ecuaciones gráficamente, buscando las intersecciones entre las curvas:

$$\left(\frac{La}{ka}\right)^2 - 1 = \tan^2 ka \quad (28)$$

$$\left(\frac{La}{ka}\right)^2 - 1 = \cot^2 ka \quad (29)$$

Por lo que siempre existe al menos una solución ligada al sistema de un pozo finito, *Figura III- 1*.



**Figura III- 1** Graficas de las ecuaciones (28) y (29), donde se muestra que siempre existe al menos una intersección entre las curvas, o que en un pozo finito siempre hay al menos un estado ligado.

Las dos soluciones para las constantes de las ecuaciones (22), (23) y (24) son:

$$A = 0 \quad C = D \quad k \tan ka = \kappa a \quad (30)$$

$$B = 0 \quad C = -D \quad k \cot ka = -\kappa a \quad (31)$$

y

$$\kappa^2 + k^2 = \frac{2mVa^2}{\hbar^2} \quad (32)$$

Dado que las constantes son siempre positivas, las soluciones deben estar en el primer cuadrante, por lo que (31) no tendrá solución para valores  $Va^2$  muy pequeños. Por otro lado (30) para valores de  $Va^2 < \pi^2 \hbar^2 / 8m$  solo tendrá una solución. Para valores  $\frac{\pi^2 \hbar^2}{8m} < Va^2 < \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m}$  habrá una solución par y una impar.

### III.V Heteroestructuras dieléctricas.

Para entender el confinamiento de los puntos cuánticos se sigue un proceso paulatino, comenzando por la descripción de una “heteroestructura”, o unión de dos materiales idealmente cristalinos.

Los electrones menos ligados (externos) al material dieléctrico se suelen describir como parcialmente libres. La aproximación de electrón libre es mejor cuanto más lejos posible se encuentre el electrón de los centros de carga positivos, que es el estado en el que la función de densidad tiene la misma periodicidad que el cristal (solución de Bloch), con sus máximos de probabilidad entre los centros de carga.

Para ese estado, el momento y la energía se escriben en función de la longitud de onda de De Broglie,  $\lambda_D = \frac{h}{p}$ , donde  $h$  es la constante de Planck y  $p$  su momento. En otras palabras, los electrones casi libres tienen un comportamiento aproximado al de una partícula libre. En ese caso la solución a la ecuación de onda es una onda plana con vector de propagación  $\vec{k}$  y masa  $m$ .

$$\vec{p} = \hbar(k_x\hat{i} + k_y\hat{j} + k_z\hat{k}) = \hbar\vec{k} \quad (33)$$

$$T = \frac{\hbar^2|\vec{k}|^2}{2m} \quad (34)$$

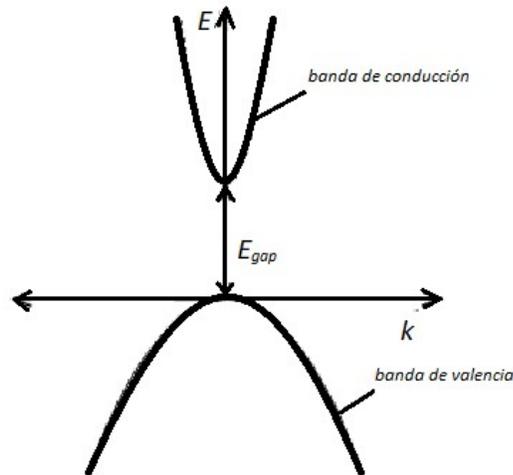
La ecuación (34) es la relación cuadrática o parabólica entre la energía y la magnitud del vector de onda de una partícula libre.

Sin entrar en detalles, los dieléctricos en general están estructurados en redes cristalinas, que pueden ser descritas como combinaciones lineales de los vectores de sus bases primitivas, que no son únicas. Los núcleos de los átomos que constituyen los materiales se encuentran distribuidos periódicamente y el potencial que sienten los electrones más externos es la superposición de potenciales esféricos apantallados por las cargas de los electrones más internos. Esos electrones forman las distribuciones de carga de enlace, muchas veces covalente, que mantienen a toda la estructura unida.

El potencial es aproximadamente constante siempre que la probabilidad de encontrar al electrón corresponda a regiones lejanas a los centros de carga, de esa forma la ecuación de onda para electrones externos será la de partícula libre. Sin embargo, hace falta modificar la ecuación para considerar que se encuentra en un medio y no en el vacío, el parámetro de ajuste empírico se llama masa efectiva  $m^*$ , con lo que la energía pasa a ser:

$$E = \frac{\hbar^2k^2}{2m^*} \quad (35)$$

La masa efectiva es un parámetro anisotrópico, ya que depende de la dirección de propagación o en otras palabras del tipo de red. Además, es inversamente proporcional a la energía con que el electrón es atraído a la red.



**Figura III- 2** Diagrama de la energía vs el vector de onda de un electrón y un hueco en las bandas de conducción y valencia en la aproximación de partícula libre para GaAs [6]

La función de dispersión de masa efectiva es válida para un electrón externo, que puede estar o no ligado al átomo, es decir, estados de asociación electrón-núcleo (estado base y estados excitados), propios de cada arreglo cristallino.

En un arreglo cristallino que cumple con las condiciones de Bloch, las soluciones al potencial se agrupan alrededor de energías permitidas, las bandas, que están (en general) separadas por brechas de energías prohibidas o “band gaps” en inglés. Las dos bandas de menor energía para los electrones externos son la banda de conducción, llamada así por que los electrones suelen fluir si se les aplica un campo eléctrico, y la banda de valencia.

Cuando se genera un excitón, un electrón cambia su estado desde la banda de valencia a la banda de conducción, dejando un hueco. Debido a que el hueco tendrá un efecto similar al de una carga positiva, la función de dispersión  $E(k)$  se suele describir de forma similar a la energía del electrón en la banda de valencia, pero invertida, es decir, la función de dispersión es la de una partícula libre modificada por una masa efectiva pero con el signo opuesto, una parábola invertida. La *Figura III- 2* muestra el diagrama de esas energías ocupando las masas efectivas para GaAs de  $0.067m_0$  y  $0.6m_0$  [6].

Este modelo depende de la validez de la aproximación de masa efectiva, que es aplicable para materiales con dimensiones mucho mayores a las dimensiones de la función de onda de la partícula asociada.

Cuando dos materiales con estas condiciones se unen, forman una unión heterogénea (*heterojunction*). Suponiendo la validez de la aproximación para cada dieléctrico de la unión, se formarán dos regiones contiguas con diferentes masas efectivas y por lo tanto con distintas energías. La discontinuidad se puede considerar como un salto en los potenciales que se supusieron constantes o como un potencial escalón, *Figura III- 3*.

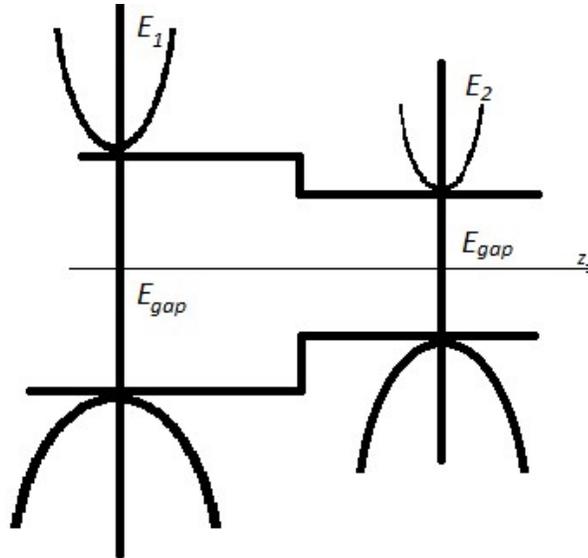


Figura III- 3 Unión de dos dieléctricos con diferentes bandas y brechas.

El orden de las uniones puede dar lugar a diversas formas de potencial, entre ellas el pozo de potencial descrito en la sección anterior. El arreglo de pozo se forma cuando dos dieléctricos rodean a un tercero con una energía de brecha, o una energía de la banda de conducción, o energía de banda de valencia menor. Al reducir las dimensiones del pozo de potencial, se irán reduciendo los estados disponibles para un electrón en él, hasta el punto de aproximarse a un estado aislado. Ese estado está íntimamente ligado al fenómeno de localización cuántica.

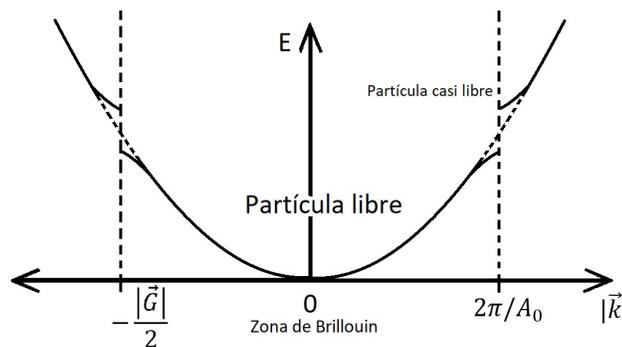


Figura III- 4 Bandas prohibidas en un cristal, aproximación de partícula libre.

Cuando una carga pasa de la banda de valencia a la banda de conducción, resultado de la excitación de un átomo del dieléctrico central, los electrones o los huecos se acumularán en la región de menor energía, que es el pozo de potencial, y poblarán sus estados ligados.

Como se mencionó, la validez de la aproximación de partícula libre está restringida por el tamaño del cristal, sólo es válida cuando el vector de onda del estado ligado no se encuentra en las regiones de la frontera de la zona de Brillouin.

En un arreglo 3D, la zona de Brillouin se define a partir de la base primitiva ( $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ ). Esta base está formada por las traslaciones que dejan invariante al potencial  $V(\vec{r}) = V(\vec{r} + \vec{s})$ , donde  $\vec{s}$  es una combinación lineal de los vectores de la base primitiva.

La condición de Bloch establece que, para una solución al propagarse un número entero de veces, un vector de la base primitiva sólo tendrá un cambio de fase  $\varphi(\vec{r} + \vec{s}) = e^{i\theta} \varphi(\vec{r})$ . De ese modo, si una solución tiene un vector de onda  $\vec{k}$ , debe cumplir con la condición de interferencia  $\vec{k} \cdot \vec{a}_i = n\pi$ , si  $n = 2$  el vector forma parte de la base recíproca. Se puede escribir a  $\vec{k}$  en función de los vectores de la base primitiva [7]:

$$b_i = \frac{2\pi \vec{a}_j \times \vec{a}_k}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)} \quad (36)$$

para  $i \neq j \neq k$ .

Toda combinación lineal de los vectores de la base recíproca  $\vec{G}$ , cumple la condición de interferencia  $\vec{G} \cdot \sum \vec{a}_i = 2\pi$ , además se cumple con la relación de Von Laue:

$$\vec{k} \cdot \vec{G} = \frac{1}{2} |\vec{G}| \quad (37)$$

Los vectores de menor magnitud que cumplen con la condición anterior serán las regiones más pequeñas donde habrá interferencia, o zonas de Brillouin. Sus fronteras estarán en las regiones donde la aproximación de partícula libre dejará de cumplirse, por lo que en la estructura de la función  $E(\vec{k})$  aparecerán bandas prohibidas, *Figura III- 4*. A la solución de la región perturbada se le conoce como región de partículas casi libres (*nearly free electron model*).

El número de electrones en una sub-banda está asociado con la integral de la densidad de estados (estados disponibles por unidad de volumen por diferencial de energía) y la probabilidad de que un electrón tenga una energía  $E$ . Dado que los electrones son fermiones la cantidad de partículas con una energía  $E$  en las sub-bandas es:

$$f^{FD}(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{kT}} + 1} \quad (38)$$

donde  $E_F$  es la mayor energía ocupada por los electrones en cada sub-banda suponiendo que todas las de menor energía en la sub-banda están ocupadas, o cuasi-energía de Fermi.

### III.VI Masa efectiva en heteroestructuras.

La solución del pozo de potencial finito debe modificarse para ajustarla al problema de dos medios con masa efectiva diferente, asociadas a cada dieléctrico, y sus respectivas bandas.

En la solución de la partícula libre (del mismo modo que en la solución de partícula casi libre), la masa es la constante que relaciona la variación de energía con respecto al momento:

$$E = \frac{p^2}{2m} \rightarrow m^{-1} = \frac{\partial^2 E}{\partial p^2} \quad (39)$$

Note que, en el caso de un dieléctrico, la dirección de aceleración no es necesariamente en la dirección de la aplicación de la fuerza externa, por ese motivo la masa efectiva no es una constante sino más bien de un tensor.

En la región de validez de la ecuación (39), considerando un medio con masa  $m_1^*$  y espesor  $L$ , rodeado por dos medios con masa efectiva  $m_2^*$ , las ecuaciones de cada sistema se verán modificadas:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_2^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \psi(z) + V\psi(z) = E\psi(z), \quad z \leq -\frac{L}{2} \text{ o } \frac{L}{2} \leq z \quad (40)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_1^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \psi(z) = E\psi(z), \quad -\frac{L}{2} \leq z \leq \frac{L}{2} \quad (41)$$

Las soluciones son las revisadas en la sección de pozo finito, las constantes de decaimiento exponencial y frecuencia de la función periódica son:

$$k = \frac{\sqrt{2m_1^*E}}{\hbar} \quad \kappa = \frac{\sqrt{2m_2^*(V-E)}}{\hbar} \quad (42)$$

Por lo que las soluciones para la energía son:

$$\frac{k}{m_1^*} \tan\left(\frac{kL}{2}\right) = \frac{\kappa}{m_2^*} \quad \text{solución par} \quad (43)$$

$$\frac{k}{m_1^*} \cot\left(\frac{kL}{2}\right) = -\frac{\kappa}{m_2^*} \quad \text{solución impar} \quad (44)$$

Una propiedad frecuentemente citada de los puntos cuánticos es la dependencia inversa entre la energía y el ancho del pozo, es decir cuando el ancho del pozo se reduce, la energía del estado base aumenta (corrimiento al azul), *Figura III- 5*

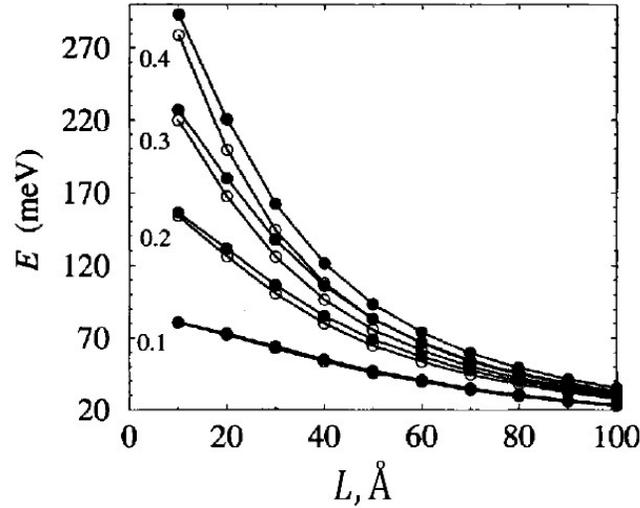


Figura III- 5 Estados base para un electrón en función del ancho del pozo de GaAs rodeado de barreras de Gal-xAlxAs. Calculado con masas efectivas distintas para los círculos abiertos y constantes idénticas para los círculos cerrados, para concentraciones x de (0.1, 0.2, 0.3, 0.4). Imagen de Paul H [6]

### III.VII Puntos cuánticos esféricos.

Los puntos cuánticos de CdSe/ZnS tienen una forma esferoide [8, 9]. Eso implica que el sistema puede ser aproximado a un problema esférico. A diferencia de los pozos de potencial finito, los puntos cuánticos están confinados en las tres dimensiones. La reducción de las dimensiones del punto cuántico no sólo afecta a la energía del estado base de la solución de la envolvente, además reduce las formas de disipación térmica de energía debido a la reducción de los átomos disponibles para interactuar con los electrones excitados. Ambas son condiciones necesarias para incrementar la eficiencia de la luminiscencia. Sin embargo, se sigue cumpliendo que los estados permitidos para las soluciones de la ecuación de onda dejan de ser continuos (bandas), pasando a ser discretos o separados en subniveles.

En el caso de un pozo con simetría esférica, el escalón de potencial entre las bandas es función únicamente del radio. Dado que el potencial de esfera dura es separable, la ecuación de onda radial y angular se resuelven independientemente:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \left( \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial^2}{\partial r^2} \right) \psi(r) + V(r)\psi(r) = E_r \psi(r) \quad (45)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \left( \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \psi(\theta, \phi) \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \psi(\theta, \phi) \right) = E \psi(\theta, \phi) \quad (46)$$

La ecuación (46) tiene como solución a los armónicos esféricos

$$\psi(\theta, \phi) = N_{lm} P_l^m(\cos \theta) \Phi(\phi) \quad (47)$$

donde

$$\Phi(\phi) = \sqrt{2\pi} e^{im\phi} \quad (48)$$

y

$$P_l^m(\cos \theta) = (1 - \cos^2 \theta)^{\frac{1}{2}|m|} \frac{d^{|m|}}{d(\cos \theta)^{|m|}} P_l(\cos \theta) \quad (49)$$

donde  $P_l$  es un polinomio de Legendre de orden  $l$  [10]. La solución angular tiene una degeneración de  $2m + 1$  en  $l$ , y forma una base ortogonal.

En cuanto a la parte radial, tomando en cuenta la aportación a la energía potencial del momento angular, el potencial pasa a ser:

$$V(r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2m^*r^2} \quad (50)$$

donde  $V(r)$  es un pozo de potencial finito:

$$V(r) = \begin{cases} 0 & \text{si } r > a \\ -V_0 & \text{si } r < a \end{cases} \quad (51)$$

Si  $\psi(r) = \chi(r)/r$ , la ecuación que describe el sistema es:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2\chi}{dr^2} - V_0\chi &= E\chi & r < a \\ -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2\chi}{dr^2} &= E\chi & r > a \end{aligned} \quad (52)$$

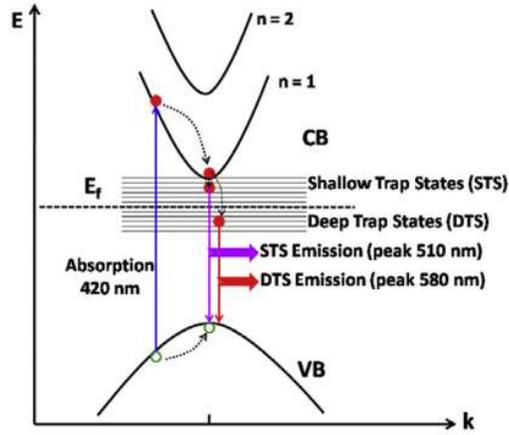
Las ecuaciones (52) tienen soluciones similares a las de un pozo finito de potencial, pero con algunas diferencias: la solución va de 0 a  $\infty$  y la solución está acotada en 0.

$$\chi(r) = A \sin \alpha r + B \cos \alpha r \quad r < a \quad (53)$$

$$\chi(r) = C e^{-\beta r} \quad r > a \quad (54)$$

donde  $\alpha = \sqrt{\frac{2m^*(V_0 - |E|)}{\hbar^2}}$  y  $\beta = \sqrt{\frac{2m^*|E|}{\hbar^2}}$ .

Para que  $\psi(r)$  sea finito en el cero, el coeficiente de la solución par debe ser nulo, es decir  $B = 0$ . Por lo tanto la solución del estado base sólo tendrá estados ligados si  $V_0 a > \pi^2 \hbar^2 / 8m$ , imponiendo un límite de tamaño para la solución envolvente de los electrones del punto cuántico. Si el punto cuántico tiene un radio menor, dejará de ser luminiscente.



**Figura III- 6** Estructura de bandas de emisión de puntos cuánticos de CdSe. Muestra una brecha directa con estados intermedios que dependerán del proceso de síntesis que pueden resultar en el ensanchamiento y corrimiento espectral, figura de A. Singh [9].

Se ha observado que el espectro característico de los puntos cuánticos de CdSe/ZnS corresponde a un espectro de brecha directa con pocos estados intermedios. El ancho espectral está relacionado con el corrimiento producido por las diferentes tasas de recombinación de cada estado intermedio, *Figura III- 6*. La tasa de recombinación  $U$  de un dieléctrico dopado está descrito por la relación de emisión de Shockley-Read-Hall [11], que sólo se menciona para justificar que el ancho espectral está asociado al número de estados intrabanda distintos.

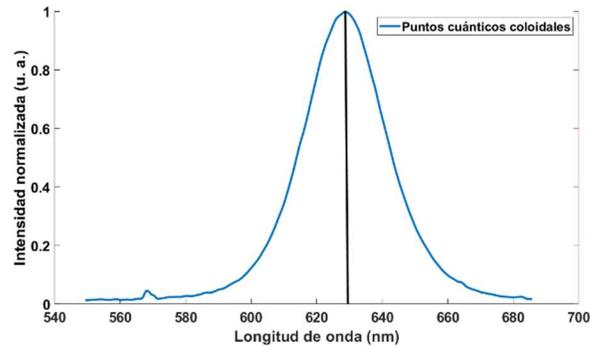
$$U = \frac{v_{th}\sigma n_T(np - n_i^2)}{n + p + 2n_i \cosh\left(\frac{E_T - E_i}{kT}\right)} \quad (55)$$

donde con  $n_T$  es el número de dopantes por unidad de volumen,  $v_{th}$  es la velocidad térmica de los electrones y los huecos, que se suponen como iguales,  $\sigma$  es la sección eficaz de la recombinación, también supuesta igual para electrones y huecos,  $E_T$  la energía de los dopantes,  $E_i$  la energía del centro de la brecha,  $kT$  la constante de Boltzman por la temperatura,  $n_i$  el número intrínseco de portadores de carga en la banda de conducción y  $n_h$  el número de huecos en la banda de valencia.

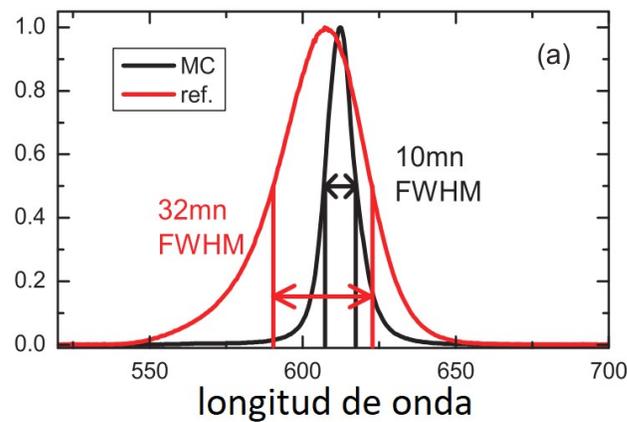
El número de electrones y huecos en un estado será  $n = n_i e^{\frac{E_F - E_i}{kT}}$  y  $p = n_h e^{\frac{E_F - E_i}{kT}}$ , donde  $E_F$  es la energía de Fermi de la banda que se está analizando.

Como resultado de la geometría de los cristales que conforman el punto cuántico, el espectro de emisión que muestra generalmente es un pico muy intenso alrededor de una frecuencia asociada al tamaño de partícula. Para el caso de los puntos cuánticos de CdSe/ZnS el espectro es el mostrado en la *Figura III- 7*. Este espectro fue medido en el laboratorio de óptica de superficies del IF para una suspensión coloidal de puntos cuánticos en tolueno.

La interacción de los polaritones del punto cuántico con los modos de la cavidad, o los efectos en la emisión inducidos por el cambio en la densidad de estados, están asociados con cambios en el número de máximos, separación de Rabi y en cambios en el tiempo de vida media ( $\tau \approx 30 ns$ ), por



**Figura III- 7** Espectro experimental de emisión medido para puntos cuánticos de CdSe/ZnS comerciales, con un máximo de emisión en 630 nm.



**Figura III- 8** Reducción del ancho de emisión de puntos cuánticos en una microcavidad. Imagen de D. Goldberg [13]

ejemplo Ling Li [12], logra un cambio con un factor de 2 a 3 entre puntos cuánticos sobre un soporte de vidrio y puntos cuánticos dentro de un metamaterial formado por un dieléctrico y películas metálicas, aunque éste no es un sistema dieléctrico como el que se propone, tiene como ventaja una función de dispersión hiperbólica. El autor destaca que, mientras más pequeña sea la región de confinamiento (tamaño de la celda unitaria) mayor es el efecto Purcell.

En cuanto al ancho de emisión, David Goldber [13] muestra que una microcavidad no simétrica puede reducir el ancho de 32 nm a altura media, a 10 nm a altura media, resultando en un modo simple. En la microcavidad es muy importante el efecto de la absorción de los puntos cuánticos, pues eso reduce el factor de calidad y aunque el autor no lo señala también es importante la diferencia de índices de refracción entre el aire y el sustrato. El cambio de vida media detectado de en este sistema tiene un factor de 1.2.

Solo para ilustrar, la *Figura III- 8* muestra el fenómeno de reducción. Se debe tomar en cuenta que en ambos casos la emisión es comparada con la emisión de puntos cuánticos en un sustrato o una película delgada de puntos cuánticos formada por goteo, y que no se observa un acoplamiento fuerte.

## Bibliografía

- [1] G. Gaur, D. S. Koktysh, y S. M. Weiss, «Immobilization of Quantum Dots in Nanostructured Porous Silicon Films: Characterizations and Signal Amplification for Dual-Mode Optical Biosensing», *Adv. Funct. Mater.*, vol. 23, n.º 29, pp. 3604-3614, ago. 2013, doi: 10.1002/adfm.201202697.
- [2] R. Siegel y J. R. Howell, *Thermal radiation heat transfer*, 4th ed. New York: Taylor & Francis, 2002.
- [3] Z. Ramos, «Estudio de la radiación del cuerpo negro.», p. 45.
- [4] S. Mumtaz, «The Derivation of the Planck Formula», Accedido: feb. 03, 2021. [En línea]. Disponible en:  
[https://www.academia.edu/36619771/The\\_Derivation\\_of\\_the\\_Planck\\_Formula](https://www.academia.edu/36619771/The_Derivation_of_the_Planck_Formula).
- [5] «Robert Estalella - Introducción a la Física del Medio Interestelar». <https://sites.google.com/fqa.ub.edu/robert-estalella-home-page/introducci%C3%B3n-a-la-f%C3%ADsica-del-medio-interestelar> (accedido feb. 03, 2021).
- [6] P. Harrison y A. Valavanis, *Quantum wells, wires and dots: theoretical and computational physics of semiconductor nanostructures*, Fourth edition. Chichester, West Sussex, United Kingdom ; Hoboken, NJ, USA: Wiley, 2016.
- [7] A. P. Sutton, *Electronic structure of materials*. Oxford : New York: Clarendon Press ; Oxford University Press, 1993.
- [8] C. B. Murray, D. J. Norris, y M. G. Bawendi, «Synthesis and characterization of nearly monodisperse CdE (E = sulfur, selenium, tellurium) semiconductor nanocrystallites», *J. Am. Chem. Soc.*, vol. 115, n.º 19, pp. 8706-8715, sep. 1993, doi: 10.1021/ja00072a025.
- [9] A. Singh, V. S. Tripathi, S. Neogy, y M. C. Rath, «Facile and green synthesis of 1-thioglycerol capped CdSe quantum dots in aqueous solution», *Mater. Chem. Phys.*, vol. 214, pp. 320-329, ago. 2018, doi: 10.1016/j.matchemphys.2018.04.116.
- [10] L. I. Schiff, *Quantum mechanics*. New York: McGraw-Hill, 1968.
- [11] E. F. Schubert, *Light-Emitting Diodes*, 2.<sup>a</sup> ed. Cambridge: Cambridge University Press, 2006.
- [12] L. Li, W. Wang, T. S. Luk, X. Yang, y J. Gao, «Enhanced Quantum Dot Spontaneous Emission with Multilayer Metamaterial Nanostructures», *ACS Photonics*, vol. 4, n.º 3, pp. 501-508, mar. 2017, doi: 10.1021/acsp Photonics.6b01039.
- [13] D. Goldberg y V. M. Menon, «Enhanced amplified spontaneous emission from colloidal quantum dots in all-dielectric monolithic microcavities», *Appl. Phys. Lett.*, vol. 102, n.º 8, p. 081119, feb. 2013, doi: 10.1063/1.4793753.

## Capítulo IV.

### Polaritones (separación de Rabi)

#### Resumen

En este capítulo se exponen los fundamentos del fenómeno de acoplamiento entre los modos de una cavidad y un excitón, lo que resulta en una cuasi partícula llamada “polaritón” y cuya característica principal es la aparición de picos de alta eficiencia, o la separación de picos de emisión simples en un número fijo de picos, que depende de cuantos osciladores se acoplen [1]. A ese fenómeno se le denomina separación de Rabi y es la característica principal del acoplamiento fuerte.

Para entender el origen de la separación se parte del acoplamiento de dos osciladores clásicos, seguido del acoplamiento de osciladores en mecánica cuántica, el comportamiento de la polarización de un sistema de dos niveles y por último el acoplamiento de modos normales de una cavidad óptica y un excitón.

#### IV.1 Osciladores acoplados.

El acoplamiento fuerte que se presenta entre cuasi partículas, en algunas condiciones, puede ser aproximado al acoplamiento entre dos osciladores cuánticos. Ese es el caso de los fotones en el espacio libre o los fotones confinados en un medio homogéneo y los excitones con una energía cercana a un mínimo de potencial (excitación de mínima energía). En general, las partículas que se acoplan no son necesariamente de la misma naturaleza, pueden ser plasmones, fonones, fotones, excitones, etc.

Dos condiciones que favorecen el acoplamiento son: el incremento en el número de osciladores disponibles y el incremento en el tiempo de interacción. Para el caso de los fotones esas condiciones implican un incremento en la intensidad y una reducción en la velocidad de grupo, lo que es posible en las regiones de altas densidades de estados [2]. Las regiones de alta densidad de estados en microcavidades ópticas, formadas por dos espejos de Bragg en simetría conjugada, corresponden a la longitud de onda de resonancia de Fabry-Perot [3], la que se generaliza para incidencia oblicua cómo:

$$\pi = n \left( \sqrt{k_z^2 + k_{\parallel}^2} \right) L \quad (1)$$

donde  $L$  es el tamaño del defecto y  $\vec{k} = k_z + k_{\parallel}$  es el vector de onda en el medio.

Si el medio es isotrópico, el índice de refracción no depende de la polarización de la luz y la frecuencia de resonancia también es independiente de ella. Sin embargo, dado que para la polarización TM, para sistemas soportados, existe un ángulo de propagación permitida, o región donde no hay brecha, ver capítulo 2, el efecto que se describe a continuación cambiará su eficiencia. Es decir, el comportamiento dependerá del tipo de polarización.

Los fotones resonantes en una cavidad tienen una energía que depende de su frecuencia:

$$E_{cav} = \hbar \omega_{cav} \quad (2)$$

donde  $\hbar$  es la constante de Planck dividida por dos pi y  $\omega_{cav}$  es la frecuencia angular de los fotones. Esa energía es análoga a la energía de un excitón:

$$E_{ex} = \hbar \omega_{ex} \quad (3)$$

A energías cercanas a la energía del estado base ambos sistemas pueden ser aproximados por un modelo de oscilador armónico. Sin embargo, no lo son y se debe tener cuidado en las condiciones de interés. Por ejemplo, los osciladores armónicos, a diferencia de los excitones, tienen modos normales de vibración energéticamente equidistantes y por esa razón nunca se saturan.

El caso clásico más sencillo de un sistema acoplado, no caótico, es el formado por dos osciladores de constantes  $k_1$  y  $k_2$  que se acoplan por un resorte central de constante  $k_c$ . En ese caso los potenciales son:

$$U_1 = \frac{1}{2} k_1 x_1^2 - \frac{1}{2} k_c (x_2 - x_1)^2 \quad (4)$$

$$U_2 = \frac{1}{2}k_2x_2^2 + \frac{1}{2}k_c(x_2 - x_1)^2 \quad (5)$$

Este sistema de ecuaciones acopladas se resuelve con un cambio de variable:  $y_1 = x_1 + x_2$  y  $y_2 = x_1 - x_2$ .

Si las constantes de restitución y las masas son iguales, la solución de la ecuación de movimiento es la superposición de dos oscilaciones independientes con frecuencias [4]:

$$\omega_1^2 = k/m \quad (6)$$

$$\omega_2^2 = (k + 2k_c)/m \quad (7)$$

En el caso cuántico, el acoplamiento de dos partículas de masas iguales es descrita por la ecuación de Schrödinger [5]:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}(\partial_{x_1}^2 + \partial_{x_2}^2) + \frac{1}{2}m\omega_1^2x_1^2 + \frac{1}{2}m\omega_2^2x_2^2 - m\omega_{12}^2x_1x_2 \quad (8)$$

donde  $\omega_1$  y  $\omega_2$  son las frecuencias de los osciladores,  $m$  es su masa y  $\omega_{12}$  es la frecuencia asociada a la constante de acoplamiento. Para desacoplar el sistema de ecuaciones, se hace un cambio de variable descrito por el operador de cambio de variable  $A$ . El resultado son dos modos normales de oscilación.

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = A \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix} \quad (9)$$

Los momentos asociados se transforman con  $A^T$ :

$$p_y^T A A^T p_y = p_x^T p_x \quad (10)$$

Lo que impone una condición para el caso desacoplado:

$$A A^T = 1 \quad (11)$$

$$A^{-1} = A^T \quad (12)$$

Entonces el hamiltoniano del sistema en la variable  $y$  es:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{p}_y^T A A^T \hat{p}_y + \frac{m}{2} y^T A \omega^2 A^T y \quad (13)$$

Que estará desacoplado si:

$$A \begin{pmatrix} \omega_1^2 & -\omega_{12}^2 \\ -\omega_{12}^2 & \omega_2^2 \end{pmatrix} A^{-1} \quad (14)$$

es diagonal.

Los valores propios en esas condiciones, son las energías de los estados permitidos de los osciladores acoplados divididas por  $\hbar$ :

$$\Omega_1 = \frac{1}{2} \left( \omega_1^2 + \omega_2^2 - \sqrt{(\omega_1^2 - \omega_2^2)^2 + 4\omega_{12}^4} \right) \quad (15)$$

$$\Omega_2 = \frac{1}{2} \left( \omega_1^2 + \omega_2^2 + \sqrt{(\omega_1^2 - \omega_2^2)^2 + 4\omega_{12}^4} \right) \quad (16)$$

Es decir, cuando se acoplan dos osciladores con la misma frecuencia de resonancia el sistema equivalente es formado por dos osciladores con distintas frecuencias base, donde la diferencia de energías de esos osciladores depende del acoplamiento.

#### IV.II Excitón en un campo armónico.

Cuando un átomo absorbe un fotón, pasando de su estado base a un estado excitado, se forma un par hueco-electrón o excitón. Ese excitón en presencia de un campo constante, o un campo armónico con longitud de onda mucho mayor a las dimensiones del excitón, adquiere una polarización descrita por la fuerza del excitón, la que es importante para la descripción de osciladores acoplados. En la siguiente sección se estudia la susceptibilidad de un excitón en presencia de un campo armónico con longitud de onda mucho mayor a la dimensión característica del excitón, basado casi completamente en el libro de W. Boyd [6].

Suponiendo que los excitones del sistema están formados por partículas que pueden estar únicamente en dos estados distintos  $|b\rangle$  y  $|e\rangle$ , estado base y estado excitado respectivamente, la matriz de densidad,  $\rho_{mn}$ , que lo describe será una matriz de dos por dos y, suponiendo que se trata de un sistema sin estados coherentes:

$$\rho_{mn} = 0 \quad \forall m \neq n \quad (17)$$

La ecuación (17) no es cierta en general, por ejemplo para el caso discutido anteriormente cuando se habló de las cuasi-energías de Fermi.

La evolución temporal de la matriz de densidad a partir del hamiltoniano se puede aproximar por un método perturbativo en función del parámetro  $\lambda$ , así:

$$\rho_{mn} = \rho_{mn}^{(0)} + \lambda \rho_{mn}^{(1)} + \lambda^2 \rho_{mn}^{(2)} + \lambda^3 \rho_{mn}^{(3)} + \dots \quad (18)$$

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - \lambda \hat{\mu} \hat{E}(\vec{r}, t) \quad (19)$$

donde  $\hat{H}_0$  es el hamiltoniano de un sistema de solución conocida, por ejemplo un átomo sin perturbar, y la perturbación es proporcional al momento dipolar, que es un operador con diagonal nula:

$$\hat{\mu} = \begin{pmatrix} 0 & \mu_{21}^* \\ \mu_{21} & 0 \end{pmatrix} \quad (20)$$

donde  $\mu_{ij} = \mu_{ji}^* = -e \langle i | \hat{r} | j \rangle$ , con  $e$  la carga del electrón. En el caso del ejemplo de un átomo excitado por una onda plana linealmente polarizada, el momento dipolar se puede resolver fácilmente en coordenadas esféricas recordando que los armónicos esféricos son ortonormales y que  $z = r \cos \theta$ .

El hamiltoniano de la ecuación (44) no toma en cuenta cambios en la distribución de estados generados por: decaimiento, emisión estimulada, colisiones, absorción de fotones, etc. Esos términos se pueden tomar en cuenta modificando la ecuación de evolución temporal de la matriz de densidad por:

$$\dot{\rho}_{mn} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}]_{mn} - \gamma_{mn} (\rho_{mn} - \rho_{mn}^{(eq)}) \quad (21)$$

donde  $\gamma_{mn} = \frac{1}{2}(\Gamma_{eb} + \Gamma_{be}) + \Gamma^{col}$  es la tasa de transición espontanea entre el estado base y el estado excitado más la transición por colisiones, y  $\rho_{mn}^{(eq)}$  es la matriz de densidad del sistema en equilibrio térmico. Note que si no hay campo eléctrico:

$$\rho_{mn} = (\rho_{mn}^{(0)} - \rho_{mn}^{(eq)}) e^{-(\gamma_{mn})t} \quad (22)$$

Es decir, el sistema tiende al equilibrio con una razón temporal dependiente de su tiempo de relajación. Para resolver la ecuación (21) se toma en cuenta que la matriz de densidad se escribe a partir del estado base y excitado:

$$[\hat{H}_0, \hat{\rho}]_{mn} = \sum_i \hat{H}_{0mi} \hat{\rho}_{in} - \hat{\rho}_{mi} \hat{H}_{0in} \quad (23)$$

$$\sum_i (E_m \delta_{ni} \rho_{im} - \rho_{mi} \delta_{in} E_n) = \omega_{mn} \rho_{mn} \quad (24)$$

donde  $\omega_{mn} = \frac{E_m - E_n}{\hbar}$ , por lo tanto:

$$\dot{\rho}_{nm} = -i\omega_{nm} \rho_{nm} - \frac{i}{\hbar} [-\hat{\mu}\hat{E}, \rho]_{nm} - \gamma_{nm} (\rho_{nm} - \rho_{nm}^{(eq)}) \quad (25)$$

Para el sistema de dos niveles la ocupación total se conserva ( $\dot{\rho}_{bb} + \dot{\rho}_{aa} = 0$ ). Al sustituir las expresiones para las componentes de la ecuación (25) :

$$\dot{\rho}_{be} = -i\omega_{be} \rho_{be} + \frac{i}{\hbar} (\mu_{bb} E \rho_{bb} - \mu_{ee} E \rho_{ee}) - \gamma_{be} (\rho_{be} - \rho_{be}^{(eq)}) \quad (26)$$

$$\dot{\rho}_{bb} = \frac{i}{\hbar} [\hat{\mu}\hat{E}, \rho]_{bb} = \frac{i}{\hbar} (\mu_{be} E \rho_{eb} - \mu_{eb} E \rho_{be}) - \gamma_{bb} (\rho_{bb} - \rho_{bb}^{(eq)}) = -\dot{\rho}_{ee} \quad (27)$$

donde las expresiones en rojo son nulas.

Usando (18) y (44) se resuelve el sistema iterativamente:

$$\dot{\rho}_{nm}^{(0)} = -i\omega_{nm} \rho_{nm}^{(0)} - \gamma_{nm} (\rho_{nm}^{(0)} - \rho_{nm}^{(0)(eq)}) \quad (28)$$

$$\dot{\rho}_{nm}^{(1)} = -(i\omega_{nm} + \gamma_{nm}) \rho_{nm}^{(1)} - \frac{i}{\hbar} [-\hat{\mu}\hat{E}, \rho^{(0)}]_{nm} \quad (29)$$

$$\dot{\rho}_{nm}^{(2)} = -(i\omega_{nm} + \gamma_{nm}) \rho_{nm}^{(2)} - \frac{i}{\hbar} [-\hat{\mu}\hat{E}, \rho^{(0)}]_{nm} \quad (30)$$

La matriz de densidad a primer orden con un cambio de variable  $\rho_{nm}^{(1)'} = \rho_{nm}^{(1)} e^{(i\omega_{nm} + \gamma_{nm})t}$  es:

$$\dot{\rho}_{nm}^{(1)'} = -\frac{i}{\hbar} [-\hat{\mu}\hat{E}, \rho^{(0)}]_{nm} e^{(i\omega_{nm} + \gamma_{nm})t} \quad (31)$$

Por lo tanto:

$$\rho_{nm}^{(1)} = e^{-(i\omega_{nm} + \gamma_{nm})t} \left( \frac{-i}{\hbar} \right) \int_{-\infty}^t [-\hat{\mu}\hat{E}(t'), \rho^{(0)}]_{nm} e^{(i\omega_{nm} + \gamma_{nm})t'} dt' \quad (32)$$

La aproximación se puede continuar de forma similar para ordenes mayores.

Suponiendo que el campo eléctrico es una suma de ondas planas que tiene longitudes de onda mucho mayores a las dimensiones del átomo:

$$\hat{E}(t) = 1 \sum_p E(\omega_p) e^{-\omega_p t} = E(t) \quad (33)$$

El conmutador del momento dipolar y la matriz de densidad de orden 0, es diagonal:

$$[-\hat{\mu}\hat{E}(t'), \rho^{(0)}]_{nm} = -(\rho_{mm}^{(0)} - \rho_{nn}^{(0)}) \mu_{nm} E(t) \quad (34)$$

Sustituyendo en (32)

$$\begin{aligned} \rho_{nm}^{(1)} &= e^{-(i\omega_{nm} + \gamma_{nm})t} \left( \frac{i(\rho_{mm}^{(0)} - \rho_{nn}^{(0)}) \mu_{nm}}{\hbar} \right) \sum_p E(\omega_p) \int_{-\infty}^t e^{(i\omega_{nm} - i\omega_p + \gamma_{nm})t'} dt' \\ \rho_{nm}^{(1)} &= \left( \frac{(\rho_{mm}^{(0)} - \rho_{nn}^{(0)}) \mu_{nm}}{\hbar} \right) \sum_p \frac{E(\omega_p) e^{-i\omega_p t}}{\omega_{nm} - \omega_p - i\gamma_{nm}} \end{aligned} \quad (35)$$

Por lo tanto el momento dipolar inducido, que se calcula a partir de la traza  $tr(\hat{\mu}\hat{\rho})$ , y definiendo  $\langle \tilde{\mu} \rangle = \sum_p \langle \hat{\mu}(\omega_p) \rangle e^{-(i\omega_p t)}$ , es:

$$\langle \mu(\omega_p)^{(1)} \rangle = \sum_{nm} \left( \frac{(\rho_{mm}^{(0)} - \rho_{nn}^{(0)}) \mu_{nm}}{\hbar} \right) \frac{E(\omega_p)}{\omega_{nm} - \omega_p - i\gamma_{nm}} \mu_{mn} \quad (36)$$

La susceptibilidad  $\chi^{(1)}$  definida a partir de la polarización  $\mathbf{P}(\omega_p) = N \langle \mu(\omega_p)^{(1)} \rangle = \epsilon_0 \chi^{(1)}(\omega_p) E(\omega_p)$ , donde  $N$  es el número átomos o moléculas disponibles para formar excitones y  $\epsilon_0$  la susceptibilidad del vacío, es:

$$\chi^{(1)}(\omega_p) = \frac{N}{\epsilon_0} \sum_{nm} \left( \frac{(\rho_{mm}^{(0)} - \rho_{nn}^{(0)})}{\hbar} \right) \frac{\mu_{nm} \mu_{mn}}{\omega_{nm} - \omega_p - i\gamma_{nm}} \quad (37)$$

$\chi^{(1)}$  depende de la ocupación de los estados base y excitado, de la absorción y del factor de amortiguamiento. Dado que  $\omega_{mn} = \omega_{nm}$  y  $\gamma_{mn} = \gamma_{nm}$ :

$$\chi^{(1)}(\omega_p) = \frac{N}{\hbar \epsilon_0} \sum_{nm} \rho_{mm} \left( \frac{\mu_{nm} \mu_{mn}}{\omega_{nm} - \omega_p - i\gamma_{nm}} - \frac{\mu_{nm} \mu_{mn}}{\omega_{nm} + \omega_p + i\gamma_{nm}} \right) \quad (38)$$

El primer término es el término resonante y el segundo es el termino anti resonante. El termino resonante es máximo cuando  $\omega_p = \omega_{nm}$ , es decir, cuando la energía del fotón y el excitón son iguales. En esa condición la susceptibilidad se puede aproximar a la parte resonante. Por otro lado,

los índices van de los estados base a excitado y no necesariamente tienen la misma degeneración. Por ejemplo, para un átomo que transfiere un electrón desde el estado  $s$  al  $p$  solo habrá un estado base por tres estados excitados. Considerando que  $\mu_{nm} = \mu_{mn}^*$ :

$$\chi^{(1)}(\omega_p) = \frac{N}{\hbar\epsilon_0} \sum_n \frac{\rho_{nn}}{3} \left( \frac{|\mu_{bn}|^2}{\omega_{nb} - \omega_p - i\gamma_{nb}} \right) \quad (39)$$

De esa forma se define la susceptibilidad a partir de la constante de fuerza del excitón para transiciones del estado base al excitado:

$$f_{eb} = \frac{2g_b m \omega_{eb} |\mu_{eb}|^2}{g_e \hbar e^2} \quad (40)$$

donde  $\mu_{eb}$  es el momento dipolar del excitón,  $g_e$  es la degeneración del estado excitado y  $g_b$  es la degeneración del estado base.

$$\chi^{(1)}(\omega_p) \approx \sum_n f_{nb} \rho_{nn} \left( \frac{Ne^2/\epsilon_0 m}{\omega_{nb} - \omega_p - 2i\omega_{nb}\gamma_{nb}} \right) \quad (41)$$

El comportamiento de la polarización del sistema está asociado a la fuerza del excitón, que en el caso de que no se forme en un átomo dependerá de la masa efectiva y la relación entre las degeneraciones del estado base y del estado excitado.

#### IV.III Átomo de dos niveles.

El átomo de dos niveles es descrito por una matriz de densidad de dos por dos, pero ahora el parámetro de amortiguamiento está asociado al tiempo de vida media de los excitones.

$$\gamma_{eb} = 1/T_2 \quad (42)$$

$$\Gamma_{eb} = 1/T_1 \quad (43)$$

donde  $\Gamma_{eb}$  es el tiempo de decaimiento del nivel excitado al nivel base y  $\gamma_{eb}$  es el tiempo de desfase del excitón.

$$\frac{2dn_1}{\lambda_1} - \frac{2dn_2}{\lambda_2} = 1 \quad (44)$$

Así, las ecuaciones que describen la evolución, para un hamiltoniano  $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$ , de los elementos de la matriz de densidad son:

$$\dot{\rho}_{eb}^{(0)} = - \left( i\omega_{eb} - \frac{1}{T_2} \right) \rho_{eb} + \frac{i}{\hbar} V_{eb} (\rho_{ee} - \rho_{bb}) \quad (45)$$

$$\dot{\rho}_{ee} = - \frac{\rho_{ee}}{T_1} - \frac{i}{\hbar} (V_{eb} \rho_{be} - \rho_{eb} V_{be}) \quad (46)$$

$$\dot{\rho}_{bb} = \frac{\rho_{ee}}{T_1} + \frac{i}{\hbar} (V_{be} \rho_{eb} - \rho_{be} V_{be}) \quad (47)$$

donde  $V_{eb} = \langle e|V|b \rangle$ . Note que la relación  $\rho_{ba} = \rho_{ab}^*$  reduce el conjunto de cuatro ecuaciones a tres. Además, nuevamente la ocupación total se conserva y la diferencia de ocupación cumple la ecuación:

$$\frac{d}{dt}(\rho_{ee} - \rho_{bb}) = -\frac{(\rho_{ee} - \rho_{bb}) - (\rho_{ee} - \rho_{bb})^{(eq)}}{T_1} - \frac{2i}{\hbar}(V_{eb}\rho_{be} - \rho_{eb}V_{be}) \quad (48)$$

Cuando el campo eléctrico es 0 las soluciones al sistema oscilan a una frecuencia  $\omega_{eb}$  y se relajan en un tiempo proporcional a los tiempos  $T_1$  y  $T_2$ . El potencial eléctrico en este caso es:

$$V_{ab} = \mu_{ab}(Ee^{-i\omega t} + E^*e^{i\omega t}) \quad (49)$$

A partir de ahora se hará la llamada aproximación rotacional, donde se asume que:  $V_{ab} = \mu_{ab}Ee^{-i\omega t}$ . Así la ecuación para la diferencia de ocupación es:

$$i\dot{\omega} = -\frac{\omega - \omega^{(eq)}}{T_1} - \frac{2i}{\hbar}(\mu_{eb}E\sigma_{be} - \sigma_{be}^*\mu_{be}E) \quad (50)$$

$$\dot{\sigma}_{eb} = -\left(i(\omega - \omega_{eb}) - \frac{1}{T_2}\right)\sigma_{eb} + \frac{i}{\hbar}\mu_{eb}E\omega \quad (51)$$

donde  $\sigma_{eb} = \rho_{eb}e^{i\omega t}$  y  $\omega = \rho_{ee} - \rho_{bb}$ . Éstas ecuaciones tienen una solución estacionaria:

$$\omega = \frac{\omega^{(eq)}[1 + (\omega - \omega_{eb})^2T_2^2]}{1 + (\omega - \omega_{eb})^2T_2^2 + (4\hbar^{-2})|\mu_{eb}|^2T_1T_2} \quad (52)$$

$$\rho_{eb} = \frac{\mu_{eb}Ee^{-i\omega t}\omega}{\hbar(\omega - \omega_{ba} + iT_2^{-1})} \quad (53)$$

El estado estacionario tiene un ancho de pico de absorción a altura media que depende de la parte imaginaria del índice de refracción:

$$\alpha = 2\omega c^{-1}\mathcal{J}(n) = 2\omega c^{-1}\mathcal{J}(1 + \chi)^{1/2} \quad (54)$$

donde  $\chi$  es la susceptibilidad, que está en función de la polarizabilidad:

$$P = \varepsilon_0\chi E = N \text{tr}(\hat{\rho}\hat{\mu}) = N(\mu_{be}\rho_{eb} + \mu_{eb}\rho_{be}) \quad (55)$$

donde  $\varepsilon_0$  es la susceptibilidad del vacío y  $N$  es el número de átomos por unidad de volumen. Al sustituir (53) en (55):

$$\chi = \frac{2N|\mu_{eb}|^2\omega}{\varepsilon_0\hbar(\omega - \omega_{eb} + iT_2^{-1})} \quad (56)$$

$$\chi = \frac{2N|\mu_{eb}|^2\omega^{(eq)}(\omega - \omega_{eb} - iT_2^{-1})T_2^2}{\varepsilon_0\hbar(1 + (\omega - \omega_{eb})^2T_2^2 + (4\hbar^{-2})|\mu_{eb}|^2|E|^2T_1T_2)} \quad (57)$$

Definiendo:

$$\alpha_0(0) = -\frac{\omega_{eb}}{c} \left[ \frac{2N\omega^{(eq)}|\mu_{eb}|^2T_2}{\varepsilon_0\hbar} \right] \quad (58)$$

$$\Omega = 2|\mu_{eb}||E|/\hbar, \quad \Delta = \omega - \omega_{eb} \quad (59)$$

donde  $\Omega$  se conoce como la frecuencia en resonancia de Rabi. Entonces:

$$\chi = \frac{\alpha_0(0)c}{\omega_{eb}} \frac{(i - \Delta T_2)}{1 + \Omega^2 T_1 T_2} \frac{1}{1 + \Delta^2 T_2^2 / (1 + \Omega^2 T_1 T_2)} \quad (60)$$

Por lo tanto, la absorción tiene un perfil Lorentziano con un ancho a altura media proporcional a la frecuencia de Rabi.

$$\Delta\omega_{FWHM} = \frac{2}{T_2} (1 + \Omega^2 T_1 T_2)^{\frac{1}{2}} \quad (61)$$

La solución a la ecuación de Schrödinger para el sistema de dos niveles, en la aproximación adiabática, que no toma en cuenta el amortiguamiento, se puede resolver al aproximar el estado propio del sistema por una combinación lineal de dos estados del sistema sin perturbar:

$$\psi(\vec{r}, t) = C_b(t)u_b(\vec{r})e^{-i\omega_b t} + C_e(t)u_e(\vec{r})e^{-i\omega_e t} \quad (62)$$

Por lo tanto, en la aproximación rotacional:

$$\dot{C}_b = \frac{-1}{i\hbar} C_e \mu_{be} E^* e^{-i\Delta t} \quad (63)$$

$$\dot{C}_e = \frac{-1}{i\hbar} C_b \mu_{eb} E e^{-i\Delta t} \quad (64)$$

Al sustituir la función prueba  $C_b = K e^{-i\lambda t}$  en la ecuación (63):

$$C_e = -\frac{\hbar\lambda K}{\mu_{be} E^*} e^{-i(\lambda - \Delta)t} \quad (65)$$

Que sustituida en la ecuación (64) da una condición para  $\lambda$ :

$$\lambda(\lambda + \Delta) = |\mu_{eb}|^2 |E|^2 / \hbar \quad (66)$$

$$\lambda_{\pm} = -\frac{1}{2}\Delta \pm \frac{1}{2}(|\Omega|^2 + \Delta^2)^{\frac{1}{2}} \quad (67)$$

Sustituyendo la solución para los coeficientes:

$$C_b(t) = e^{\frac{i\Delta t}{2}} \left( A_+ e^{-\frac{i\Omega'}{2}t} + A_- e^{\frac{i\Omega'}{2}t} \right) \quad (68)$$

$$C_e(t) = e^{\frac{i\Delta t}{2}} \left( A_+ \frac{\Delta - \Omega'}{\Omega^*} e^{-\frac{i\Omega'}{2}t} + A_- \frac{\Delta + \Omega'}{\Omega^*} e^{\frac{i\Omega'}{2}t} \right) \quad (69)$$

donde  $\Omega' = (|\Omega|^2 + \Delta^2)^{\frac{1}{2}}$ . Las constantes de la solución están asociadas a las condiciones iniciales, si la ocupación inicial es completamente en el estado excitado  $C_e(0) = 1$  y  $C_b(0) = 0$ , entonces:

$$A_+ = -A_-; \quad -(\Delta - \Omega')A_- + (\Delta + \Omega')A_- = \Omega^* \quad (70)$$

$$A_- = \frac{\Omega^*}{2\Omega'}; \quad A_+ = -\frac{\Omega^*}{2\Omega'} \quad (71)$$

$$C_b(t) = ie^{\frac{i\Delta t}{2}} \sin\left(\frac{\Omega' t}{2}\right) \quad (72)$$

$$C_e(t) = e^{-\frac{i\Delta t}{2}} \left( i\Delta \sin\left(\frac{\Omega' t}{2}\right) + \Omega' \cos\left(\frac{\Omega' t}{2}\right) \right) \quad (73)$$

Ésta solución en presencia de un campo electromagnético de frecuencia  $\omega$  genera una polarización que depende de la frecuencia de Rabi:

$$\langle \tilde{\mu} \rangle = C_b^* C_e \mu_{be} e^{i\omega_{eb}t} + C_e^* C_b \mu_{eb} e^{-i\omega_{be}t} \quad (74)$$

donde (74) asume que el estado base y el estado excitado no generan momento dipolar. Sustituyendo las soluciones (72) y (73):

$$C_b^* C_e = e^{-i(\Delta - \omega_{eb})t} \left( -\frac{\Omega^*}{2\Omega'} e^{\frac{i\Omega' t}{2}} + \frac{\Omega^*}{2\Omega'} e^{-\frac{i\Omega' t}{2}} \right) \left( -\frac{\Delta - \Omega'}{2\Omega'} e^{-\frac{i\Omega' t}{2}} + \frac{\Delta + \Omega'}{2\Omega'} e^{\frac{i\Omega' t}{2}} \right) \quad (75)$$

$$C_b^* C_e = \left( \frac{\Omega^* \Delta}{2\Omega'^2} e^{-i\omega t} - \frac{\Omega^* (\Delta - \Omega')}{4\Omega'^2} e^{-i(\omega + \Omega')t} - \frac{\Omega^* (\Delta + \Omega')}{4\Omega'^2} e^{-i(\omega - \Omega')t} \right) \quad (76)$$

Es decir, el momento dipolar de un sistema que parte de un estado excitado tiene una componente que oscila a la frecuencia del campo y otras dos que oscilan alrededor de la frecuencia del sistema forzado a frecuencias  $\omega \pm \Omega'$ . Lo mismo sucede si el sistema parte del estado base, es decir cuando  $C_b(0) = 1$  y  $C_e(0) = 0$ :

$$\langle \tilde{\mu} \rangle = \frac{(\Delta^2 - \Omega'^2) \mu_{be}}{2\Omega' \Omega^*} \left( \frac{\Omega' + \Delta}{2\Omega'} e^{-i(\omega - \Omega')t} + \frac{\Omega' - \Delta}{2\Omega'} e^{-i\omega t} \right) (e^{-i\Omega' t} - 1) + c. c. \quad (77)$$

#### IV.IV Acoplamiento fotón-excitón.

El acoplamiento de un fotón con un excitón en un sistema formado por muchos átomos requiere de la solución de la ecuación de onda para las moléculas o para el sólido que forma el sistema, lo que involucra muchas variables acopladas.

En el capítulo III se describe al punto cuántico como una partícula casi libre (donde la masa efectiva dependerá del cristal que forma al punto cuántico) confinada en un potencial esférico finito, que tiene al menos un nivel de energía ligado. En cuanto al fotón, la solución aproximada es la de una cavidad rectangular.

Para estudiar cómo se relacionan el excitón y el fotón, se puede partir del sistema formado por un átomo dentro de una cavidad. En ese caso el campo se puede escribir a partir de los potenciales escalar y vectorial en una norma apropiada:

$$\vec{E}(\vec{x}, t) = -\nabla\phi(\vec{x}) + \partial_t \vec{A} \quad (78)$$

donde los potenciales cumplen:

$$\nabla \cdot \vec{A} = 0; \quad \partial_t \phi = 0 \quad (79)$$

El potencial vectorial es solución de la ecuación de onda y los modos del potencial dependen de las condiciones de frontera.

$$\vec{A}(\vec{x}, t) = \sum_n (\alpha_n \vec{u}_n(\vec{x}) e^{-i\omega_n t} + \alpha'_n \vec{u}_n^*(\vec{x}) e^{i\omega_n t}) \quad (80)$$

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{u}_n(\vec{x})}{\partial t^2} - e \nabla^2 \vec{u}_n(\vec{x}) = 0 \quad (81)$$

Entonces el campo eléctrico es:

$$\vec{E}(\vec{x}, t) = \sum_n \sqrt{\frac{\hbar \omega_n}{2 \epsilon_0}} (\alpha_n \vec{u}_n(\vec{x}) e^{-i\omega_n t} + \alpha'_n \vec{u}_n^*(\vec{x}) e^{i\omega_n t})$$

El factor  $\alpha_n$  es la proporción que representa cada modo en la solución del campo eléctrico. Si se considera un único fotón interactuando con un sistema cuántico que puede absorber o emitir al fotón, el factor puede ser sustituido por los operadores de ascenso y descenso ( $\hat{a}_n, \hat{a}_n^\dagger$ ) del sistema. Es decir, los operadores de ascenso y descenso respecto al nivel de energía del sistema o creación y aniquilación de fotones.

Los operadores cumplen con las condiciones de conmutatividad usuales:

$$[\hat{a}_n, \hat{a}_m^\dagger] = \delta_{mn} \quad (82)$$

$$[\hat{a}_n, \hat{a}_m] = [\hat{a}_n^\dagger, \hat{a}_m^\dagger] = 0 \quad (83)$$

En ese caso el campo eléctrico será escrito como:

$$\vec{E}(\vec{x}, t) = \sum_n \sqrt{\frac{\hbar \omega_n}{2 \epsilon_0}} (\hat{a}_n \vec{u}_n(\vec{x}) e^{-i\omega_n t} + \hat{a}_n^\dagger \vec{u}_n^*(\vec{x}) e^{i\omega_n t}) \quad (84)$$

La energía de cada modo cuando  $\vec{u}_n$  es una onda plana:

$$Energía = \frac{cn}{8\pi} |\vec{E}_n|^2$$

donde n es el índice de refracción del medio.

Tomando la expresión para la energía considerando únicamente un sistema de dos niveles y las relaciones de conmutación el hamiltoniano del sistema se puede aproximar al de un oscilador. Sin embargo, los operadores de ascenso y descenso ya no se forman del operador posición y momento sino del de campo eléctrico y de campo magnético respectivamente:

$$\vec{E}_n(\vec{x}, t) \sim u_n(\vec{x}, t) (\hat{a}_n + \hat{a}_n^\dagger) \quad (85)$$

$$\vec{B}_n(\vec{x}, t) \sim u_n(x, t) (\hat{a}_n - \hat{a}_n^\dagger) \quad (86)$$

Por lo que el hamiltoniano para cada modo normal de la cavidad tendrá la forma:

$$\hat{H}_n \sim u_n(x) \hbar \omega \left( \hat{a}_n^\dagger \hat{a}_n + \frac{1}{2} \right) \quad (87)$$

En ese sentido, la base del hamiltoniano será  $|l\rangle$ , donde el número  $l$  indica el número de fotones presentes en el sistema.

En cuanto a la energía de una partícula en un campo electromagnético escrita a partir del momento canónico es:

$$E = \frac{1}{2m} (P - e\vec{A})^2 + e\phi \quad (88)$$

donde  $e$  es la carga de la partícula.

Dado que el átomo se forma de un núcleo cargado positivamente y un electrón cargado negativamente, el excitón estará conformado por una carga positiva y una negativa, en ese sentido se debe considerar tanto la energía del protón como la del electrón.

Recordado que, en una aproximación adiabática, el sistema se puede resolver para el electrón de forma independiente al protón [7], y dado que la longitud de onda de los modos normales es mucho mayor al diámetro atómico, se puede escribir el hamiltoniano del sistema en función de las coordenadas del centro de masa  $\vec{R}$  y las coordenadas de distancia entre electrón y núcleo  $\vec{r}$ .

$$\vec{R} = \frac{m_p \vec{r}_p + m_e \vec{r}_e}{m_p + m_e} \quad (89)$$

$$\vec{r} = \vec{r}_e - \vec{r}_p \quad (90)$$

En esas coordenadas el momento del electrón será  $(\vec{p}_e + \vec{A}(\vec{R}, t))^2$ . Es decir, el potencial magnético estará en función del centro de masas, por lo tanto, el hamiltoniano será:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar}{2M} \vec{\nabla}_{\vec{R}}^2 - \frac{\hbar}{2m_e} \vec{\nabla}_{\vec{r}}^2 + \frac{e^2}{4\pi\epsilon|\vec{r}^2|} - \frac{i\hbar e}{2m_e} \vec{A}(\vec{R}, t) \cdot \vec{\nabla}_{\vec{r}} + \frac{e^2}{2m_e} |\vec{A}(\vec{R}, t)|^2 \quad (91)$$

donde el momento del centro de masas  $-\frac{\hbar}{2M} \vec{\nabla}_{\vec{R}}^2 \approx 0$ , debido a que la masa del núcleo es tres órdenes de magnitud mayor a la masa del electrón. Haciendo el cambio de norma

$$\chi = -\vec{r} \cdot \vec{A}(\vec{R}, t) \quad (92)$$

$$A' = \vec{A} + \nabla\chi = 0 \quad (93)$$

$$\phi' = \phi - \frac{\partial\chi}{\partial t} = -\vec{r} \cdot \frac{\partial\vec{A}}{\partial t} = -\vec{r} \cdot \vec{E}(\vec{R}, t) = -\frac{\vec{\mu}}{e} \cdot \vec{E}(\vec{R}, t) \quad (94)$$

donde  $\vec{\mu}$  es el momento dipolar.

Entonces el hamiltoniano total del sistema será:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar}{2m_e} \vec{\nabla}_{\vec{r}}^2 + \frac{e^2}{4\pi\epsilon|\vec{r}^2|} - \vec{\mu} \cdot \vec{E}(\vec{R}, t) + \hat{H}_n \quad (95)$$

Este hamiltoniano es el hamiltoniano propio de un átomo más el hamiltoniano del campo de los modos normales de la microcavidad, por lo que se puede proponer como base para escribir la solución al producto tensorial de las bases de los sistemas antes de la interacción.

$$|nlm\rangle |n'\rangle \quad (96)$$

En ese sentido el hamiltoniano será:

$$\hat{H} = \sum_{n,m,l} \hbar\omega_n |nlm\rangle \langle nlm| + \sum_{n'} \hbar\omega_{n'} \left( \hat{a}_n^\dagger \hat{a}_n + \frac{1}{2} \right) - \vec{\mu} \cdot \vec{E}(\vec{R}, t)$$

Para un sistema de dos niveles:

$$\begin{aligned} \sum_{n,m,l} \hbar\omega_n |nlm\rangle \langle nlm| &= \hbar\omega_a |alm\rangle \langle alm| + \hbar\omega_b |blm\rangle \langle blm| \\ &= \hbar\omega_1 \sigma_{11} + \hbar\omega_2 \sigma_{22} \end{aligned} \quad (97)$$

donde se cambió el índice  $a$  por 1, y  $b$  por 2, para facilitar la notación. Por otro lado, dado que el momento dipolar se debe al desplazamiento de un electrón al estado excitado y el emparejamiento con el correspondiente hueco, los elementos de matriz de la diagonal del momento inducido:

$$\mu_{ij} = \langle i|\mu|j\rangle \quad (98)$$

donde  $|i\rangle = |nlm\rangle$ , son nulos debido a que un estado genérico del sistema tiene una paridad definida, por lo tanto:

$$\mu_{11} = \mu_{22} = 0; \quad \mu_{12} = \mu_{21} \quad (99)$$

De donde se observa que el hamiltoniano será:

$$\hat{H} = \hbar\omega_1 \sigma_{11} + \hbar\omega_2 \sigma_{22} + \hbar\omega_0 \left( \hat{a}_n^\dagger \hat{a}_n + \frac{1}{2} \right) + i \sqrt{\frac{\hbar\omega_{n'}}{2\varepsilon_0}} \vec{\mu}_{12} \cdot \mathbf{u}_{n'}(\vec{x}) (\sigma_{12} + \sigma_{21}) (\hat{a}^\dagger - \hat{a}) \quad (100)$$

En la aproximación de variaciones lentas,  $\hat{a}\sigma^- \approx 0$  y  $\hat{a}^\dagger\sigma^+ \approx 0$ , el hamiltoniano es aproximadamente el llamado hamiltoniano de Jaynes-Cummings:

$$\hat{H} \approx \hbar\omega_0 a^\dagger a + \hbar\omega_{excitón} \sigma^+ \sigma^- + \hbar g (\hat{a}^\dagger \sigma^- + \sigma^+ \hat{a}) \quad (101)$$

donde  $\sqrt{\frac{\hbar\omega_{n'}}{2\varepsilon_0}} \vec{\mu}_{12} \cdot \mathbf{u}_{n'}(\vec{x}) = g$  y  $\sigma^\pm$  son operadores de creación aniquilación de fotones en la cavidad.

Para un sistema de dos niveles no se consideran todos los vectores propios del átomo, sino solamente a las de estado excitado y base  $|e\rangle$  y  $|b\rangle$  respectivamente. Por lo que la base será  $\{|e\rangle, |b\rangle\} \otimes |\beta\rangle$ , donde  $\beta$  es el número de fotones en la cavidad.

Es importante notar que la base no forma eigenvectores de hamiltoniano, por lo que se calculan los vectores propios y sus energías, dados por:

$$\hat{H} |\beta, \pm\rangle = E_{\beta, \pm} |\beta, \pm\rangle \quad (102)$$

donde

$$E_{\beta_{\pm}} = \hbar\omega\beta \pm \frac{\hbar}{2}\sqrt{4g^2\beta - \Delta^2} \quad (103)$$

$$|\beta, \pm\rangle = \begin{cases} \cos\theta_{\beta} |\beta - 1, e\rangle + \sin\theta_{\beta} |\beta, g\rangle \\ -\sin\theta_{\beta} |\beta - 1, e\rangle + \cos\theta_{\beta} |\beta, g\rangle \end{cases} \quad (104)$$

donde  $\Delta = E_{cav} - (E_e - E_b)$ . Es decir, delta es la diferencia de energía entre el fotón de la cavidad y la diferencia entre la energía del estado excitado y el estado base.

Note que:

- Los estados propios del sistema se van separando conforme  $\Delta$  decrece.
- Mientras mayor sea la movilidad del excitón ( $g$  crece) mayor será la separación.
- Cuando se cumple que  $\Delta = 0$  y  $\beta = 1$ , la diferencia de energías de los vectores propios es  $\hbar g$  si un fotón se asocia a un solo excitón. Tomar en cuenta que algunos procesos no lineales pueden excitar un oscilador a niveles superiores al primer estado excitado.
- Agregar otro oscilador al sistema resultará en un número mayor de vectores propios.
- La separación está presente aun cuando la energía no está sintonizada.
- Los vectores propios son estados híbridos entre el estado base y el estado excitado.
- Cuando un estado excitado, resonante, dentro de la cavidad se acopla a un fotón, el estado híbrido oscilará reversiblemente entre dos estados, el excitado y el estado base, incrementando el tiempo de emisión:

$$\begin{aligned} |0, e\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|1, +\rangle - |1, -\rangle) \\ |0, e\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(e^{\frac{-i}{\hbar}E_+t}|1, +\rangle - e^{\frac{-i}{\hbar}E_-t}|1, -\rangle) \\ |0, e\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(e^{-i(g+\omega)t}|1, +\rangle - e^{-i(g-\omega)t}|1, -\rangle) \\ |0, e\rangle &= \frac{e^{-i\omega t}}{\sqrt{2}}(\cos gt |0, e\rangle - i \sin gt |1, g\rangle) \end{aligned}$$

Lo anterior es una solución aproximada para átomos en cavidades. Cuando el excitón es generado en una estructura más compleja el resultado es similar pero no idéntico. En ese sistema las frecuencias de la cavidad y el excitón se deben sustituir por un número complejo de la forma [8]:

$$\begin{aligned} E_{cav} - i\gamma_{cav}(k_{\parallel}) \\ E_{ex} - i\gamma_{ex}(k_{\parallel}) \end{aligned} \quad (105)$$

donde  $\gamma$  es el ancho de dispersión del espectro de emisión en el caso del excitón y del modo localizado en el caso de la cavidad.

$$\gamma_{ex} = \frac{\pi}{n} \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{\hbar}{m_{ex}c} f_{ex} \quad (106)$$

$$\gamma_{cav} = E_{cav}/Q \quad (107)$$

donde  $q$  es la carga del electrón,  $\varepsilon_0$  es la permeabilidad del vacío,  $m_{ex}$  es la masa efectiva del excitón,  $c$  es la velocidad de la luz en el vacío,  $f_{ex}$  es la fuerza de acoplamiento del excitón y  $Q$  es factor de calidad de la microcavidad.

En ese caso el acoplamiento de los osciladores estará descrito por el hamiltoniano:

$$H\Psi_{p,k} = \begin{pmatrix} E_{cav} - i\gamma_{cav} & \Omega/2 \\ \Omega/2 & E_{ex} - i\gamma_{ex} \end{pmatrix} \Psi_{p,k} \quad (108)$$

En una microcavidad formada por arreglos de Bragg de reflectancias  $R_1$  y  $R_2$ , el factor de calidad determina la región espacial donde se podrá llevar a cabo la interacción entre los modos normales y el excitón. El volumen de la cavidad que describe el efecto Purcell es en este caso el volumen del defecto más la distancia de penetración del campo [9], entonces:

$$Q = \frac{\pi(R_1 R_2)^{1/4}}{1 - (R_1 R_2)^{1/2}} \quad (109)$$

Si el factor de calidad  $Q$  es alto y la fuerza de excitón también es alta la energía de separación de Rabi, definida como  $\Omega_2(k_{\parallel}) - \Omega_1(k_{\parallel})$ , es [10]:

$$\Omega_{rab} = \sqrt{\left[ \alpha \left( \frac{\lambda_0}{2n} \right) \mathcal{F} \gamma_{ex} \gamma_{cav} \pi \right] - [(\gamma_{ex} - \gamma_{cav})^2 / 4]} \quad (110)$$

Donde  $\left( \frac{\lambda_0}{2n} \right)$  es el camino óptico del defecto de la microcavidad,  $\mathcal{F}$  es la estrechez de la cavidad,  $\alpha$  es el coeficiente de absorción de la zona activa y las dispersiones son funciones de la componente paralela del campo. Note que en un arreglo bidimensional ésta componente no está restringida.

Entonces el acoplamiento fuerte es evidente cuando la energía, que separa los modos del oscilador acoplado, es mayor a los anchos combinados del excitón y la cavidad. Es decir, el primer término de la ecuación (110) es mayor que el segundo.

El acoplamiento está asociado a la fuerza del excitón que depende a su vez de la masa efectiva. La masa se puede aproximar partiendo de la ocupación de fotones y excitones acoplados en función de la separación energética entre el excitón y el modo resonante del sistema:

$$\Delta E(k_{\parallel}) = E_{cav}(k_{\parallel}) - E_{ext}(k_{\parallel}) \quad (111)$$

$$r_1 = \frac{1}{2} \left( 1 + \frac{\Delta E(k_{\parallel})}{\sqrt{\Delta E(k_{\parallel})^2 + \Omega^2}} \right) \quad (112)$$

$$r_2 = \frac{1}{2} \left( 1 - \frac{\Delta E(k_{\parallel})}{\sqrt{\Delta E(k_{\parallel})^2 + \Omega^2}} \right) \quad (113)$$

$r_1$  y  $r_2$  son los cuadrados de los coeficientes de Hopfield que describen el inverso de las masas efectivas del polaritón en las dos ramas. El inverso de las masas efectivas en las ramas superior e inferior serán el promedio ponderado de los inversos de las masas efectivas del excitón y el modo resonante de la cavidad.

$$\frac{1}{m_{inferior}} = \frac{r_1}{m_{excitón}} + \frac{r_2}{m_{cav}} \quad (114)$$

$$\frac{1}{m_{superior}} = \frac{r_2}{m_{excitón}} + \frac{r_1}{m_{cav}} \quad (115)$$

Dado que la masa efectiva del excitón es en general mucho mayor a la masa efectiva de la cavidad, la masa del polaritón tiende a ser la masa efectiva de la microcavidad. Lo que en emisores no confinados incrementaría la distancia de difusión de los excitones, aumentando a su vez el tiempo de decaimiento. Además, si  $k_{\parallel} \gg 0$ , una rama tenderá a comportarse como un fotón y la otra como un excitón.

$$m_{cav} = \frac{\pi \hbar N n}{Lc} \quad (116)$$

donde  $m_{cav}$  es la masa efectiva de la cavidad,  $N$  es el número principal de los modos de la cavidad,  $n$  es el índice de refracción de la región del defecto,  $c$  es la velocidad de la luz y  $L$  es la distancia efectiva de la cavidad. Tomando en cuenta la penetración.

De forma análoga la proporción de fotones y excitones acoplados nos permite saber que tan eficiente es el acoplamiento. En el mejor de los casos la transferencia de energía entre fotón y excitón será óptima cuando las proporciones sean 1/2.

Los coeficientes de proporción  $r_f^2$  y  $r_e^2$ , son los coeficientes de los autovectores del sistema:

$$\begin{bmatrix} E_{cav} & V_{ex} \\ V_{ex} & E_{ex} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} r_f \\ r_e \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} r_f \\ r_e \end{pmatrix} \quad (117)$$

Donde  $V_{ex}$  es el potencial de interacción que es un medio de la energía de separación modos normales del acoplamiento,  $V_{ex} = \Omega_{rab}/2$ .

## Bibliografía

- [1] K. Mosshammer *et al.*, «Coherent optical interaction between plasmonic nanoparticles and small organic dye molecules in microcavities», *Appl. Phys. Lett.*, vol. 118, n.º 1, p. 013301, ene. 2021, doi: 10.1063/5.0027321.
- [2] G. D'Aguanno *et al.*, «Group velocity, energy velocity, and superluminal propagation in finite photonic band-gap structures», *Phys. Rev. E*, vol. 63, n.º 3, p. 036610, feb. 2001, doi: 10.1103/PhysRevE.63.036610.
- [3] W. T. Silfvast, *Laser Fundamentals*, 2.<sup>a</sup> ed. Cambridge University Press, 2004.
- [4] A. P. French, *Vibraciones y ondas*. Barcelona: Reverté, 1991.
- [5] L. de la Peña, Universidad Nacional Autónoma de México, Fondo de Cultura Económica, y C. e-libro, *Introducción a la mecánica cuántica*. México D.F.: Fondo de Cultura Económica, 2014.
- [6] R. W. Boyd, *Nonlinear optics*, 3rd ed. Amsterdam ; Boston: Academic Press, 2008.

- [7] A. Requena y F. Romero, «La aproximación de Born-Oppenheimer», *An. Univ. Murcia Cienc.*, pp. 48-74, 1985.
- [8] S. R. Forrest, *Organic electronics: foundations to applications*. Oxford [England] ; New York, NY: Oxford University Press, 2020.
- [9] P. Lova, H. Megahd, P. Stagnaro, M. Alloisio, M. Patrini, y D. Comoretto, «Strategies for Dielectric Contrast Enhancement in 1D Planar Polymeric Photonic Crystals», *Appl. Sci.*, vol. 10, n.º 12, p. 4122, jun. 2020, doi: 10.3390/app10124122.
- [10] Y. Zhu, D. J. Gauthier, S. E. Morin, Q. Wu, H. J. Carmichael, y T. W. Mossberg, «Vacuum Rabi splitting as a feature of linear-dispersion theory: Analysis and experimental observations», *Phys. Rev. Lett.*, vol. 64, n.º 21, pp. 2499-2502, may 1990, doi: 10.1103/PhysRevLett.64.2499.

## Capítulo V.

### Silicio Poroso

#### Resumen.

El silicio poroso es un sistema muy atractivo para la estructuración de arreglos fotónicos, ver [1] y sus referencias, debido a la facilidad que existe para controlar el índice de refracción. A pesar de eso, los arreglos activos de silicio poroso son escasos. La razón es que la condición de confinamiento cuántico, en el silicio poroso, solo es posible para muy altas porosidades, o lo que es equivalente, para estructuras poco resistentes mecánicamente. Esa dificultad puede ser sorteada introduciendo partículas luminiscentes lo suficientemente pequeñas en los poros. En este capítulo se expone el proceso de síntesis de silicio poroso para la fabricación de arreglos fotónicos, desde el proceso de formación hasta las caracterizaciones necesarias.

En la actualidad se acepta la explicación de la generación de poros en un cristal de silicio mediante una disolución parcial por anodización, donde se lleva a cabo una reducción del silicio por el ácido hidrofluorhídrico HF y la liberación de hidrógeno. Esa explicación permite de manera indirecta explicar por qué el crecimiento es en la dirección cristalográfica y preferentemente en la punta de los defectos.

Una vez fabricada la muestra de silicio poroso es necesario hacer un conjunto de caracterizaciones previas antes de poder formar arreglos multicapas. Esas caracterizaciones incluyen: la medición de la velocidad de ataque con micrografías SEM, la determinación del tamaño de poro y el índice de refracción efectivo resultante luego de hacer un tratamiento térmico a las muestras.

Se concluye con las curvas obtenidas para los índices de refracción como último paso para el diseño de las estructuras. Debe resaltarse que la calidad de la aproximación de índices de refracción se determina del ajuste experimental entre las curvas de reflectancia experimentales y las calculadas por el método de la matriz de transferencia o la ecuación de Airy.

## V Silicio poroso

Las estructuras dieléctricas que se estudian en este trabajo fueron fabricadas en el laboratorio de ICAT de la UNAM campus CU y en los laboratorios del IER, también de la UNAM, pero campus Morelos.

El silicio poroso se sintetiza por medio de una semi-disolución electroquímica en un proceso de anodizado. Puede ser descrito como una estructura con poros distribuidos superficialmente al azar, que se propagan preferentemente en la dirección cristalográfica. El resultado es un material al que se puede controlar el índice de refracción a partir de las condiciones de anodizado con una gran superficie libre. En el caso de un arreglo fotónico activo, donde la partícula luminiscente no es un cristal propio de la estructura, la respuesta fotónica del arreglo puede ser estudiada de forma independiente a las partículas emisoras de luz.

En este capítulo se explicará el proceso de formación de silicio poroso y, los tratamiento y caracterizaciones necesarios antes de generar un arreglo fotónico. El capítulo concluye con la propuesta de condiciones para formar estructuras cuasi cristalinas unidimensionales, que favorezcan el acoplamiento fuerte entre los polaritones de puntos cuánticos de CeCd/ZnS y los modos del cuasi cristal.

Todas las gráficas del presente capítulo, fueron generadas y analizadas en R®, Matlab® e ImageJ®

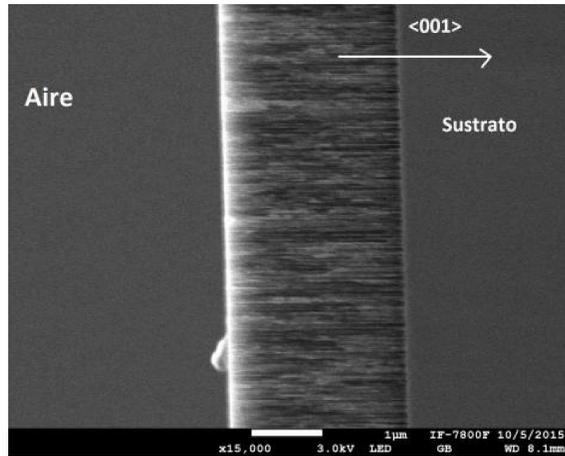
### V.I Generalidades

El Silicio Poroso (PSi) fue desarrollado por la pareja de investigadores Uhlir a mediados de 1950 en los laboratorios Bell, mientras investigaban un método de micro maquinado de obleas cristalinas de silicio por medio de ataque electrolítico. Como resultado obtuvieron una disolución parcial, donde la superficie disuelta era altamente irregular e inhomogénea.

Ellos observaron que durante la disolución de la oblea por anodizado, se formaban pequeños poros que se propagaban preferentemente en la dirección cristalográfica [2], *Figura V-1*. Y mostraron que el control de la densidad de corriente permite a su vez el control de la porosidad, que a su vez permite, de forma indirecta, controlar otras propiedades importantes, como el índice de refracción efectivo y la superficie disponible. El control de ambas ha permitido desarrollar una gran variedad de aplicaciones, tanto médicas, como tecnológicas.

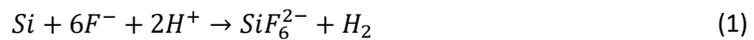
Se suele describir al PSi como una estructura en forma de esponja, donde regiones sólidas de silicio cristalino (generalmente dopado con Boro o Azufre) forman un esqueleto con huecos llenos de un material distinto (gas, nano-partículas o líquidos), formada a partir de un proceso de anodizado. Aunque existen equipos comerciales para la fabricación de silicio poroso, en los laboratorios de investigación este proceso se lleva a cabo en una celda de teflón, ya que es un material altamente resistente al electrolito, formado por una mezcla de ácido fluorhídrico y etanol. El resto de los componentes que estén en contacto con el electrolito también deben ser resistentes a la corrosión, en el caso de una celda horizontal como la que se explicará posteriormente, el electrodo debe ser de oro o platino. Es altamente recomendable que el resto de las herramientas, como pinzas o vasos de precipitado, necesarios para almacenar el electrolito, sean de plásticos resistentes al *HF*.

Explicar el proceso de disolución no es un trabajo terminado, sin embargo, en la actualidad, la propuesta más aceptada es la descrita por O. Bisi [3]. Su trabajo puede ser consultado directamente para mayores detalles. Bisi explica la disolución como resultado de la disociación de átomos de *Si* del cristal y su sustitución por iones *H* provenientes del electrolito en un proceso de reducción.

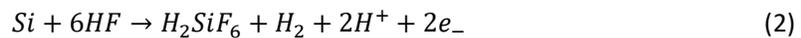


**Figura V-1** Estructura de silicio poroso, sintetizado en una oblea semiconductor de baja resistividad ( $\sim 0.001 \text{ m}\Omega$ ) de silicio tipo P (dopada con Boro). La densidad de corriente fue  $23 \text{ mA/cm}^2$ . En la imagen se verifica que los poros se forman preferentemente en la dirección cristalográfica  $\langle 001 \rangle$ .

El balance químico de esa propuesta requiere la presencia de dos átomos de hidrógeno por cada átomo de silicio, el balance propuesto es:



Posteriormente un átomo de silicio de la red es intercambiado por un átomo de hidrógeno, ecuación (2), siempre que haya presencia de electrones disponibles para la reacción. Por esa razón es necesaria una fuente de cargas dentro del cristal, que se puede lograr dopando una oblea cristalina de silicio.



El dopaje no afecta el balance de la ecuación (1), sin embargo, las condiciones del anodizado dependen del tipo de dopante. En las obleas con dopaje tipo N es necesario iluminar la muestra al mismo tiempo que se aplica la corriente para liberar la carga del sustrato y generar la disolución. En cambio, en un semiconductor tipo P, la presencia de huecos asegurará el flujo de electrones.

La cantidad de electrones disponibles para la reacción dependerá de la densidad de corriente. Si la cantidad de electrones es suficientemente grande, el resultado de la reacción será una disolución total o electropulido, en el caso contrario, por debajo del umbral de electropulido, se formarán poros.

Una vez terminada la reacción, átomos de hidrógeno quedan ligados a la superficie del cristal de silicio, resultando en una capa de hidrógeno altamente reactiva y fácilmente removible. Pero, en el caso de electropulido, esa capa de hidrógeno también es removida. La diferencia entre una semireacción y el electropulido es la cantidad de electrones disponibles: en la formación de poros se requieren únicamente dos electrones y en el electropulido son necesarios 4. La reacción en el régimen de semi disolución es la ecuación (2):

El producto final de la reacción es la molécula  $\text{H}_2\text{SiF}_6$  o alguna de sus formas ionizadas. Eso significa que, durante el proceso de formación de poros, dos de los cuatro electrones del  $\text{Si}$  participan en la transferencia de carga interfacial, mientras que los otros dos participarán en la liberación de hidrógeno. Este modelo de ataque de Lehman y Gosele se ilustra en la *Figura V- 2*.

Lehman estipula un esquema de oxidación de superficie, con captura de huecos y una subsecuente inyección de electrones. En la *Figura V- 2* se ilustran los enlaces de hidruro del *Si* que pasivan la superficie, a menos que un hueco esté disponible.

Esta hipótesis es respaldada por la observación experimental de que el gas de hidrógeno continúa formándose de la matriz porosa aun cuando se ha suspendido la corriente por un tiempo considerable. Además, de la confirmación de la presencia de enlaces Si-H durante la formación de PSi, que se verificó experimentalmente durante el análisis de la oxidación del material y publicado en 2018 [4].

Según lo anterior la formación de los poros requiere de la acumulación de carga, por lo tanto:

1. El sustrato debe aportar los huecos, disponibles en la superficie.
2. Las paredes de los poros son pasivas y las puntas activas.
3. El ataque electroquímico es auto-limitante. Además, existe una disolución pasiva de óxido de silicio formado por la interacción con agua, lo que resulta en un ensanchamiento del poro en las regiones más externas [5]. Este gradiente en la porosidad debe tomarse en cuenta durante las aproximaciones de medio efectivo, si el proceso de síntesis no garantiza homogeneidad en la dirección de formación de los poros.
4. La generación de poros solamente ocurre cuando todos los huecos disponibles en la superficie reaccionan inmediatamente.
5. La densidad de corriente debe ser menor al umbral de electropulido.

En resumen, la cinética de la formación de poros es la siguiente: inicialmente la superficie atacada resulta en una región irregular de alta resistividad, que tendrá un espesor mayor o menor (del orden de  $\mu\text{m}$  a  $\text{nm}$ ) dependiendo de a) el tipo de dopante y b) la densidad de éste. Luego comienza el proceso de disolución regular para muestras de baja resistividad o aleatorio en caso contrario. Las columnas (o los poros) resultantes tendrán en general una distribución aleatoria, pero se generan con secciones transversales del orden de decenas de  $\text{nm}^2$ , en cuyo caso el material será luminiscente debido al confinamiento cuántico [6].

Como se dijo anteriormente, la superficie de los poros resultantes es altamente reactiva debido a la presencia de hidrogeno [7]. Esa superficie rica en hidrógeno debe ser removida si se quiere estudiar la respuesta de un material sin modificarlo. Es decir, es necesario hacer un proceso de pasivación previo a la introducción de cualquier material en los poros. La *Figura V- 3* muestra el espectro ATR de las muestras recocidas durante 5 minutos a distintas temperaturas, eso con la intención de estudiar el proceso de pasivación por tratamiento térmico en una atmosfera no controlada.

Del análisis de la imagen se concluye que al incrementar la temperatura se promueve el proceso de sustitución de las moléculas de hidrógeno por oxígeno en la superficie. El resultado es un cristal de óxido de silicio químicamente neutro para muchas reacciones.

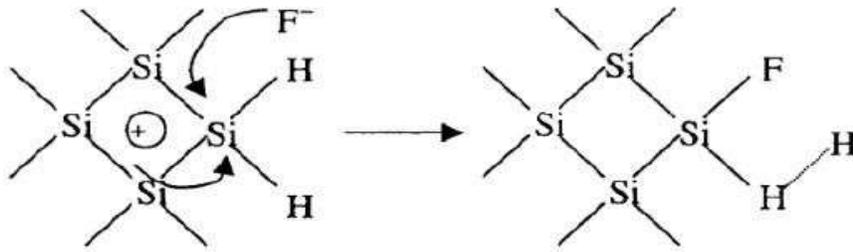
Sin embargo, debido a la disolución pasiva del óxido de silicio en presencia de *HF*, se puede incrementar la porosidad de una película ya fabricada al sumergirla nuevamente en ácido, resultando en la reducción de la sección transversal de las columnas de Si, esto se ha hecho para modificar el espectro de emisión de muestras luminiscentes.

Las propiedades finales del PSi dependen de una gran cantidad de factores: La temperatura, la humedad, la densidad de corriente, la resistividad del sustrato (densidad de dopante), la concentración de ácido, los componentes del electrolito, el proceso de secado, entre otros. O. Bisi presenta una tabla similar a la *Tabla*

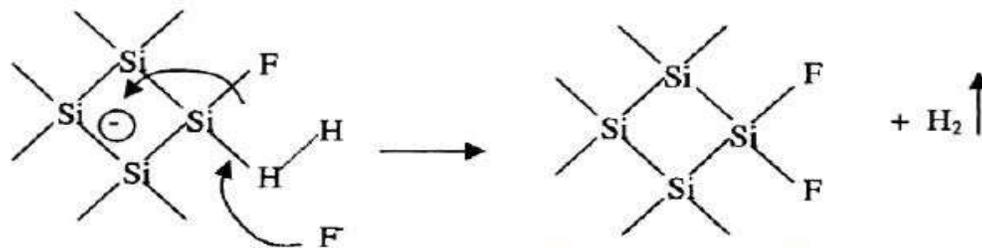
IV-1, donde se resumen algunas de las relaciones entre las características de los poros y las condiciones de síntesis:

Parámetro que se incrementa	Porosidad	Velocidad de ataque	Corriente crítica
Concentración de HF	Se reduce	Se reduce	Incrementa
Densidad de corriente	Incrementa	Incrementa	–
Tiempo de ataque (anodizado)	Incrementa	Se reduce ligeramente	–
Temperatura	–	–	Incrementa
Oblea tipo p	Se reduce	Incrementa	Incrementa
Oblea tipo n	Incrementa	Incrementa	–

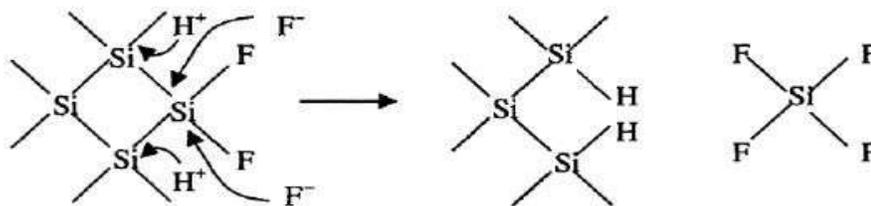
**Tabla IV-1:** Relaciones entre los parámetros de fabricación y las características de los poros según O. Bisi, et al.



Entrada de los huecos y ataque en los enlaces Si-H por el ión de flúor



Segundo ataque de los iones de flúor con la evolución del hidrógeno y la entrada de electrones en el sustato

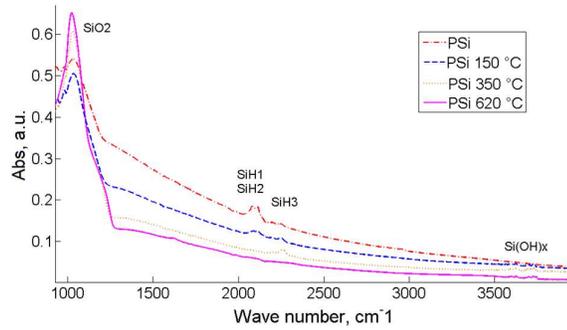


Ataque del HF en los enlaces Si-Si de fondo. Los átomos restantes de Si en la superficie están enlazados con átomos de hidrógeno y una molécula de Tetrafluoruro de silicón es producida



El tetrafluoruro de silicón reacciona con 2 moléculas de HF para generar  $\text{H}_2\text{SiF}_6$  y entonces se ioniza

Figura V-2 Formación de enlaces en la disolución electroquímica de Si en HF, Lehmann and Gosele, O. Bisi, et. al. [3].



**Figura V-3** Espectros de absorción de IR para estudiar el proceso de oxidación de PSI durante un tratamiento térmico en una atmosfera de aire. Cada línea corresponde a un tratamiento de 5 minutos a diferentes temperaturas, se observa la disminución de hidrogeno en las superficies pasivadas al ser comparadas con una muestra sin tratamiento térmico (línea roja), que tiene un mayor número de iones en la superficie [4].

Para interpretar la *Tabla IV-1*, hace falta definir a que se refiere cada uno de los elementos que la componen.

La primera columna describe los parámetros de síntesis:

- El electrolito: es una mezcla homogénea de ácido hidrofúorhídrico (*HF*): etanol: glicerol, en una relación volumétrica determinada por las propiedades finales que se desean obtener en el PSI. Por ejemplo, durante este trabajo se ocupó un electrólito en proporciones 7:3:1.
- Densidad de corriente: Durante el anodizado se debe aplicar una corriente constante para generar poros más o menos homogéneos [3]. Da densidad de corriente es la razón entre la corriente y el área efectiva de ataque. Hay al menos dos técnicas de aplicación de corriente, la primera con corriente constante y la segunda con corriente en función del tiempo. Así, se hace referencia al tiempo de ataque como el tiempo durante el cual la corriente es constante.
- Tiempo de ataque (anodizado), es el tiempo durante el que se suministra corriente a la celda de ataque. Si se aplica una corriente distinta de 0 durante todo el proceso de síntesis, el tiempo de ataque es proporcional al espesor de la región porosa. Es importante recalcar la acumulación de hidrógeno en la región de disolución, ya que reduce la población disponible de moléculas de ácido y afecta a la velocidad de ataque.
- Temperatura, es la temperatura en el laboratorio durante la síntesis.
- Tipo de oblea, se refiere al tipo de dopante del semiconductor y a su concentración.

Los parámetros anteriores modifican distintos atributos de la película de Psi:

- Porosidad: Es el factor de vacío o la razón entre el volumen total de los poros  $V_p$  y el volumen de la región porosa o volumen aparente  $V_a$ . Para medir la porosidad experimentalmente se suele usar la técnica gravimétrica [8, 9]. Esa técnica consiste obtener la razón entre las masas de la oblea de silicio en distintas condiciones, la masa de la oblea antes del ataque  $m_1$ , después de la anodización  $m_2$  y luego de retirar la estructura porosa del sustrato  $m_3$ . Para medir  $m_3$  se pueden disolver las columnas de PSI con una solución al 3% de KOH. Entonces la porosidad será:

$$P(\%) = \frac{m_1 - m_2}{m_1 - m_3} \quad (3)$$

En el caso de conocer la densidad promedio de la estructura porosa (densidad de bulto) de una capa simple  $\rho$  y la superficie de ataque  $S$ , se puede estimar la profundidad del ataque a partir del peso medido por gravimetría:

$$d = \frac{m_1 - m_3}{\rho S} \quad (4)$$

Se suele clasificar a la porosidad en porosidades parciales. La porosidad puede ser total, abierta o cerrada, dependiendo de si partículas de interés pueden o no, introducirse en los poros. La porosidad es abierta cuando el volumen del gas tomado en cuenta es únicamente el de los poros con radios mayores al tamaño característico de las partículas, la porosidad es cerrada en el caso contrario y la suma de ambas porosidades parciales será la porosidad total.

La densidad es la relación de masas que componen el arreglo y el volumen que ocupan. Según Sailor [2] se habla de la relación entre la cantidad de gas (aire) y sustrato, reportándose de tres formas distintas:

1. Densidad verdadera, densidad del sustrato relativa al volumen degradado.
2. Densidad de bulto, densidad total tomando en cuenta todas las estructuras. En el caso de un ataque con corriente variable las columnas del sustrato, los poros útiles y los huecos inaccesibles.
3. Densidad aparente, densidad entre el sustrato y los poros inviables.

Asumiendo que el volumen ocupado por los átomos de hidrógeno en la superficie es despreciable, entonces la densidad verdadera es la reportada en la literatura: 2,33g/ml.

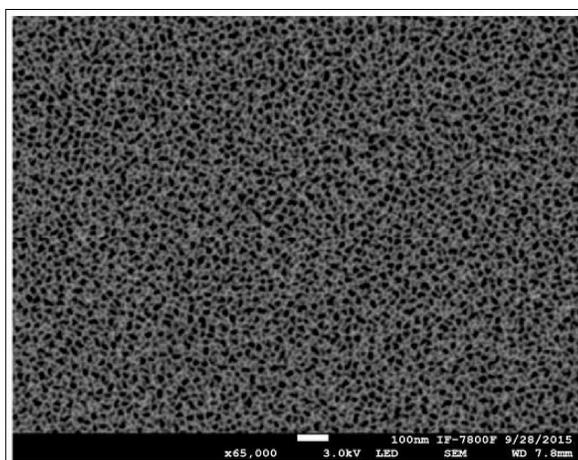
- Velocidad de ataque, será la razón entre el espesor de la región porosa y el tiempo de ataque.
- Corriente crítica, es la corriente mínima para electropulido. El electropulido suele usarse en dos casos, primero, antes del ataque para asegurar que el tamaño transversal de los poros sea aproximadamente constante y segundo, para desprender del sustrato regiones porosas (muestras autosportadas).

Con lo anterior se puede interpretar la *Tabla IV-1*:

A mayor concentración de ácido, manteniendo constante el resto de las variables: la corriente, el tiempo de anodizado, la temperatura y la humedad; se reducen la porosidad de la muestra y la velocidad de ataque, y se incrementa la corriente umbral para electro pulido.

Para efectos fotónicos es importante la conservación del camino óptico, un gradiente de porosidad en función de la profundidad de ataque a corriente constante es indeseable. Sin embargo, se ha observado que dicho gradiente se puede originar por la disolución de óxido de silicio [5] y por el cambio de concentración de ácido en el electrólito debido a la evaporación. Según la literatura (antes citada), la evaporación es más importante que la liberación de Hidrógeno en las zonas de disolución. La evaporación se ve promovida por el incremento de temperatura ambiental, disminuyendo la velocidad de ataque, aunque no hay una determinación experimental del efecto.

Durante el proyecto se estudió la interacción de los modos de las estructuras de silicio poroso con partículas luminiscentes que se introdujeron en ellas, por tanto, el tamaño de los poros es determinante. A pesar de que no hay una relación entre la porosidad y el tamaño de los poros, pues el volumen desocupado dependerá de la concentración de poros y de la sección transversal de éstos, el tamaño de los poros está normalmente distribuido en las muestras, lo que se puede verificar a partir del análisis estadístico de los poros en imágenes de SEM.



**Figura V- 4** Micrografía SEM de PSI, vista superior. En este caso se trata de mesoporos

En general los nanoporos se clasifican según su tamaño, *Tabla IV-2*. Cuando el diámetro transversal promedio de los poros es menor a 2 nm se clasifican como microporos, mesoporos cuando está entre 2 nm y 50 nm, y macroporos si miden más de 50 nm.

El tamaño de poro establece una condición límite para introducir partículas en la estructura del Psi. Para determinar su promedio se analizan micrografías tanto AFM como SEM, similares a la mostrada en la *Figura V- 4*, con un software especializado.

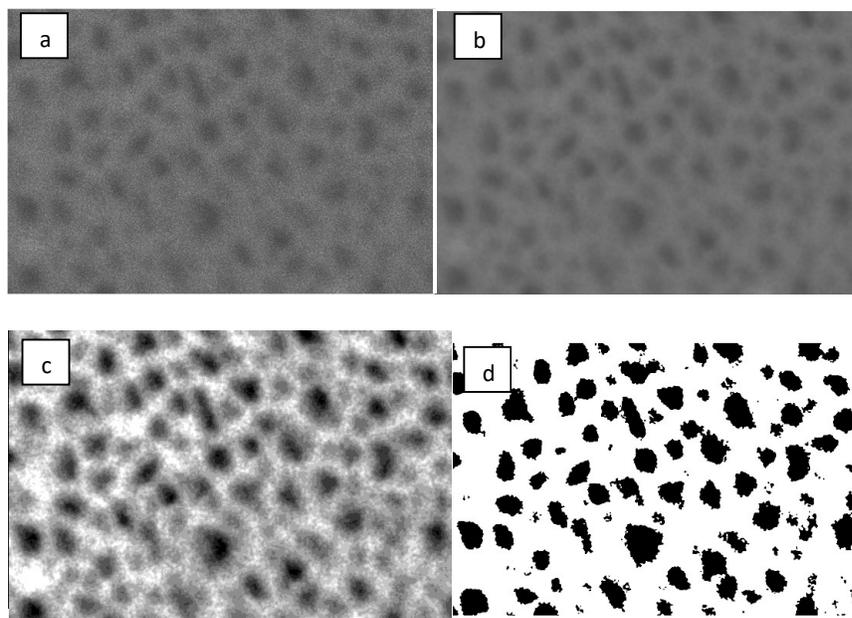
Tipo de poro	Tamaño
Macroporo	diámetro > 50 nm
Mesoporo	2 nm < diámetro < 50 nm
Microporo	diámetro < 2 nm

**Tabla IV-2:** Clasificación de poros según su tamaño.

Los poros de Psi, en estructuras fotónicas, son generalmente menores a los 100 nm. Sin embargo, en las obleas tipo n se pueden encontrar estructuras con poros de gran tamaño y columnas muy delgadas, de tal suerte que se puede considerar que quedan cristales de silicio cristalino rodeados de óxido de silicio, favoreciendo el confinamiento cuántico y por tanto son naturalmente luminiscentes.

Para hacer la determinación de tamaño se hizo la secuencia de pasos ilustrada en la *Figura V- 5*, inicialmente en R® y posteriormente en imageJ®:

- Obtener micrografías SEM con resolución suficiente para determinar el tamaño de poro (diámetro del poro del orden de la escala)
- Como se observa en la *Figura V- 4*, la imagen está formada por una escala de grises muy irregular (existen muchos puntos blancos y negros o ruido de sal y pimienta como suele denominarse), esto hace difícil un análisis automático de color, por lo que se suavizó la textura empleando un algoritmo de autocorrelación en 2D, necesario para el paso siguiente.
- Para mejorar la selección del umbral de tono se ocupó un algoritmo de clasificación no supervisado conocido en la literatura como Fuzzy K-means [10], el número de centroides fue determinado



**Figura V- 5** Procesamiento de imágenes para la determinación del tamaño de poros en R. a) imagen original, b) imagen con textura suavizada, c) Imagen con agrupación de colores por K-medias, d) imagen resultante en blanco y negro.

arbitrariamente a 10, con 100 repeticiones, aunque se sugiere usar el número que mejor ajuste el resultado a la porosidad medida.

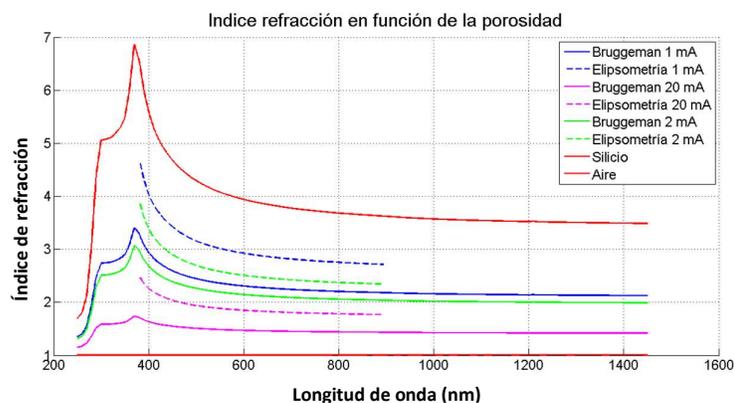
- d) De la imagen blanco y negro resultante se obtuvo la distribución de centros y tamaños con ImageJ®. Se eligieron los grupos analizados según un criterio de mínima área y circularidad, se obtuvo el histograma de píxeles para observar la normalidad de la distribución y se asoció la media a la superficie transversal del poro.
- e) Asumiendo que la sección transversal es aproximadamente circular, se calculó el diámetro promedio, que resultó ser del orden de 14 nm para la muestra de menor tamaño de poro.

El análisis hecho también se implementó en Matlab para el conteo de nano partículas, modificando el suavizado por un proceso de media móvil + un ajuste de histograma, ello resultó en una mejor selección de zonas oscuras.

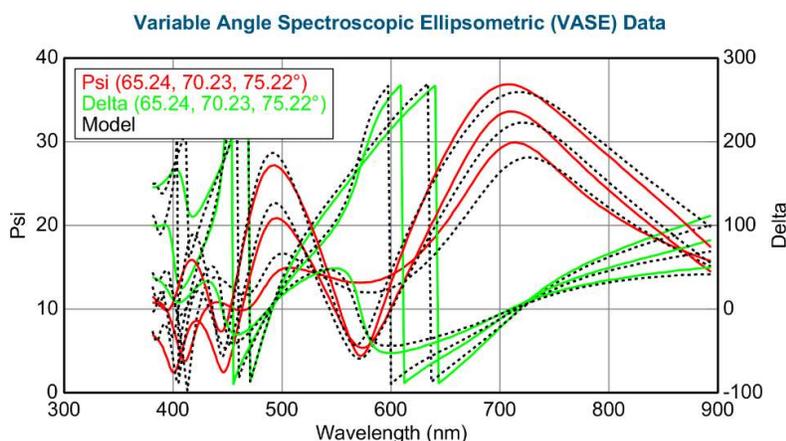
#### **V Determinación del índice de refracción.**

La luz al viajar por un medio heterogéneo es dispersada debido a las diferencias de densidad. Si la longitud de onda es lo suficientemente grande (longitudes mayores al radio medio de los poros), la luz se propagará como si no existiera la heterogeneidad, es decir, se refractará como si existiese un índice de refracción efectivo. Por esta razón es frecuente que la longitud de onda de resonancia de los arreglos fotónicos corresponda al espectro infrarrojo. En el espectro visible. El PSI se comporta como un medio homogéneo siempre que la capa sea delgada [11, 12].

Esto permite que una sucesión de regiones de densidad constante y dimensiones pequeñas (del orden de la longitud de onda), con interfases aproximadamente planas formen un arreglo fotónico. Para lograr que un diseño pueda ser reproducido experimentalmente es determinante conocer el índice de refracción con la mayor certeza posible, tomando en cuenta que la formación del Psi es un proceso aleatorio y por lo tanto mientras mayor sea la longitud de onda de la luz, mejor será el ajuste.



**Figura V- 6** Índices de refracción calculados con distintas técnicas, una aproximación experimental por elipsometría y el modelo teórico de Bruggeman descrito en [13].



**Figura V- 7** Ajuste de las funciones  $\Psi$  y  $\Delta$  de elipsometría para capas simples de silicio poroso con un espesor de 250 nm.

Existen diferentes técnicas para hacer dicha caracterización, que en general no coinciden en el resultado, *Figura V- 6*, y por esa razón se suele elegir la que mejor reproduzca los resultados experimentales [13].

La *Figura V- 6*, muestra la dependencia del índice de refracción con la longitud de onda usando dos métodos de aproximación diferentes, elipsometría (líneas discontinuas) y una aproximación de medio efectivo usando el modelo de Bruggeman. El color de cada línea está en relación con distintas corrientes de síntesis.

Las tres corrientes efectivas que se emplearon fueron: 1 mA, 2 mA y 20 mA. Las muestras fueron fabricadas en una celda de teflón de área circular con diámetro de 1.12 mm.

El método de Bruggeman emplea la porosidad como parámetro de aproximación. La cual suele medirse por gravimetría. En este caso se empleó la media aritmética de la porosidad calculada por elipsometría para hacer la comparación. No se ocupó gravimetría para la determinación de la porosidad por la gran desviación de los datos obtenidos en las condiciones del laboratorio. Hay que resaltar dos inconvenientes del método, primero que el error en relación a la porosidad es del orden de  $\delta p^2$  y segundo que no toma en cuenta pequeñas variaciones en la densidad. En otras palabras, no es capaz de seguir el cambio de índice de refracción por la

oxidación. Éste es un gran inconveniente, ya que el corrimiento de los espectros por oxidación es un parámetro que se ajusta experimentalmente, pero que sería bueno poder conocer analíticamente.

Para calcular el índice de refracción por elipsometría se usó un elipsómetro Woolan del laboratorio de termo ciencias del IER UNAM. El modelo seguido para hacer el ajuste es el descrito por Zeus M [14], donde se modela a la estructura de silicio como una película con un gradiente de porosidad en la dirección normal, considerando que el máximo de porosidad está en la superficie y el mínimo en la interfase silicio- silicio poroso, lo que es compatible con una estructura no homogénea en la dirección normal y con la disolución pasiva.

Los criterios para determinar la calidad del ajuste son la minimización de la desviación cuadrática entre las respuestas de la polarización medida y modelada. La *Figura V- 7* muestra el ajuste logrado en el laboratorio para las funciones  $\Psi(\omega)$  y  $\Delta$ , además de la correspondencia del tamaño simulado y el medido por micrografía SEM.

Dado que este modelo no considera la capa de Oxido de silicio en la superficie de los poros, mientras mayor sea la oxidación mayores ajustes se deben hacer a los índices de refracción.

Para verificar el resultado, con el índice de refracción complejo, se calculó la reflectancia de una capa simple usando la ecuación de Airy [15], ecuación (5), y se comparó con la reflectancia medida experimentalmente:

$$R = \frac{R_{12} + R_{23}e^{2ik_2d}}{1 + R_{12}R_{21}e^{2ik_2d}} \quad (5)$$

La ecuación (5) corresponde a la reflectancia de una película con índice de refracción  $n_2$ , asumiendo que se cumplen las condiciones de reciprocidad, y que está embebida entre dos regiones con índices de refracción  $n_1$  y  $n_3$  respectivamente. Los subíndices hacen referencia a la región o la interfase estudiada, y las reflectancias  $R_{ij}$  se calculan según las ecuaciones de Fresnel.

En la *Figura V- 8*, se comparan las reflectancias medida y calculada, usando como variables tanto los índices de refracción como la profundidad de la región porosa, medida a partir de micrografías SEM. El cálculo fue hecho considerando la parte imaginaria del índice de refracción para mejorar el ajuste. En caso contrario no existe correspondencia entre los máximos y los mínimos de ambas curvas. La correspondencia fue la última verificación empleada para determinar cuando el índice de refracción ajustado se consideraba aceptable.

La correspondencia entre las posiciones de mínimos y máximos está asociada a una correspondencia en camino óptico. La diferencia entre reflectancias máximas y mínimas puede deberse a 2 razones, la primera un error en el contraste (como se ve en la *Figura V- 6* diferentes modelos resultan en diferentes contrastes) o a un error en la determinación del índice de refracción del sustrato (ver capítulo II). Por otro lado, La falta de correspondencia en los extremos de la curva (altas y bajas frecuencias) se debe a que el índice de refracción no puede ser aproximado como constante para longitudes de onda mayores a la región disponible en elipsometría, además el ajuste se hace peor conforme la película de silicio poroso crece, por el incremento en la dispersión debida a las irregularidades de las interfases, la superficie y las columnas de silicio. Esto es muy importante para arreglos fotónicos ya que al incrementar el número de capas también empeora la correspondencia.

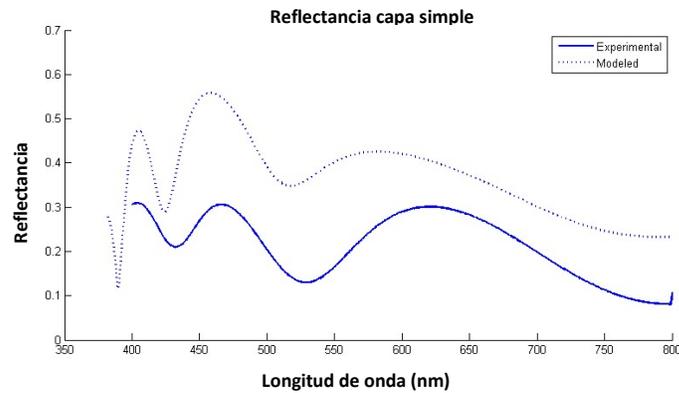


Figura V- 8 Reflectancia de una capa simple de silicio poroso, comparada con la reflectancia calculada con la ecuación de Airy ocupando los índices de refracción ajustados experimentalmente por elipsometría.

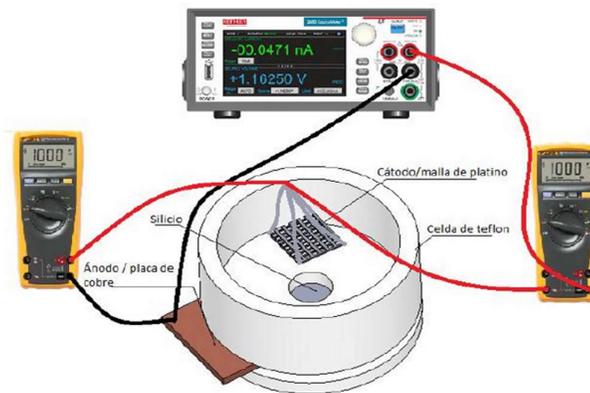


Figura V- 9 Dispositivo para la síntesis de PSi. La corriente es controlada por una fuente que a su vez es controlada por una computadora. El voltaje y la corriente son monitoreados por medio de voltímetros, la magnitud del voltaje sirve como control de calidad de la síntesis. La oblea de silicio se expone al ácido por la ranura inferior de la celda con forma circular y de perfil cónico, para reducir las inhomogeneidades no deseadas en el perímetro de la región de síntesis. La corriente fluye por el electrolito hasta el sustrato, que está conectado a la fuente, por medio de un ánodo de platino y un cátodo de cobre.

Para regiones fuera del rango de sensibilidad del elipsómetro, en particular la región infrarroja cercana, la reflectancia experimental no puede ser reproducida, por esa razón además de la oxidación, se consideró el método teórico.

El método de medio efectivo de Bruggeman establece el índice de refracción en función de la porosidad [13], las ecuaciones (6) y (8) muestran la parte real ( $n_{PSi}$ ) y compleja ( $k_{PSi}$ ) del índice de refracción. Note que, si la parte compleja del índice de refracción del aire es 0, entonces la parte compleja del índice de refracción es una simple aproximación lineal. La solución para el método de medio efectivo es:

$$an_{PSi}^4 + bn_{PSi}^2 + c = 0 \quad (6)$$

donde

$$a = 2$$

(7)

$$b = Pn_{Si}^2 - 2Pn_a^2 - 2(P - 1)n_{Si}^2 + (P - 1)n_{aire}^2$$

$$c = n_{Si}^2 n_{aire}^2$$

Este modelo tiene 4 raíces, el índice de refracción que se usó como aproximación fue la raíz que cumple con las condiciones límite del silicio poroso:  $\lim_{P \rightarrow 1} n_{Psi} \rightarrow 1$ , y cuando  $\lim_{P \rightarrow 0} n_{Psi} \rightarrow n_{Si}$ .

$$\frac{k_{Psi}^2}{k_{Si}^2} - \frac{k_{aire}^2}{k_{Si}^2} = (1 - P) \left[ \left( 1 - \frac{k_{aire}^2}{k_{Si}^2} \right) \left( \frac{k_{Psi}^2}{k_{Si}^2} \right)^{\frac{1}{3}} \right] \quad (8)$$

### V.III Síntesis de silicio poroso

Otras ventajas del silicio poroso, además de las mencionadas hasta ahora son el bajo costo de fabricación, estar fabricadas con un material biodegradable [16] y la facilidad para controlar las propiedades finales con una baja incertidumbre (una vez bien caracterizado el sistema). Sin embargo, no se puede quitar el dedo del renglón, la rugosidad tiene un papel importante al reducir la capacidad de transmitir luz a lo largo del material.

El anodizado de las muestras se hizo en una celda de teflón alimentada por una fuente de corriente Keithley 2450. El esquema del arreglo de celda de ataque horizontal se muestra en la *Figura V- 9*, y está constituido por una malla de platino (o un hilo de platino si se desea hacer un gradiente de porosidad superficial) como cátodo, una lámina de cobre o ánodo (el material se elige para favorecer el flujo de electrones), una fuente, dos multímetros para monitorear la corriente y el voltaje durante la disolución, y la celda de teflón. Además de sensores de temperatura y humedad, debido a que las variables ambientales son incontrolables en nuestro laboratorio y si la humedad es muy grande las estructuras colapsan.

Los multímetros tienen como objetivo ser indicadores de error durante la síntesis. En caso de derrame u oxidación excesiva de los circuitos, el voltaje se incrementará abruptamente sobre los voltajes registrados históricamente para el sistema. En nuestro caso, para densidades de corriente altas, del orden de  $30 \frac{mA}{cm^2}$ , y un sustrato con resistividad de  $1 \sim 5 \frac{m\Omega}{cm^2}$ , el potencial no supera los 1.4 volts de magnitud. En caso de ser mayor se ha asociado un error experimental, como los mencionados.

El primer paso para fabricar estructuras de Psi es hacer una caracterización de la regularidad de las interfaces. Las muestras estudiadas fueron fabricadas en el IER de la UNAM y para garantizar la repetibilidad se hicieron en grupos etiquetados por fecha (todas las muestras de cada lote se fabricaron en la misma fecha, reduciendo la variabilidad entre ellas resultante de las condiciones ambientales).

Los arreglos fotónicos unidimensionales más simples se fabrican con dos materiales de distinto índice de refracción. En el caso del Psi eso significa emplear dos densidades de corrientes distintas, o lo que es equivalente, usar dos corrientes diferentes manteniendo el área de ataque constante. En este caso fueron dos corrientes netas de  $40 mA$  y  $1.5mA$ .

La caracterización del proceso de síntesis comienza con la medición de la velocidad de ataque asociada a cada corriente, es decir la relación entre el tiempo total en que se suministró corriente y el espesor final de las películas, que se midió empleando micrografías.

Para hacer un estimado del tiempo necesario para fabricar las capas con un camino óptico de  $\lambda/4$ , se partió de los registros disponibles en el IER de fabricación de psi en años anteriores.

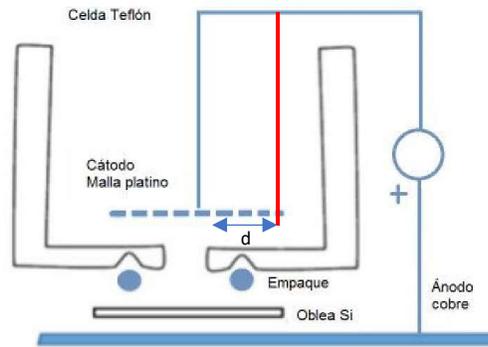
$$t = \frac{\text{prof. esperada}}{\text{vel. registrada}} \quad (9)$$

Se fabricaron muestras con un tiempo de ataque estimado, tal que, el espesor fuese de 300 nm a 400 nm. Una vez fabricadas, se midió el espesor y se compararon el espesor promedio con el espesor esperado. Con esa razón de espesores se calculó el factor de corrección.

La rugosidad de las interfaces se estudió con muestras fabricadas con al menos dos regiones de diferente porosidad. El análisis de micrografías SEM consistió en obtener, a ojo, una banda que contenía por completo las regiones de cambio de porosidad. Actualmente con análisis de imagen en Matlab podemos obtener la línea de interfase y hacer un ajuste lineal, de esta forma calcular la desviación estándar de la rugosidad en las interfaces. Sin embargo, los datos que presento aquí no tienen relación con este nuevo análisis y se encuentran reportados en la tesis del estudiante Iván Motaño Jaramillo bajo la asesoría del autor de este trabajo.

Para garantizar la repetibilidad es importante dar mantenimiento con regularidad a todos los dispositivos involucrados en la síntesis.

- Cambiar los cables y conexiones regularmente reduce la posibilidad de alta resistencia en el sistema. En la experiencia en el laboratorio, se ha observado que, al incrementar la resistencia en el circuito, se incrementa también la velocidad de ataque. En particular se pueden generar errores de hasta 50 nm en la profundidad de ataque por oxidación de los cables, esto implica un corrimiento de las brechas en el espectro mayor a dos veces el error de profundidad. Si se quiere predecir la posición de las brechas, un corrimiento de 100 nm en los espectros es muy importante.
- La malla de platino (cátodo) debe ser lo más plana posible, evitando irregularidades en las interfaces y todos los hilos que las componen deben estar completamente sujetos, no puede haber hilos sueltos. Durante la caracterización de interfaces notamos que es tan importante la forma de la malla como el método empleado para la remoción de burbujas.



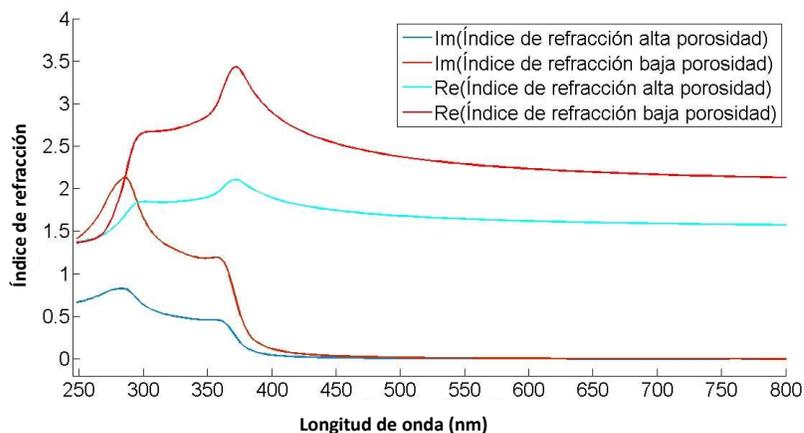
**Figura V-10** Celda de ataque electroquímico. Con componentes resistentes al ácido para evitar fugas y contaminación. Hay al menos dos configuraciones de síntesis disponibles en los laboratorios de la UNAM. El primero es para sintetizar una muestra con porosidad superficial constante, en ese caso el cátodo debe ser una malla. El segundo es una muestra con un gradiente superficial de porosidad, en ese caso se usa un hilo de platino (línea roja), el gradiente de porosidad dependerá de la corriente efectiva y la distancia  $d$ .

- El sustrato tiene una cara pulida, el ataque se hace en esa cara. En la cara rugosa se deposita una película de aluminio para mejorar la conducción de electrones desde el cátodo al sustrato. Se puede hacer síntesis en algunos sustratos sin necesidad de emplear el aluminio, pero dependerá del tipo de semiconductor y de la calidad de interfases requerida. Para el presente trabajo se usó aluminio del 99% de pureza para hacer el depósito en la cara rugosa, al que una vez depositado, se somete a un tratamiento térmico a  $350^{\circ}\text{C}$  por 30 minutos en una atmósfera de nitrógeno, para mejorar el acoplamiento entre aluminio y semiconductor.

El depósito de aluminio se hizo por evaporación en una campana de vacío, en un alto vacío ( $10^{-5}$  torr) para evitar la formación de alúmina y otros contaminantes.

El depósito debe hacerse con rapidez, ya que si se hace lentamente la película final de aluminio tendrá contaminantes que incrementarán la resistencia del sistema y no podrá hacerse una buena sinterización con el sustrato. Se debe dejar enfriar el depósito con el vacío para evitar la contaminación mientras la película está a una temperatura elevada.

- Verificar la integridad de los empaques de teflón para reducir el riesgo de escurrimientos que pueden dañar el equipo y resultar en lesiones posiblemente mortales. Es altamente recomendable hacer una revisión del riesgo de trabajo con ácido fluorhídrico. En caso de escurrimiento el ácido disolverá la película de aluminio, liberando energía en forma de calor y dañará la placa de cobre.
- La *Figura V-10*, muestra un esquema transversal de la celda de ataque, donde se observan los empaques necesarios. Para garantizar la homogeneidad en la superficie de PSi, no se debe aplicar demasiada presión en la celda de ataque, un exceso de presión se observará como estrías en la superficie del PSi. Cuanto más pequeña sea la zona de ataque mayor será la influencia de una alta presión. Lamentablemente esto último se tendrá que resolver con la experiencia de quien esté fabricando el material.



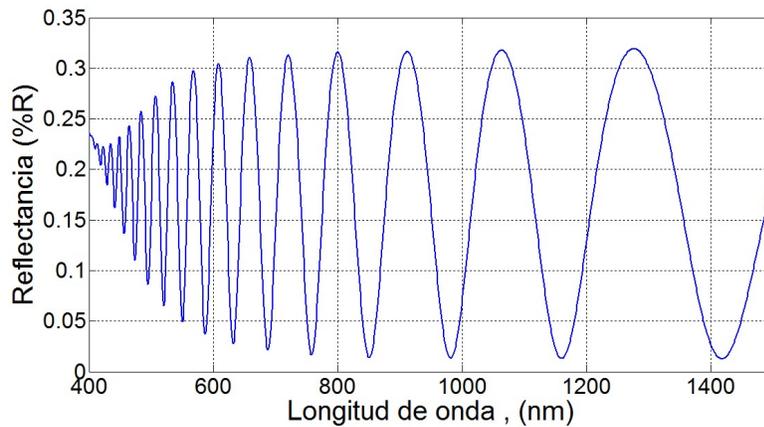
**Figura V-11** Índices de refracción. Observe el crecimiento de la dispersión al reducir la longitud de onda, además, de ser la misma región donde el material se vuelve absorbente (índice de refracción imaginario crece)

- Cuidar la composición volumétrica del electrolito, para garantizar el tamaño de poro (transversal y longitudinal), la homogeneidad de las interfases y la velocidad de ataque en el orden de décimas de nanómetro. El electrolito ocupado fue en una relación volumétrica 7:3:1 como se mencionó anteriormente.

Durante la síntesis, el cambio de corriente equivale a un cambio en la porosidad y los tiempos efectivos permiten controlar el espesor de la región semidiluida. Es importante resaltar la función de los componentes del electrolito, así, si alguno falta o cambia en proporción volumétrica se podrá intuir cual será el efecto en la película resultante. En el trabajo presentado en la tesis de Iván Jaramillo se exploran también los efectos de una malla dañada o de un proceso de remoción de hidrógeno menos invasivo.

- El etanol permite que el ácido escurra dentro de los poros. Ya que el silicio cristalino es hidrofóbico [17] y el  $HF$  se encuentra en una disolución acuosa al 48%, la presencia de agua provoca una resistencia al escurrimiento del ácido necesario para la disolución dentro de los poros, por lo que reducir la proporción de etanol en el electrolito cambia la velocidad de ataque. Este efecto es determinante en capas o arreglos con profundidades mayores a  $1 \mu m$ .
- La glicerina permite sintetizar interfases más planas, regulando la velocidad con que el electrolito se intercambia dentro de los poros, reduciendo la rugosidad presente en síntesis con electrolitos formados sólo por etanol y ácido. Una estrategia para reducir la rugosidad en las interfases de distinta porosidad en la dirección de disolución, es hacer el anodizado introduciendo intervalos donde no se aplicará ninguna corriente, eso permite que el ácido escurra dentro del poro y facilita el flujo de salida del hidrógeno. En el presente trabajo se usaron intervalos de 4 segundos con corriente activa y 1 segundo sin corriente.

En cuanto a la sección transversal, se usó una zona circular, su diámetro se midió analizando las fotografías tomadas con un microscopio de una muestra con un espesor mayor a  $1 \mu m$  a la que se removió el PSI diluyéndolo con una mezcla de KOH al 3%. Con ayuda de ImageJ® se contó el número de píxeles del diámetro en muchas direcciones (aleatorias) y se asignó al diámetro la media del resultado. La escala se fotografió simultáneamente usando un vidrio graduado sobre la muestra. La medición se repitió varias veces por distintas personas para reducir el impacto de una caracterización subjetiva del diámetro. Como es de esperar, el tamaño medio no depende de las condiciones de fabricación, solamente de la celda y el empaque ocupado. Las curvas de índices de refracción finales que se ocuparon para la síntesis de los arreglos fotónicos se muestran en la *Figura V-11*.



**Figura V-12** Espectro de reflectancia de una capa simple. Los índices de refracción para hacer el cálculo corresponden a índices de silicio poroso medidos experimentalmente. Note que no se trata del espectro ideal de una cavidad de Fabry-Perot, sin embargo, el corrimiento de los máximos y los mínimos permite conocer el cambio en el índice de refracción y la profundidad de la muestra.

Una vez caracterizada las capas de porosidades extremas, cada capa simple puede ser caracterizada por las posiciones de los máximos y mínimos de reflectancia donde se cumplen las condiciones de interferencia, *Figura V-12*, una alternativa equivalente es considerando el número de mínimos en un rango espectral.

$$\frac{2dn_1}{\lambda_1} - \frac{2dn_2}{\lambda_2} = 1 \quad (10)$$

Se hace mención de este método pues permite hacer una clasificación rápida, junto con el modelo de Bruggeman si no se cuenta con un equipo óptico que permita hacer un mejor ajuste.

## Bibliografía

- [1] G. Korotcenkov, Ed., *Porous Silicon: From Formation to Application: Formation and Properties, Volume One*, 0 ed. CRC Press, 2016.
- [2] P. Myers, «Michael J. Sailor: Porous Silicon in Practice. Preparation, Characterization and Applications», *Chromatographia*, vol. 76, n.º 11-12, pp. 721-721, jun. 2013, doi: 10.1007/s10337-013-2453-3.
- [3] O. Bisi, S. Ossicini, y L. Pavesi, «Porous silicon: a quantum sponge structure for silicon based optoelectronics», *Surf. Sci. Rep.*, vol. 38, n.º 1-3, pp. 1-126, abr. 2000, doi: 10.1016/S0167-5729(99)00012-6.
- [4] A. D. Ruíz Pérez, M. B. de la Mora, J. L. Benítez, R. Castañeda-Guzmán, J. A. Reyes-Esqueda, y M. Villagrán-Muniz, «*In situ* study of porous silicon thin films thermal oxidation by pulsed laser photoacoustics», *Semicond. Sci. Technol.*, vol. 33, n.º 8, p. 085001, ago. 2018, doi: 10.1088/1361-6641/aacbe4.
- [5] S. Yaakob, M. Abu Bakar, J. Ismail, H. Hanif, A. Bakar, y K. Ibrahim, «The Formation and Morphology of Highly Doped N-type Porous Silicon: Effect of Short Etching Time at High Current Density and Evidence of Simultaneous Chemical and Electrochemical Dissolutions», *J Phys. Sci.*, vol. 23, pp. 17-31, ene. 2012.

- [6] S. Amdouni, M. Rahmani, M.-A. Zaïbi, y M. Oueslati, «Enhancement of porous silicon photoluminescence by electroless deposition of nickel», *J. Lumin.*, vol. 157, pp. 93-97, ene. 2015, doi: 10.1016/j.jlumin.2014.08.041.
- [7] J. Riikonen *et al.*, «Surface Chemistry, Reactivity, and Pore Structure of Porous Silicon Oxidized by Various Methods», *Langmuir*, vol. 28, n.º 28, pp. 10573-10583, jul. 2012, doi: 10.1021/la301642w.
- [8] R. Sierra, G. Romero-Paredes, y G. Rodríguez, «Estudio de la morfología superficial e índice de refracción en películas nanométricas de silicio poroso», ene. 2001.
- [9] M. Schubert, «Gravimetric Determination of the Porosity of Porous Silicon», p. 148.
- [10] E. S. Gopi, *Algorithm Collections for Digital Signal Processing Applications Using Matlab*. Springer Netherlands, 2007.
- [11] L. Pavesi y R. Guardini, «Porous Silicon: Silicon Quantum Dots for Photonic Applications», *Braz. J. Phys.*, vol. 26, abr. 1996.
- [12] Z. Dang *et al.*, «Silicon and porous silicon mid-infrared photonic crystals», *Appl. Phys. A*, vol. 112, n.º 3, pp. 517-523, sep. 2013, doi: 10.1007/s00339-013-7782-4.
- [13] D. Estrada-Wiese, J. A. del Río, D. Estrada-Wiese, y J. A. del Río, «Refractive index evaluation of porous silicon using bragg reflectors», *Rev. Mex. Física*, vol. 64, n.º 1, pp. 72-81, feb. 2018.
- [14] Z. Montiel-González, S. Escobar, R. Nava, J. A. del Río, y J. Tagüeña-Martínez, «Role of an Oxidant Mixture as Surface Modifier of Porous Silicon Microstructures Evaluated by Spectroscopic Ellipsometry», *Sci. Rep.*, vol. 6, n.º 1, p. 24798, jul. 2016, doi: 10.1038/srep24798.
- [15] V. V. Gozhenko y A. O. Pinchuk, «On the choice of the phase constant of the Fresnel transmission coefficient of a slab», *J. Opt.*, vol. 14, n.º 3, p. 035705, feb. 2012, doi: 10.1088/2040-8978/14/3/035705.
- [16] J.-H. Park, L. Gu, G. von Maltzahn, E. Ruoslahti, S. N. Bhatia, y M. J. Sailor, «Biodegradable luminescent porous silicon nanoparticles for in vivo applications», *Nat. Mater.*, vol. 8, n.º 4, Art. n.º 4, abr. 2009, doi: 10.1038/nmat2398.
- [17] Y. Xiu, L. Zhu, D. W. Hess, y C. P. Wong, «Hierarchical Silicon Etched Structures for Controlled Hydrophobicity/Superhydrophobicity», *Nano Lett.*, vol. 7, n.º 11, pp. 3388-3393, nov. 2007, doi: 10.1021/nl0717457.

## Capítulo VI.

### Resultados

#### Resumen.

En el presente capítulo se exponen los resultados finales de la investigación:

- a) En el capítulo II se planteó el estudio de arreglos aleatorios tipo microcavidad, lo que ya es un problema original, pero se discutió en esa sección por estar en el contexto apropiado. Se partió de la demostración de cómo un arreglo aleatorio puede tener un comportamiento propio de las microcavidades. Esto llama la atención, porque hasta ahora, la localización del campo en arreglos aleatorios no está asociada a una alta transmitancia, sin embargo, empleando el modelo de la matriz de transferencia se mostró que un arreglo aleatorio puede tener un estado de alta transmisión en medio de la brecha fotónica, de forma completamente análoga a los arreglos de Bragg o cuasi cristalino en simetría de espejo. Al mismo tiempo, el análisis de arreglos aleatorios ofrece una solución al problema de la reducción de la localización del campo o la reducción de la transmitancia, cuando el arreglo tipo microcavidad se encuentra acoplado a un sustrato, es decir, el índice de refracción del medio de transmisión y de incidencia, son diferentes. Este efecto se demuestra experimentalmente en microcavidades formadas con Silicio poroso.
- b) El objetivo inicial del estudio fue observar cómo se modifica la luminiscencia de puntos cuánticos en los bordes de las brechas de arreglos de Fibonacci conjugados. Los arreglos de Fibonacci han llamado la atención por las ventajas que ofrecen con respecto a los arreglos simétricos[1–3]:
  - a. El espectro no tiene una periodicidad regular como la simetría cristalina, en su lugar presentan una estructura tipo fractal.
  - b. Los estados permitidos son estados aislados y no bandas continuas.
  - c. Los cálculos numéricos muestran una menor reducción en la intensidad máxima del campo eléctrico comparado con las microcavidades (solo cuando se considera la absorción de los materiales)
  - d. La localización no es exponencial, sino que presentan una localización extendida que sigue una regla de potencias (localización crítica).
  - e. Los arreglos de Fibonacci conjugados muestran transmisión perfecta a pesar de estar formados por un número finito de capas.

Todas estas propiedades se encuentran descritas en el capítulo II. Debido a que la rugosidad de las capas sintetizadas con el método de ataque electroquímico impone una limitación al uso de las regiones de transmisión perfecta, se explora la respuesta en el borde de las pseudobrechas. En ese capítulo se muestra la capacidad de repetibilidad de fabricación de arreglos fotónicos de silicio poroso de Fibonacci conjugado, el método para establecer las características del diseño y la respuesta final de los puntos cuánticos en función de la dirección de incidencia: la separación del espectro unimodular, característico de una

suspensión coloidal, en un espectro bimodular propio de un acoplamiento fuerte, que se conoce como separación de Rabi [4].

La separación de Rabi llama la atención debido a que los puntos cuánticos en microcavidades de silicio poroso generalmente muestran una reducción del ancho de emisión y una reducción del tiempo de emisión, lo que es característico de un acoplamiento débil. Esto se debe a que los puntos únicamente son afectados por las regiones de alta densidad de estados y alta intensidad de campo, es decir, se mejora la tasa de excitación y de emisión de los puntos cuánticos. Sin embargo, debido a que la distribución de campo en arreglos de Fibonacci es extendida, y por lo tanto tiene varias regiones de mínimos locales de la función de intensidad máxima del campo, además de una alta densidad de estados, se logra un acoplamiento fuerte. El acoplamiento fuerte puede dar lugar a respuesta de emisión laser en las condiciones apropiadas [5]. Lamentablemente el escaso acceso al laboratorio debido a la presente pandemia no nos permitió explorar a fondo las características de emisión.

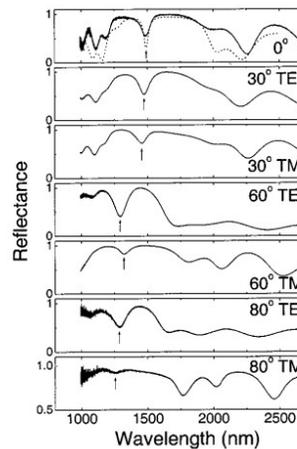
Para determinar la condición de camino óptico que se impuso a los arreglos de Fibonacci conjugado, fue necesario hacer la caracterización de los mismos luego de haber introducido los puntos cuánticos, con la intención de compensar el corrimiento y asegurar que el máximo de emisión de los puntos cuánticos en una suspensión coloidal empatara con los bordes de la pseudobrecha fotónica.

Durante el análisis de espectros es frecuente que se empleen métodos de suavizado. Dada la importancia de este tipo de algoritmos se ha agregado el anexo A), donde se explican las características de una de las técnicas de suavizado empleadas y se muestra una propuesta para la propagación del error resultante del proceso de suavizado. Si solo se mide un espectro, es decir no se puede calcular una desviación estándar de la señal, tener una forma de estimar el error usando una técnica de suavizado ofrece una ventaja en técnicas donde se asume que el error es cero, como la correlación de señales donde no se suele reportar error, pues la correlación del ruido aleatorio es 0. Sin embargo, no se suele verificar que el ruido extraído es ruido blanco y normal, implicando que el ruido sustraído pueda resultar en errores en la medición.

## VI Microcavidades asimétricas

Las tecnologías de control de fuentes de luz son cada vez más importantes, en diversos trabajos la emisión es modificada mediante el uso de dispositivos fotónicos [6], entre ellos las estructuras multicapas (cristales fotónicos unidimensionales) [7, 8]. Las aplicaciones se incluyen en diversas ramas de estudio: aplicaciones optoelectrónicas, aplicaciones médicas, cavidades láser, etc. [9]. La principal herramienta que se explota en las aplicaciones es la respuesta de luz a una función dieléctrica que varía periódicamente o cuasi periódicamente [10–13]. La periodicidad de las capas influye en la emisión de luz en al menos de tres formas distintas[14]:

- i) Incrementan la intensidad de excitación reduciendo los umbrales de respuesta. El efecto es explicado a partir de la localización del campo en la región de excitación, lo que incrementa la probabilidad de que el sistema sea excitado [15].
- ii) Incrementan la tasa de emisión de radiación y la eficiencia cuántica, la cual está en función de la densidad de estados. El método para conocer la densidad de estados se expuso en el capítulo II.
- iii) Modifican el patrón de radiación a partir de las direcciones permitidas de emisión. Esto limitando la región espectral y la dirección en que puede ser emitido un fotón mediante el control de las regiones prohibidas en función de la dirección de propagación, como muestra en la Figura VI- 1, del trabajo de Kevin M. Chen [16].



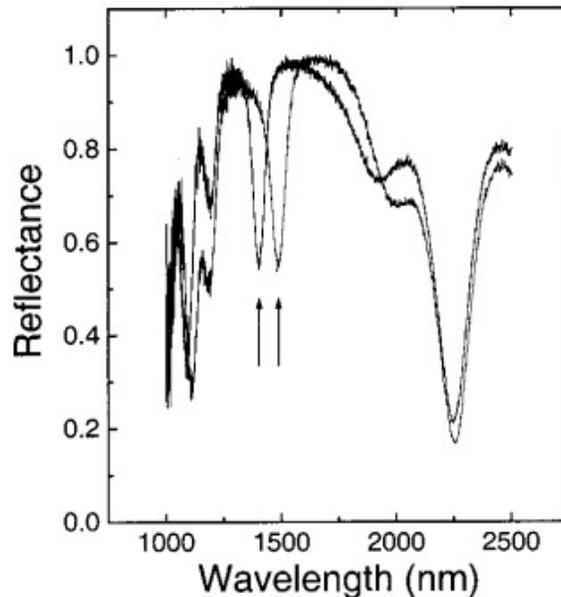
**Figura VI- 1** Dependencia de la región de resonancia de una microcavidad en función del ángulo de propagación, limitando las direcciones posibles de emisión. Además, se observa que la región no tiene transmisión perfecta, reduciendo tanto el factor de calidad como la localización del campo. Figura de Kevin M. Cheng [16].

En el caso de los arreglos simétricos, las propiedades más importantes son la direccionalidad y el factor de calidad  $Q$  [17], definido como la razón entre la frecuencia de resonancia  $\nu_0$  y el ancho de altura media  $\delta\nu$  ( $Q = \nu_0/\delta\nu$ ).

Tomando en cuenta que el factor de calidad está íntimamente ligado a la densidad de estados (ver capítulo II), un análisis de densidad de estados es una alternativa complementaria al factor de calidad. Sin embargo, debe tenerse cuidado en que las ecuaciones expuestas en el capítulo II para el cálculo de las densidades de estados solamente son válidas para índices de refracción reales. El estudio de las densidades de estados puede ser muy fructífero, más aun cuando no se trata de un estado en la brecha, como la brecha misma [18] o los bordes de las brechas[19].

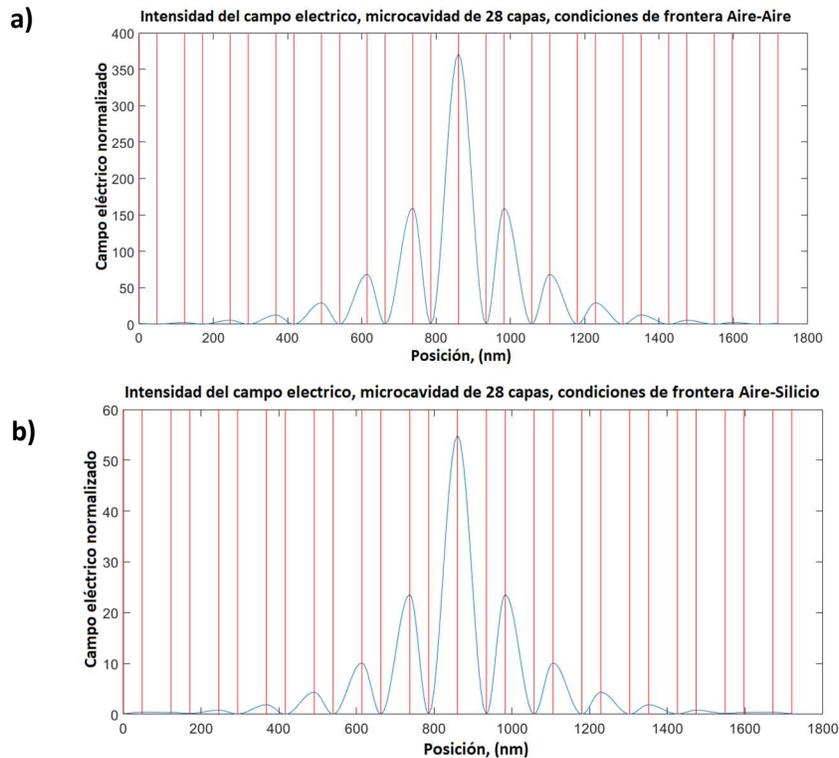
La diversidad de materiales dieléctricos y metálicos en los que se han implementado dispositivos de control de emisión y sensores es muy vasta. El silicio poroso es uno de ellos, con una gran diversidad de aplicaciones, sólo por mencionar dos de ellas, se ha usado para incrementar la eficiencia de materiales luminiscentes y reducir el umbral de respuesta no lineal [20, 21].

Sin embargo, es frecuente que estos sistemas se encuentren soportados en la oblea de silicio donde se formaron, lo que tiene como resultado una reducción en los efectos de localización del campo, como se observa en la reflectancia de la *Figura VI- 2*. En esa figura, el mínimo de reflectancia para ondas transversal eléctricas (TE) es mucho mayor que 0 y el máximo de la brecha fotónica es menor a 1. Por lo que se reduce tanto la localización del campo como el factor de calidad, características determinantes de este tipo de dispositivos.



**Figura VI- 2**

Espectro de reflectancia de microcavidades a incidencia normal con diferentes espesores de defectos, para longitudes de onda de resonancia de 1400 nm. y 1500 nm. en una condición de camino óptico de  $d = \lambda/4n$ . Observe que está muy lejos de ser nula aún en la resonancia. Imagen de Kevin M. Cheng [16].



**Figura VI- 3** Reducción del campo eléctrico debida a la diferencia entre los índices de refracción entre el medio de incidencia y el de transmisión, para un medio perfectamente plano, con índice de refracción real, simulado con el método de la matriz de transferencia de ondas planas,  $\lambda = 500nm$  a) Aire-aire, b) Aire-silicio.

El efecto de esa reducción del factor de calidad se muestra de forma explícita en la *Figura VI- 3*, donde se ilustra el cálculo de la intensidad del campo eléctrico, a) en una microcavidad auto soportada ( $n_i = n_t = n_{aire}$ ), y b) en una microcavidad en el soporte de silicio ( $n_i = n_{aire} \neq n_t = n_{silicio}$ ). La reducción de la intensidad del campo en la longitud de onda de máxima localización para una microcavidad fabricada con silicio poroso es, en este caso, al menos en una escala de diez, cuando el índice de refracción de la región de transmisión es distinto del índice de refracción del medio incidente.

Las condiciones del cálculo de la *Figura VI- 3* fueron: una microcavidad de 28 capas, tomando en cuenta índices de refracción efectivos, medidos para silicio poroso sin considerar absorción y asumiendo interfases completamente planas y paralelas al frente de onda.

### VI.I.i Microcavidad asimétrica óptima.

Cuando un rayo de luz viaja entre dos medios separados por una interfase plana que no lo extingue, la energía total de los rayos reflejado y transmitido es igual a la energía del rayo incidente. Sin embargo, aun suponiendo que el coeficiente de transmitancia es 1, como sería el caso de una microcavidad ideal, el rayo incidente y transmitido no serán el mismo, dado que en cada región hay una admitancia distinta.

En el modelo clásico, al estudiar el cambio inducido en el vector de Pointig que además está asociado al flujo de energía, se muestra que no hay transmisión perfecta a incidencia normal, si el índice de refracción del medio de incidencia y el índice de refracción del medio de transmisión son distintos. Esto es, cuando un rayo que viaja de un medio de índice de refracción  $\sqrt{\mu_0 \varepsilon_0} = n_0$  a un medio de índice de refracción  $\sqrt{\mu_1 \varepsilon_1} = n_1$  la relación de reciprocidad expuesta en el capítulo II está definida como:

$$\mathcal{T} = \sqrt{\frac{\mu_0 \varepsilon_1 \cos \theta_1}{\mu_1 \varepsilon_0 \cos \theta_0}} |t|^2 \quad (1)$$

Esta reducción de la transmitancia, en la región de la brecha fotónica, puede ser resuelta ocupando un espejo de Bragg con el número de capas que depende del contraste.

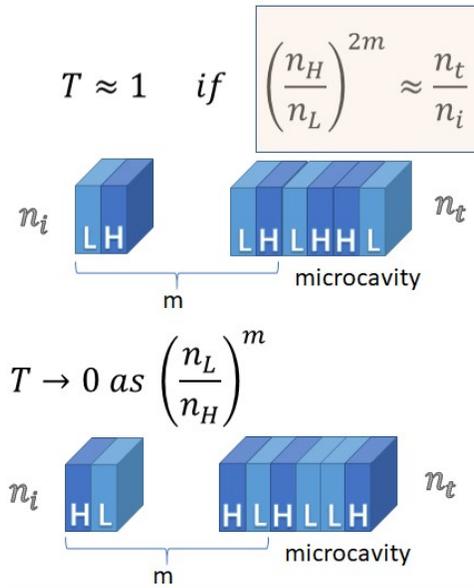
Retomando el análisis descrito en el capítulo II la matriz de transferencia asociada a una bicapa de índices de refracción  $n_1 n_2$  ( $T_{n_1 n_2}$ ) es inversa a la matriz de una bicapa  $n_2 n_1$  ( $T_{n_2 n_1}$ ). En la descripción de la solución de las ecuaciones de Maxwell (primera sección capítulo I) la matriz es:

$$T_{n_1, n_2} = \begin{pmatrix} \cos(k_1 z) \cos(k_2 z) + \frac{n_2}{n_1} \sin(k_1 z) \sin(k_2 z) & i \left( \frac{\sin(k_1 z) \cos(k_2 z)}{n_1} + \frac{\sin(k_2 z) \cos(k_1 z)}{n_2} \right) \\ i [n_1 \sin(k_1 z) \cos(k_2 z) + n_2 \sin(k_1 z) \cos(k_2 z)] & \cos(k_1 z) \cos(k_2 z) + \sin(k_1 z) \sin(k_2 z) \frac{n_1}{n_2} \end{pmatrix} \quad (2)$$

donde  $k_i$  es el cambio de fase en el medio, dependiente del ángulo de propagación en cada capa  $k_i = k_0 n_i \cos(\theta_i)$ .

En una microcavidad, cuando la onda incidente tiene una longitud de onda resonante, el defecto mide  $\lambda/2$ , la transmitancia es máxima o perfecta en el caso de una microcavidad infinita sin absorción, o lo que es equivalente, tendrá una reflectancia nula o 0. En una región espectral lo suficientemente estrecha, la matriz de transferencia de una bicapa es aproximadamente diagonal, por lo que, para un número limitado de capas, la validez de la microcavidad aleatoria descrita en el capítulo 2 continúa siendo cierta.

Para mostrar que un espejo de Bragg resuelve el problema de la reducción del factor de calidad de una microcavidad, a incidencia normal, se parte de la matriz de transferencia del espejo en la longitud de onda de resonancia en función del número de bicapas  $N$ .



**Figura VI- 4** Condiciones de asimetría para microcavidades (a la derecha), donde L se refiere a índice de refracción bajo (Low) y H se refiere al índice de refracción alto (High). Note que, si la asimetría no es la correcta, es decir, la bicapa se coloca en el lado equivocado, la transmitancia tiende exponencialmente a 0.

$$T_{n_1, n_2} = \begin{pmatrix} \left(-\frac{n_1}{n_2}\right)^N & 0 \\ 0 & \left(-\frac{n_2}{n_1}\right)^N \end{pmatrix} = T_{n_2, n_1}^{-1} \quad (3)$$

Asumiendo una microcavidad autosoportada o que cumple con la condición  $n_i = n_t$ , entonces la matriz de transferencia óptica será simétrica,  $T_{microcavidad} = (T_{n_1 n_2})^N (T_{n_2 n_1})^N = 1$

Al agregar una bicapa antes o después de la microcavidad la matriz de transferencia será modificada y por lo tanto la transmitancia. En el caso de agregar una bicapa a la izquierda, la matriz será  $(T_{n_1 n_2})^{N+1} (T_{n_2 n_1})^N = T_{n_1 n_2}$ , o  $(T_{n_1 n_2})^N (T_{n_2 n_1})^{N+1} = T_{n_1 n_2}$  si la bicapa se agrega a la derecha. En este caso, estamos considerando que los índices de refracción que forman el espejo de Bragg son los mismos que los de las capas que forman la microcavidad, lo que no es una condición necesaria. En ese caso el espejo de Bragg tendrá el papel de una asimetría.

Para encontrar la condición de asimetría, o el número de bicapas que formarán la asimetría que compensa el efecto del soporte, se analiza el coeficiente de reflectancia expresado en la ecuación (4) y se resuelve para minimizarlo, o lo que es equivalente, la transmitancia será máxima o perfecta si no hay extinción.

$$r = \frac{\sqrt{\frac{\epsilon_i}{\mu_i}} \cos \theta_i \left( M_{11} + \sqrt{\frac{\epsilon_t}{\mu_t}} \cos \theta_t M_{12} \right) - \left( M_{21} + \sqrt{\frac{\epsilon_t}{\mu_t}} \cos \theta_t M_{22} \right)}{\sqrt{\frac{\epsilon_i}{\mu_i}} \cos \theta_i \left( M_{11} + \sqrt{\frac{\epsilon_t}{\mu_t}} \cos \theta_t M_{12} \right) + \left( M_{21} + \sqrt{\frac{\epsilon_t}{\mu_t}} \cos \theta_t M_{22} \right)} \quad (4)$$

Por lo que:

$$R = \left| \frac{\frac{n_t}{n_i} \left( \frac{n_a}{n_b} \right)^{2N} - 1}{\frac{n_t}{n_i} \left( \frac{n_b}{n_a} \right)^{2N} + 1} \right|^2.$$

De esta expresión se deduce que la reflectancia es 0, cuando:

- $n_i < n_t$  y  $n_1 < n_2$ , o  $n_t < n_i$  y  $n_2 < n_1$ .
- La razón entre los índices de refracción de las capas de la asimetría, los índices de refracción de los medios de incidencia y transmisión y el número de bicapas cumple con la condición (5).

$$\left( \frac{n_1}{n_2} \right)^m \approx \frac{n_t}{n_i} \quad (5)$$

La *Figura VI- 4* muestra el comportamiento de las asimetrías. Cuando los índices de refracción de los medios de incidencia y transmisión son idénticos el número de bicapas agregadas debe ser 0,  $\left( \frac{n_1}{n_2} \right)^0 = 1$ .

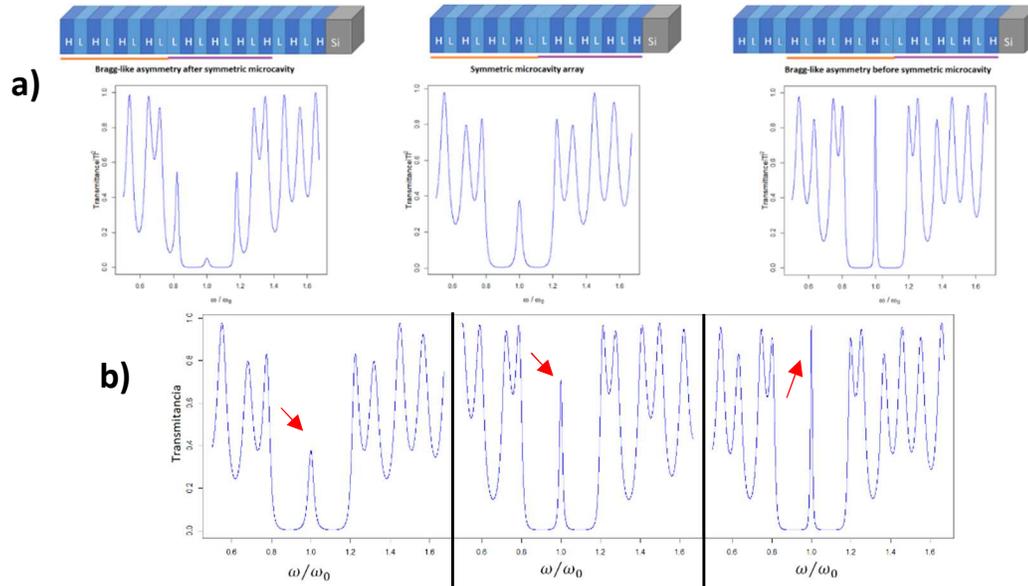
El efecto de la asimetría depende de la relación entre los índices de la primera y segunda capas (cuál de ellos es mayor), por lo que puede reducir aún más la transmitancia o incrementarla. En la *Figura VI- 5*, se observa la diferencia entre agregar una asimetría entre la interfase aire-Psi y entre la interfase Psi-Si cuando el índice de refracción de la primera capa es mayor al índice de refracción de la segunda. En el primer caso la asimetría está antes de la microcavidad y aumenta la transmitancia, en el segundo la asimetría está al final de la microcavidad y reduce la transmitancia. La lateralidad de la asimetría se puede deducir de la relación entre los índices de las capas y los medios de incidencia y transmisión, si  $n_i < n_t$  y  $n_1 > n_2$ , habrá un incremento de transmisión si la asimetría se coloca antes de la microcavidad (interfase Aire-Psi) y una reducción exponencial si la bicapa se coloca después de la microcavidad.

Para mejorar la resistencia mecánica en el silicio poroso lo usual es que  $n_1 < n_2$ , por lo que para incrementar la transmitancia se deben colocar la asimetría después de la microcavidad (interfase Psi-Si), de forma contraria a lo mostrado en la *Figura VI- 5*.

Considere que, si se incrementa el número de bicapas por encima de la condición óptima, la transmitancia se verá reducida de forma exponencial como cualquier espejo de Bragg.

En la *Figura VI- 5 b)* se observa el cambio en la transmitancia modelado para microcavidades formadas por espejos de Bragg de 4 periodos, con una asimetría que se va aproximando a la condición óptima descrita por la ecuación (5). Note que las distribuciones de capas de bajo índice y

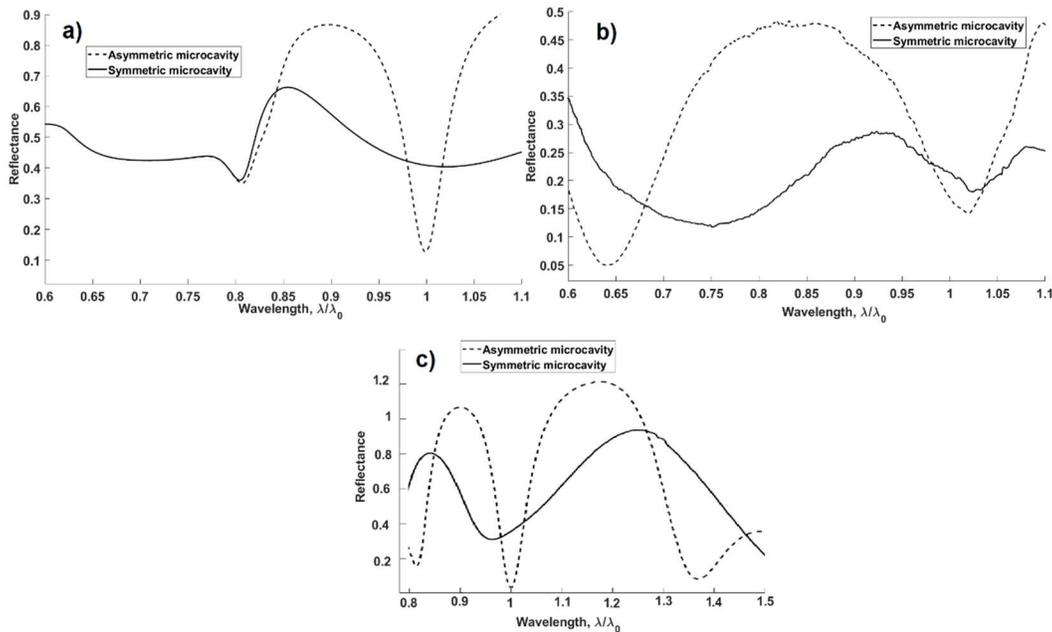
alto índice están invertidas en los dos casos (a y b), para la imagen a) las bicapas son Alto-Bajo (High-Low) y para las microcavidades de la imagen b) son Bajo-Alto. Esa diferencia sirve para mostrar que la asimetría depende tanto de la bicapa inicial como de la relación entre los índices.



**Figura VI- 5** Efecto de la asimetría en la transmitancia total, a) comparación del efecto de asimetría antes de la microcavidad o después de ella (interfase Psi-Si), b) Incremento de la transmitancia al agregar una asimetría que se aproxima a la condición óptima: a la izquierda, transmitancia de una microcavidad soportada, al centro, microcavidad con una asimetría no óptima y a la derecha, transmitancia con asimetría que cumple con la condición (5).

Para los cálculos se ocuparon índices de refracción constantes, disponibles en silicio poroso, a una longitud de onda de  $500 \text{ nm}$ . El uso de un índice de refracción constante tiene un objetivo estético, pues la función de dispersión del silicio poroso está lejos de ser constante [22]. Sin embargo, la constancia del índice permite ver el comportamiento general de la microcavidad, sin los efectos introducidos por la variación del camino óptico debido al cambio en el índice de refracción.

En la *Figura VI- 6* a), b) y c), se muestran las reflectancias de arreglos i) **ABBA**, ii) **ABBABABA**, iii) **ABABBABA** y iv) **ABABBABABABA**. La línea continua representa el caso simétrico y la línea discontinua el caso con una asimetría óptima que es de 2 bicapas. En la figura a) los espectros corresponden al cálculo hecho con la técnica de la matriz de transferencia usando los índices de refracción complejos calculados en el capítulo V, en las figuras b) y c) los espectros son los medidos experimentalmente para el caso simétrico y asimétrico.

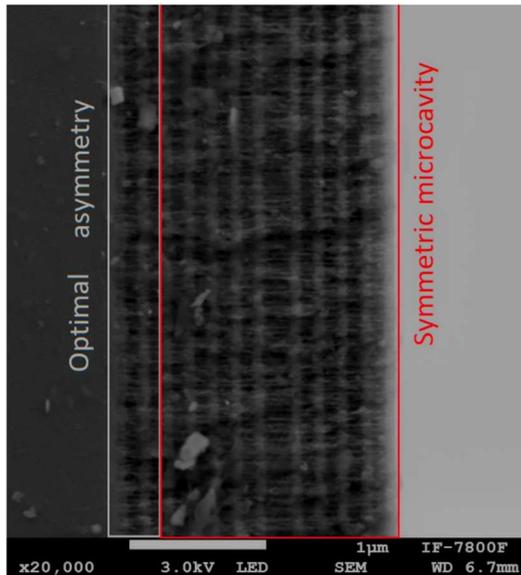


**Figura VI- 6**

- Línea continua, reflectancia de una microcavidad simple ABBA, simulada con el método de la matriz de transferencia, para un arreglo multicapa de silicio poroso. Línea discontinua, reflectancia simulada para una microcavidad asimétrica de silicio poroso.
- Curvas experimentales de las estructuras simuladas en a)
- Curvas experimentales para arreglos ABABBABA y ABABBABABABA

Se podría argumentar que un arreglo tan corto como el arreglo **ABBA** no es suficiente para medir la localización del campo, lo que se corrobora con el parecido que tiene el espectro de reflectancia de dicho arreglo con el de una capa simple. Sin embargo, se hizo para enfatizar que, a pesar de ser un arreglo muy corto, la microcavidad asimétrica ya muestra la definición de un estado de alta transmitancia y la definición de una brecha. Esto se explica por qué la brecha crece exponencialmente y la asimetría fuera del estado permitido sigue siendo un espejo de Bragg. Por otro lado, la estructura **ABABBABA** muestra una definición de brecha y estado con menor factor de calidad  $Q$  que la muestra **ABBABABA**, a pesar de que tienen el mismo número de capas.

Además, para el espectro del arreglo **ABABBABABABA**, se observa experimentalmente que se tiene un estado de reflectancia muy cercano a 0 en la brecha fotónica. Esto es importante, porque en el caso de arreglos soportados no es posible alcanzar el estado de reflectancia nula sin importar el número de capas. Esto se debe no solo a la diferencia de índices de refracción de los medios de incidencia y transmisión, también a la influencia de la rugosidad de las interfases y a la absorción. Esta última juega un papel fundamental en el diseño de microcavidades, pues mientras mayor sea la absorción, más rápida será la reducción del campo máximo o a menor número de bicapas la microcavidad se parecerá a un espejo de Bragg. La estructura sintetizada para medir la reflectancia del caso c) se muestra en la *Figura VI- 7*.



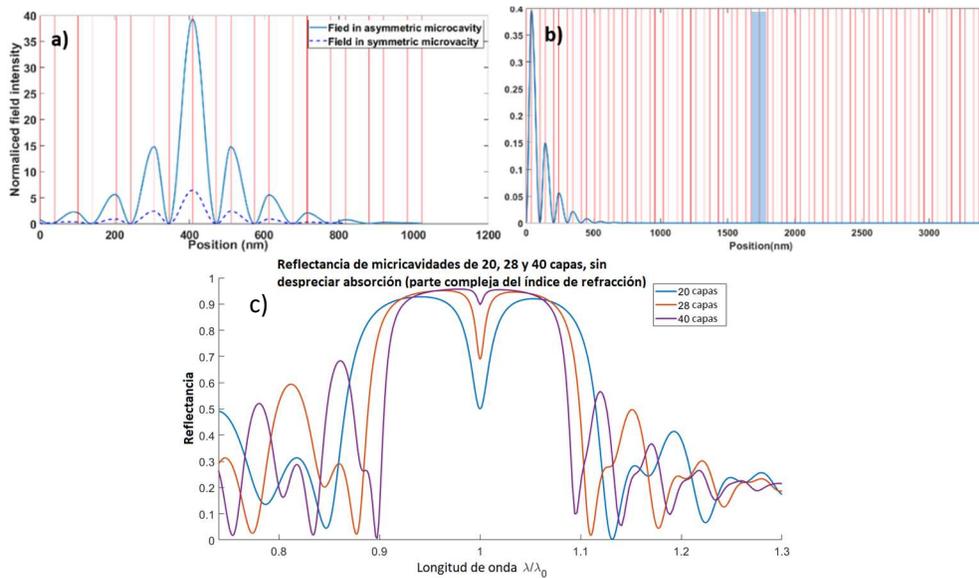
**Figura VI- 7** Estructura asimétrica óptima fabricada en silicio poroso

La falta de ajuste experimental en el caso de la figura a) se debe a una mala aproximación del índice de refracción. Una de las fuentes de error es la rugosidad en las interfases, pues debido a ella la parte imaginaria medida por elipsometría (método usado en este trabajo) no describe correctamente sustratos gruesos. El estudio de la rugosidad fue hecho por el Alumno Iván Montaña Jaramillo en su tesis de licenciatura.

La fabricación de microcavidades en materiales reales tiene otras características importantes:

- Reducción de la transmitancia y la densidad de estados debido al efecto de los índices de refracción del medio de incidencia y el índice del medio de propagación
- Si el material es absorbente el campo puede atenuarse por completo antes de llegar al defecto.
- Debido a lo anterior la densidad de estados en la región del defecto puede no crecer en absoluto.
- Cuando el número de capas crece, la microcavidad será equivalente a un espejo de Bragg.

En la *Figura VI- 8 a)* y *b)* se observa cómo cambia el campo eléctrico dentro de la microcavidad, tomando en cuenta la absorción del material, al incrementar el número de capas. En *a)* se comparan los casos simétrico y asimétrico, observándose que, en general, la intensidad del campo alcanzado en el caso asimétrico es al menos un orden de magnitud mayor. En la *figura b)* se observa que el campo eléctrico en una microcavidad, cuando el número de capas que conforman el espejo de Bragg inicial es lo suficientemente grande como para atenuar el campo eléctrico mucho antes de llegar a la región de resonancia, únicamente preserva la caída exponencial propia del espejo de Bragg. El defecto en color azul está resaltado para dar mayor claridad a la estructura, no debe confundirse ese color con la intensidad del campo, que en el defecto es aproximadamente 0. En *c)* se muestra el cambio en el espectro de reflectancia de una microcavidad al aumentar el número de capas. El



**Figura VI- 8** a) comparación del campo eléctrico entre un arreglo simétrico y un asimétrico optimizado, b) reducción del campo eléctrico en una microcavidad cuando hay absorción, c) mismo efecto observado desde el punto de vista de la reflectancia, donde la microcavidad se comporta como un espejo de Bragg después de muchas capas. La columna azul en el centro de la figura b es para resaltar el defecto de la microcavidad, pero en ese punto el campo eléctrico ya es aproximadamente 0.

resultado es el mismo que en la figura b), al incrementar el número de capas que componen la microcavidad se comporta como un espejo de Bragg.

La *Figura VI- 8* es un escenario optimista, pues las condiciones experimentales no pueden reproducir ese resultado cuando la longitud de onda tiende al ultravioleta, ya que el índice complejo, que se calculó por elipsometría para películas delgadas (250 nm), está subestimado. Lo que implica que se tenderá al espectro de un espejo de Bragg en una generación menor a la calculada en la figura.

## VI.II Estudio de la luminiscencia en arreglos de Fibonacci conjugado.

En general, para mostrar que los cambios en la luminiscencia son inducidos por la localización del campo en la región de emisión y no por el campo en la región de excitación, se ocupan dos criterios, primero la reducción del ancho a la altura media del pico principal y segundo la razón entre la intensidad de emisión en la frecuencia de resonancia y la intensidad emitida en el resto del espectro.

Como se mostró en el capítulo II, en los arreglos de Fibonacci hay un incremento en la densidad de estados en las regiones de transmitancia perfecta [23] y en el borde de las pseudobrechas, que es explicado por la reducción de modos permitidos. Primero que nada, porque ya no existe periodicidad, por lo tanto, no es necesariamente cierto que los armónicos estarán presentes como estados permitidos, y en segundo lugar, porque la falta de regularidad en la distribución de las capas aumenta las regiones de alta reflectancia [11]. En la *Figura II-11* del capítulo II, se muestra la función de densidad de estados para los arreglos de Fibonacci conjugado.

La razón por la cual no se exploraron los efectos en la luminiscencia en la zona de transmitancia perfecta, a pesar de que la densidad de estados es mucho mayor que en la región de los bordes de las pseudobrechas, es la reducción de la localización del campo en esa región debido a la absorción, la dispersión y la presencia del sustrato. En la región de transmitancia perfecta el comportamiento es muy similar al expuesto para el caso de las microcavidades, sin embargo, dada la naturaleza cuasi cristalina del arreglo, no basta con la corrección asimétrica para mejorar la respuesta.

Hablar de regiones con alta densidad de estados es equivalente a hablar de regiones donde el campo se localiza, dado que se buscó una estructura donde el máximo de emisión de los puntos cuánticos estuviese sintonizado con la región de alta densidad, fue necesario determinar el camino óptico de las capas, en otras palabras, el tamaño de las capas (conociendo el índice de refracción). Para determinar el tamaño de las capas, se calculó la intensidad del campo eléctrico dentro de la estructura de Fibonacci conjugado en función de la longitud de onda de la luz incidente, con las siguientes condiciones:

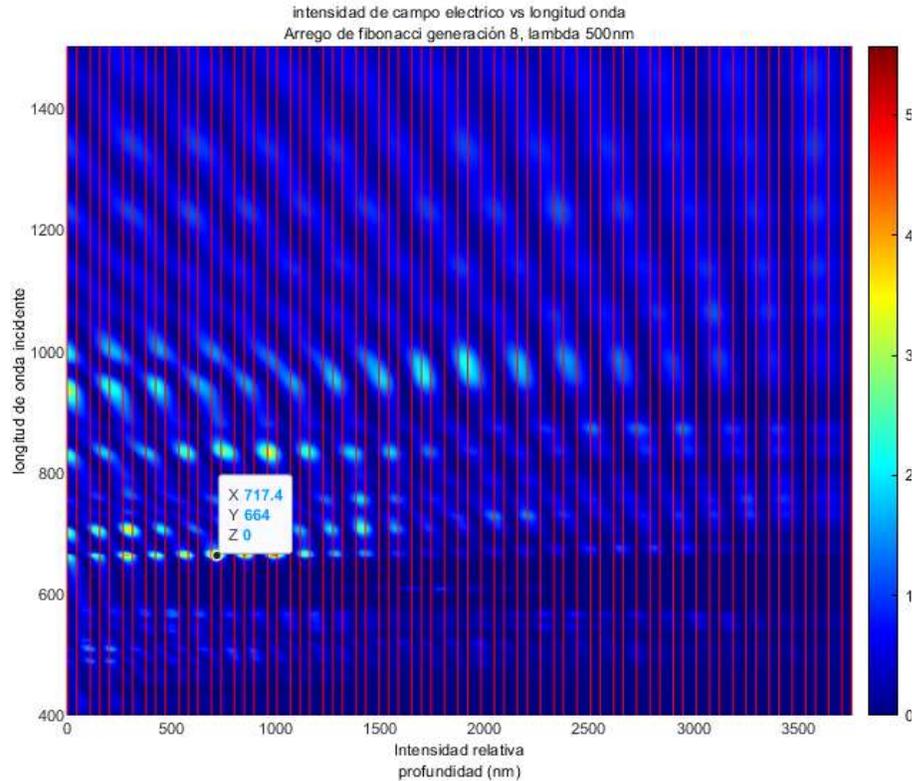
- Índice de refracción complejo, determinado en el capítulo V.
- Interfases planas.
- Presencia del sustrato.

Dadas las propiedades de escalabilidad de los arreglos fotónicos [24], bastó con hacer el cálculo de la intensidad del campo eléctrico para un camino óptico dado. La *Figura VI- 9* muestra la intensidad del campo calculada con el método de matriz de transferencia de múltiples reflexiones (capítulo II), en escala de color, en función de la profundidad (eje  $x$ ) y la longitud de onda (eje  $y$ ), para un arreglo de Fibonacci conjugado de generación 8. Se eligió la generación ocho de manera práctica, pues incrementar la generación, dadas las condiciones de rugosidad y absorción, implica modificar la respuesta esperada o que tanto se ajustan los espectros de reflectancia medidos y calculados. En otras palabras, el criterio de elección en este trabajo fueron las condiciones experimentales más que las condiciones teóricas.

Una vez detectadas las regiones espectrales donde el campo alcanza su máxima amplitud, o presenta una localización mayor, se comparan con el espectro de reflectancia que corresponden a las regiones de transmitancia perfecta y los bordes de las pseudobrechas, pero debido a la absorción el efecto es más importante en los bordes.

A pesar de la absorción, la intensidad máxima del campo en los bordes de las pseudobrechas aumenta al aumentar el número de capas, lo que no sucede en las microcavidades de materiales donde no se desprecia la absorción. En éstas últimas la intensidad máxima del campo se reduce conforme la microcavidad tiende a un espejo de Bragg.

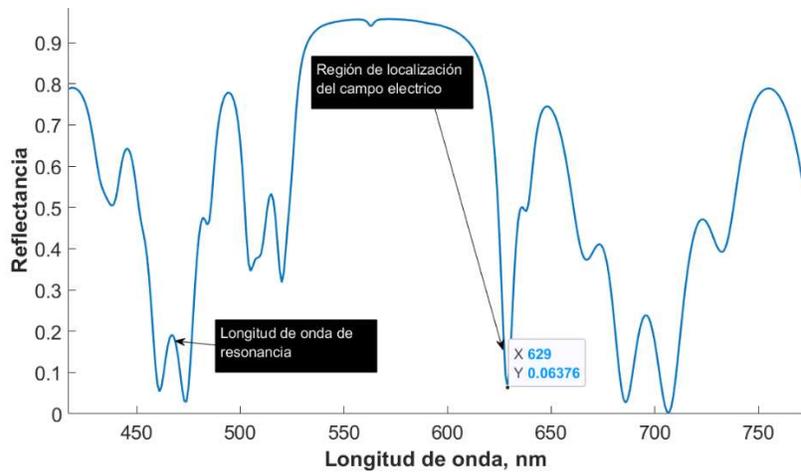
En la *Figura VI- 10* se muestra la reflectancia de un arreglo de Fibonacci conjugado generación 8, señalando las regiones de localización de campo. La estructura analizada está sintonizada para tener un borde de pseudobrecha a  $365 \text{ nm}$ , dado que en ese momento ya se había terminado el estudio de búsqueda de condiciones de síntesis.



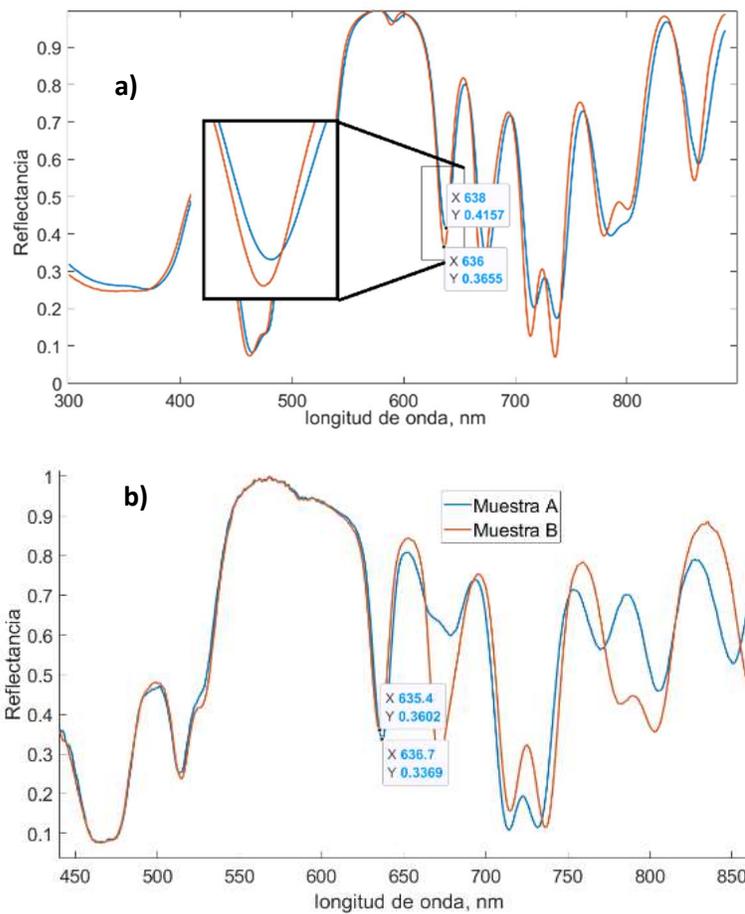
**Figura VI- 9** Intensidad de campo eléctrico de estructuras de Fibonacci conjugado generación ocho, considerando un índice de refracción complejo. La absorción reduce la densidad de estados para estados permitidos dentro de las pseudobrechas, pasando a ser los ejes de las pseudobrechas las regiones con mayor localización de campo.

Para formar los arreglos fotónicos de silicio poroso, se ocupó la metodología descrita en la tesis de Deniss W [25], tanto para el índice de refracción como para mejorar el ajuste entre espectros esperados y observados.

El resultado de la síntesis se ilustra en la *Figura VI- 11*. En la imagen a) se observan los espectros de reflectancia de dos muestras de Fibonacci conjugado, después del tratamiento térmico, ajustando el borde de la pseudobrecha a una emisión en  $630 \text{ nm}$ . El tratamiento térmico fue necesario para pasivar la superficie y evitar que los iones de hidrógeno residuales del anodizado degraden los puntos cuánticos. En el momento de la redacción de este trabajo, el autor no conoce ningún método que permita predecir correctamente como se modificará la estructura luego del tratamiento. Sin embargo, se ha estudiado la tasa de crecimiento de la película de óxido en la pasivación del silicio en función del tiempo de recocido [26]. En general, los espectros pueden sufrir cambios impredecibles en cada paso, lo que no implica que no se puedan estimar empíricamente, puesto que, si se repite el recocido, manteniendo los parámetros para estructuras diferentes, el corrimiento es muy parecido. La *Figura VI- 11 b)* ilustra cómo se modifican los espectros después de introducir los puntos cuánticos en los poros de la estructura.



**Figura VI- 10** Espectro de reflectancia de una muestra de Fibonacci conjugado generación ocho, donde se señalan las regiones de localización del campo.



**Figura VI- 11** Espectros de reflectancia normalizados de estructuras de silicio poroso, con el borde de las brechas alrededor de 630 nm. a) muestras pasivadas con un tratamiento térmico, b) muestras con puntos cuánticos dentro de la estructura.

Para introducir los puntos cuánticos en las estructuras fotónicas se limpió, con sumo cuidado, la película de aluminio depositado en la cara rugosa de la oblea de silicio, disolviéndola con HF y posteriormente enjuagando el sustrato con etanol. Hay que tener especial cuidado en no mojar la región atacada de silicio poroso, pues si el ácido entra en contacto con la región porosa el óxido de silicio será disuelto pasivamente, cambiando las condiciones de camino óptico a regiones que no son viables para hacer el estudio. La limpieza es importante porque la solución coloidal está formada de puntos cuánticos disueltos en Tolueno, el cual disuelve parcialmente al aluminio. En pruebas realizadas para encontrar las condiciones de introducción de los puntos cuánticos se observó que el aluminio disuelto en el Tolueno degrada los puntos cuánticos.

Una vez limpia la muestra se deja reposar 24 horas para asegurar que no haya restos de HF, tras de lo cual es sumergida durante 24 hrs en la solución coloidal a una concentración de 0.5 mg por ml.

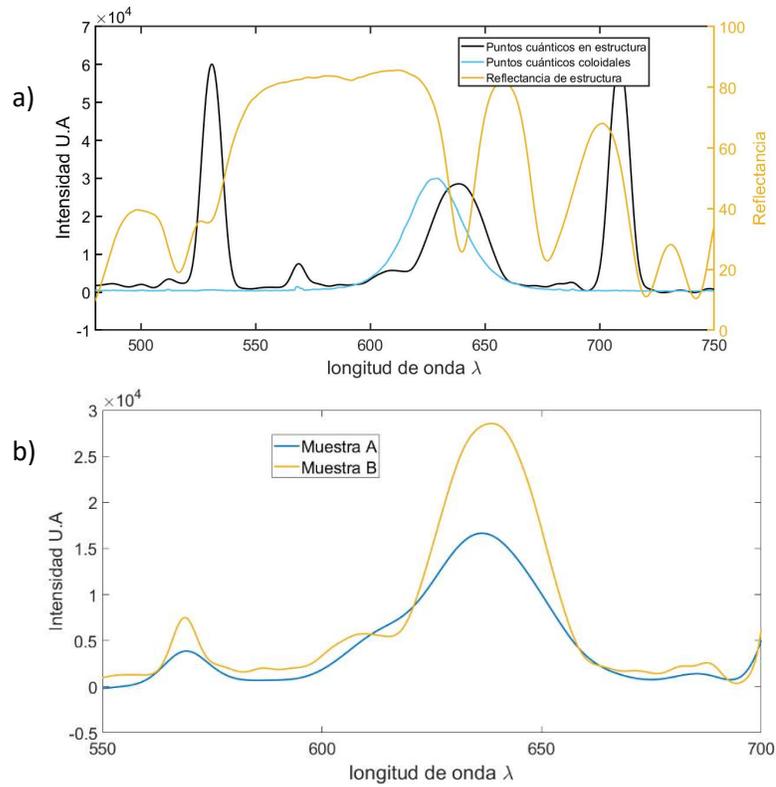
El corrimiento medido experimentalmente después de introducir los puntos cuánticos en los poros fue de 2 a 3 nm y debido a que, en experiencias anteriores, se han observado corrimientos del doble, un corrimiento tan pequeño fue tomado como un indicio de que, si bien ocurrió una infiltración, no fue óptima.

Por otro lado, la infiltración en la muestra A modificó mucho más el espectro que la infiltración en la muestra B, lo que puede ser un indicio de una mejor infiltración de los puntos cuánticos en la muestra A. Aunque no se contó con ningún parámetro para conocer la distribución de los puntos dentro de la estructura.

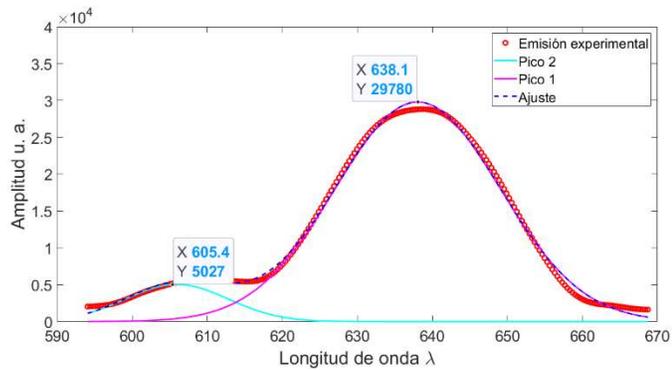
A pesar de que no se está buscando ningún tipo de efecto de cavidad o laseo, es destacable el cambio mínimo que sufrió el ancho de banda de la emisión, pues el cambio en el ancho de banda es una característica siempre presente en los sistemas láser [27]. La *Figura VI- 12 a)* ilustra el acoplamiento de la muestra A con la emisión de los puntos cuánticos contrastado con la emisión de los puntos cuánticos en la solución coloidal. La *Figura VI- 12 b)* muestra la comparación de la respuesta de los puntos cuánticos dentro de las muestras A y B, observando una mayor modulación de la respuesta por la muestra A, que además es la que presentaba una mayor modificación en el espectro de reflectancia luego de la infiltración. Note que las imágenes son comparativas, pues el orden de magnitud de la emisión de los puntos cuánticos es al menos 2 órdenes de magnitud mayor en la solución coloidal, debido a la diferencia en la cantidad de emisores.

Para hacer el análisis exploratorio se deconvolucionaron las señales de los puntos cuánticos dentro de las estructuras, resultando en picos que, si bien son similares a los picos de emisión en la suspensión coloidal, no son los mismos. En la muestra estudiada el pico principal corresponde al mínimo de reflectancia en la región de la pseudobrecha. La *Figura VI- 13* ilustra el proceso de deconvolución usando un ajuste de mínimos locales de Nelder-Mead programado en Matlab® sin optimización, con un error de ajuste máximo del 1%.

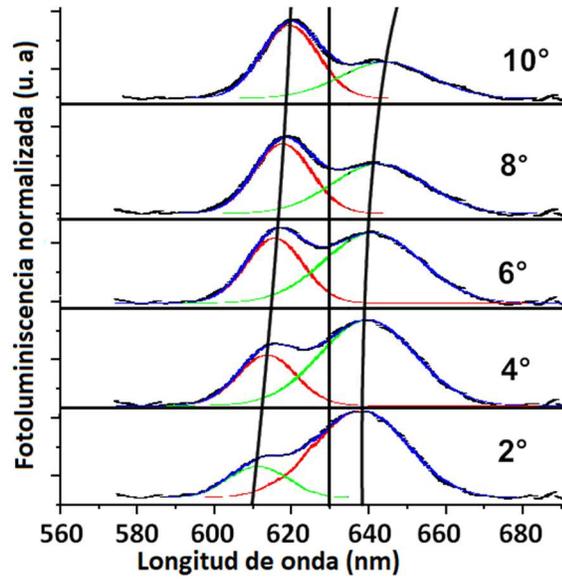
La formación de los picos es un indicativo de acoplamiento fuerte entre los modos normales de largo alcance de la estructura de Fibonacci y los puntos cuánticos. Además, muestra el característico comportamiento repulsivo entre los picos, como se muestra en la *Figura VI- 14*.



**Figura VI- 12** Espectro de emisión de los puntos cuánticos dentro de la estructura, a) comparación de la emisión de puntos dentro de la estructura y puntos coloidales, b) comparación entre la emisión de puntos cuánticos dentro de las muestras A y B.

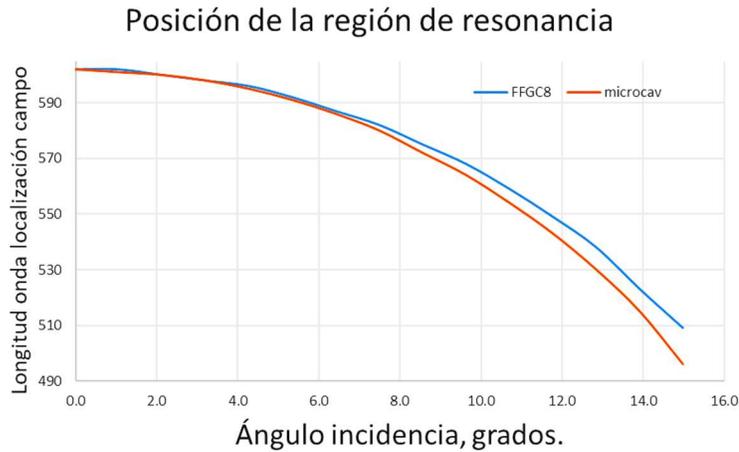


**Figura VI- 13** Deconvolución de la emisión de los puntos cuánticos dentro de la estructura con mejor infiltración.



**Figura VI- 14** Comportamiento repulsivo de los picos de Rabi formados por el acoplamiento fuerte entre los excitones de los puntos cuánticos y los estados de largo alcance propios de los cuasi cristales.

Dado que en la pseudo brecha no necesariamente se puede hablar de un factor de calidad para determinar la condición de separación, ver capítulo IV, se propone explorar el pico de alta densidad de estados en su lugar. Pues ese pico tiene un desplazamiento similar a la frecuencia de resonancia de una microcavidad, *Figura VI- 15*, en la cual el camino óptico cambia como  $k_0 n_i \cos(\theta_i) = \lambda_0/4$ .



**Figura VI- 15** Desplazamiento teórico, para materiales sin absorción, del borde de la brecha de un arreglo de Fibonacci conjugado generación 8 (línea azul) y la longitud de onda del modo resonante en una microcavidad (9).

En la *Figura VI- 15* solo se grafican las regiones donde el ángulo de incidencia es menor al ángulo de reflexión total interna, que se reduce al incrementar el contraste de índices de refracción. Esa puede ser una desventaja practica del silicio poroso, ya que existe un alto contraste entre las capas y las teorías de la matriz transferencia descritas en el capítulo I dejan de ser aplicables.

Dada la similitud del comportamiento del borde y la frecuencia de resonancia de una microcavidad, se puede hacer una estimación de la frecuencia de Rabi, ver *capítulo IV*, a partir de valores reportados en la literatura: el tiempo de vida media de emisión de puntos cuánticos de CdSe/ZnS que emiten alrededor de 650 nm es de 12.79 ns [28] (que se reduce en función del tamaño) y la masa efectiva del electrón en un cristal de CdSe [29] (0.13 veces la masa del electrón en el vacío, es decir:  $m_{efe} = 0.13 * 9.1 * 10^{-31} kg$ ).

Recordado lo revisado en el capítulo IV, el amortiguamiento de la polarizabilidad de un material es proporcional a: los tiempos medios de la emisión estimulada, la emisión espontánea y la absorción. En el caso de que no haya absorción ni emisión estimulada se puede aproximar el amortiguamiento al tiempo de vida media  $\tau$  [30], es decir:

$$\tau = \frac{3\pi\epsilon_0\hbar c^3}{\omega_{na}^3 |\mu_{eb}|^2} \quad (6)$$

No se debe cometer el error de considerar al tamaño del excitón como el tamaño del punto cuántico, es decir:  $\langle \mu \rangle \neq -e d_q$ , donde  $d_q$  es el radio del punto cuántico ( $\sim 9 nm$ ) y  $e$  es la carga del electrón. Si sustituimos ese valor directamente obtenemos un tiempo de vida media de  $\tau = 1.077 * 10^{-1} s$ , que es muy inferior a los tiempo de vida media reportados.

Despejando el momento dipolar  $|\mu| = |e \langle \hat{z} \rangle|$  de (6)

$$|e \langle \hat{z} \rangle| = \sqrt{\frac{3\pi\epsilon_0\hbar c^3}{\omega_{na}^3 \tau}} \quad (7)$$

donde  $\langle \hat{z} \rangle$  es el tamaño esperado del excitón,  $\epsilon_0$  es la permitividad del vacío,  $\omega_{na}$  es la frecuencia angular del máximo de emisión. Por lo tanto, suponiendo que el tiempo de vida de los puntos cuánticos con un radio de 630 nm es del orden del tiempo de vida media de puntos cuánticos de 650 nm, obtenemos que:

$$|\langle \hat{z} \rangle| = \sqrt{\frac{3\pi\epsilon_0\hbar c^3}{\omega_{na}^3 \tau e^2}} = 1.6460 * 10^{-10} m \quad (8)$$

Entonces para un campo de magnitud  $|\vec{E}|$ , la frecuencia de Rabi para un excitón acoplado a un fotón, que en este caso corresponde a un fotón con una longitud de onda resonante en una cavidad, o un fotón con una longitud de onda asociada a un máximo de la función de densidad de estados de un arreglo fotónico, con una longitud de onda mucho mayor al tamaño del excitón es:

$$\Omega = \frac{2|\mu_{eb}|}{\hbar} |\vec{E}| = 4.9947 * 10^5 |\vec{E}| s^{-1} \quad (9)$$

donde la magnitud del campo eléctrico en la expresión es únicamente el valor numérico de la magnitud de campo, es decir, se ignoran las magnitudes. Recordando que la intensidad es:

$$I = \frac{\epsilon_0 c E^2}{2} \quad (10)$$

Entonces la separación de Rabi en función de  $I$  es:

$$\Omega = \frac{\sqrt{2}|\mu_{eb}|}{\hbar\sqrt{\epsilon_0 c}}\sqrt{I} = 6.8550 * 10^6\sqrt{I} \quad (11)$$

Notando que experimentalmente la separación observada en incidencia normal fue de  $28 \text{ nm}$ , la frecuencia de Rabi para este desfase es:

$$\Omega_R = \sqrt{\Omega'^2 I + \frac{(\omega - \omega_{cav})^2}{4}} \quad (12)$$

$$\frac{\Omega_R^2}{\Omega'^2} - \frac{(\omega - \omega_{cav})^2}{4\Omega'^2} = I \quad (13)$$

donde  $\omega$  es la frecuencia del máximo de emisión,  $\omega_{cav}$  es la frecuencia del fotón asociado al máximo local de la densidad de estados (modos normales en el caso de una cavidad) y  $\Omega' = \frac{2|\mu_{eb}|}{\hbar^2\epsilon_0 c}$  tiene unidades que no son inversas al tiempo.

De la ecuación (13), si la intensidad es 0, entonces la separación de Rabi es dos veces la diferencia entre la frecuencia de un fotón asociado al máximo local de la densidad de estados y la frecuencia de un fotón con la energía del excitón.

Los órdenes de magnitud de los términos presentes en la ecuación (13) para el desfase del orden de  $7 \text{ nm}$  que se logró experimentalmente son:  $\frac{(\omega - \omega_{cav})^2}{4\Omega'^2} \sim 10^{12}$  y  $\frac{\Omega_R^2}{\Omega'^2} \sim 10^{13}$ . Dado que la separación de Rabi observada no es el doble del desajuste entre las frecuencias del borde de la pseudobrechas y el excitón de los puntos cuánticos, *Figura VI- 12*, puede ser explicada a partir de la ecuación (13) por la influencia de la intensidad del campo eléctrico. Que dadas las condiciones descritas debería ser del orden de:

$$I \sim 1.08 * 10^8 \quad (14)$$

Dado que para pulsos con una distribución de intensidad Gaussiana temporal y espacialmente

$$\bar{E} = \int \int I_0 e^{-\frac{t^2}{\Delta t^2}} e^{-\frac{r^2}{R^2}} dr dt \quad (15)$$

donde  $\Delta t$  es el ancho del pulso,  $R$  es el radio medio,  $\bar{E}$  es la energía promedio e  $I_0$  es la intensidad. Para un pulso de  $\Delta t \approx 26 \text{ ps}$ , a una frecuencia de  $f = 10 \text{ hz}$ , con una energía promedio del orden de  $\bar{E} \approx 10.2 \mu\text{J}$ , incidiendo con un perfil gaussiano con un radio medio de  $R \approx 1.5 \text{ mm}$ , propagándose en el vacío [31]:

$$I = \frac{2\bar{E}}{f * \Delta t * R^2 \sqrt{\pi^5}} \sim 5.825 * 10^{10} \quad (16)$$

Es decir, la intensidad del pulso es suficiente para explicar la separación observada, sin embargo, una gran cantidad de energía se está disipando en el sistema, a pesar de eso la intensidad del campo en el arreglo de Fibonacci conjugado es lo suficientemente extendida para lograr el acoplamiento.

El estudio de la separación de Rabi quedó incompleto, faltando terminar el análisis de verificar que la separación pueda ser descrita en función de la polarización, ya que la reflectancia y, por ende, tanto la densidad de estados, como la localización del campo, dependen de la polarización de la onda incidente.

## Bibliografía

- [1] V. Passias, N. V. Valappil, Z. Shi, L. Deych, A. A. Lisyansky, y V. M. Menon, «Luminescence properties of a Fibonacci photonic quasicrystal», *Opt. Express*, vol. 17, n.º 8, p. 6636, abr. 2009, doi: 10.1364/OE.17.006636.
- [2] L. Dal Negro *et al.*, «Light Transport through the Band-Edge States of Fibonacci Quasicrystals», *Phys. Rev. Lett.*, vol. 90, n.º 5, p. 055501, feb. 2003, doi: 10.1103/PhysRevLett.90.055501.
- [3] M. Ghulinyan *et al.*, «Light-pulse propagation in Fibonacci quasicrystals», *Phys. Rev. B*, vol. 71, n.º 9, p. 094204, mar. 2005, doi: 10.1103/PhysRevB.71.094204.
- [4] J. Tang, A. Ren, Z. Zhou, y Y. S. Zhao, «Strong Exciton–Photon Coupling in Dye-Doped Polymer Microcavities», *Macromol. Mater. Eng.*, vol. 305, n.º 10, p. 2000456, oct. 2020, doi: 10.1002/mame.202000456.
- [5] K. Mosshammer *et al.*, «Coherent optical interaction between plasmonic nanoparticles and small organic dye molecules in microcavities», *Appl. Phys. Lett.*, vol. 118, n.º 1, p. 013301, ene. 2021, doi: 10.1063/5.0027321.
- [6] J. Chen *et al.*, «Perovskite quantum dot lasers», *InfoMat*, vol. 2, n.º 1, pp. 170-183, ene. 2020, doi: 10.1002/inf2.12051.
- [7] W. Tsai, C. Chen, Y. Wen, L. Yang, Y. Cheng, y H. Lin, «Band Tunable Microcavity Perovskite Artificial Human Photoreceptors», *Adv. Mater.*, p. 1900231, abr. 2019, doi: 10.1002/adma.201900231.
- [8] S. Sunada, S. Shinohara, T. Fukushima, y T. Harayama, «Signature of Wave Chaos in Spectral Characteristics of Microcavity Lasers», *Phys. Rev. Lett.*, vol. 116, n.º 20, p. 203903, may 2016, doi: 10.1103/PhysRevLett.116.203903.
- [9] V. S. Ilchenko y A. B. Matsko, «Optical resonators with whispering-gallery modes-part II: applications», *IEEE J. Sel. Top. Quantum Electron.*, vol. 12, n.º 1, pp. 15-32, ene. 2006, doi: 10.1109/JSTQE.2005.862943.

- [10] Y. Moritake *et al.*, «Lifetime reduction of a quantum emitter with quasiperiodic metamaterials», *Phys. Rev. B*, vol. 90, n.º 7, p. 075146, ago. 2014, doi: 10.1103/PhysRevB.90.075146.
- [11] S. Noda, M. Fujita, y T. Asano, «Spontaneous-emission control by photonic crystals and nanocavities», *Nat. Photonics*, vol. 1, n.º 8, pp. 449-458, ago. 2007, doi: 10.1038/nphoton.2007.141.
- [12] E. Maciá, «Exploiting aperiodic designs in nanophotonic devices», *Rep. Prog. Phys.*, vol. 75, n.º 3, p. 036502, mar. 2012, doi: 10.1088/0034-4885/75/3/036502.
- [13] D. S. Dovzhenko *et al.*, «Photoluminescence of CdSe/ZnS quantum dots in a porous silicon microcavity», Brussels, Belgium, may 2014, p. 912630, doi: 10.1117/12.2057922.
- [14] J. Wenger *et al.*, «Emission and excitation contributions to enhanced single molecule fluorescence by gold nanometric apertures», *Opt. Express*, vol. 16, n.º 5, p. 3008, 2008, doi: 10.1364/OE.16.003008.
- [15] M. F. Yanik, S. Fan, y M. Soljačić, «High-contrast all-optical bistable switching in photonic crystal microcavities», *Appl. Phys. Lett.*, vol. 83, n.º 14, pp. 2739-2741, oct. 2003, doi: 10.1063/1.1615835.
- [16] K. M. Chen, A. W. Sparks, H.-C. Luan, D. R. Lim, K. Wada, y L. C. Kimerling, «SiO<sub>2</sub>/TiO<sub>2</sub> omnidirectional reflector and microcavity resonator via the sol-gel method», *Appl. Phys. Lett.*, vol. 75, n.º 24, pp. 3805-3807, dic. 1999, doi: 10.1063/1.125462.
- [17] N. Tessler, G. J. Denton, y R. H. Friend, «Lasing from conjugated-polymer microcavities», *Nature*, vol. 382, n.º 6593, pp. 695-697, ago. 1996, doi: 10.1038/382695a0.
- [18] G. D'Aguzzo *et al.*, «Group velocity, energy velocity, and superluminal propagation in finite photonic band-gap structures», *Phys. Rev. E*, vol. 63, n.º 3, p. 036610, feb. 2001, doi: 10.1103/PhysRevE.63.036610.
- [19] P. Lova *et al.*, «All-polymer methylammonium lead iodide perovskite microcavities», *Nanoscale*, vol. 11, n.º 18, pp. 8978-8983, 2019, doi: 10.1039/C9NR01422E.
- [20] T. V. Dolgova *et al.*, «Giant second harmonic generation in microcavities based on porous silicon photonic crystals», *J. Exp. Theor. Phys. Lett.*, vol. 73, n.º 1, pp. 6-9, ene. 2001, doi: 10.1134/1.1355395.
- [21] T. V. Dolgova, A. I. Maidikovski, M. G. Martemyanov, A. A. Fedyanin, y O. A. Aktsipetrov, «Giant third-harmonic in porous silicon photonic crystals and microcavities», *J. Exp. Theor. Phys. Lett.*, vol. 75, n.º 1, pp. 15-19, ene. 2002, doi: 10.1134/1.1463107.
- [22] D. Estrada-Wiese, J. A. del Río, D. Estrada-Wiese, y J. A. del Río, «Refractive index evaluation of porous silicon using bragg reflectors», *Rev. Mex. Física*, vol. 64, n.º 1, pp. 72-81, feb. 2018.

- [23] R. Nava, J. Tagüeña-Martínez, J. A. del Río, y G. G. Naumis, «Perfect light transmission in Fibonacci arrays of dielectric multilayers», *J. Phys. Condens. Matter*, vol. 21, n.º 15, p. 155901, abr. 2009, doi: 10.1088/0953-8984/21/15/155901.
- [24] P. Myers, «Michael J. Sailor: Porous Silicon in Practice. Preparation, Characterization and Applications», *Chromatographia*, vol. 76, n.º 11-12, pp. 721-721, jun. 2013, doi: 10.1007/s10337-013-2453-3.
- [25] D. E. Wiese, «Diseño y aplicaciones de estructuras fotónicas de silicio poroso», feb. 2019, Accedido: nov. 11, 2020. [En línea]. Disponible en: <http://riaa.uaem.mx/xmlui/handle/20.500.12055/495>.
- [26] J. Riikonen *et al.*, «Surface Chemistry, Reactivity, and Pore Structure of Porous Silicon Oxidized by Various Methods», *Langmuir*, vol. 28, n.º 28, pp. 10573-10583, jul. 2012, doi: 10.1021/la301642w.
- [27] I. D. W. Samuel, E. B. Namdas, y G. A. Turnbull, «How to recognize lasing», *Nat. Photonics*, vol. 3, n.º 10, pp. 546-549, oct. 2009, doi: 10.1038/nphoton.2009.173.
- [28] L. Li, W. Wang, T. S. Luk, X. Yang, y J. Gao, «Enhanced Quantum Dot Spontaneous Emission with Multilayer Metamaterial Nanostructures», *ACS Photonics*, vol. 4, n.º 3, pp. 501-508, mar. 2017, doi: 10.1021/acsp Photonics.6b01039.
- [29] «c3cp52678j.pdf». Accedido: abr. 06, 2021. [En línea]. Disponible en: <http://www.rsc.org/suppdata/cp/c3/c3cp52678j/c3cp52678j.pdf>.
- [30] R. W. Boyd, *Nonlinear optics*, 3rd ed. Amsterdam ; Boston: Academic Press, 2008.
- [31] J. M. Liu, «Simple technique for measurements of pulsed Gaussian-beam spot sizes», *Opt. Lett.*, vol. 7, n.º 5, p. 196, may 1982, doi: 10.1364/OL.7.000196.

## Capítulo VII.

### Conclusiones

El proceso de pasivación del silicio poroso es muy importante para la introducción de puntos cuánticos en sus poros, pues inmediatamente después de la fabricación la superficie queda cubierta por una capa rica en Hidrógeno que es altamente reactiva. Las energías de activación en función de la temperatura pueden ser correctamente identificadas por medio de la caracterización fotoacústica al correlacionarla con los espectros ATR de muestras parcialmente oxidadas. La correlación permite hacer una mejor planeación del proceso de oxidación, que idealmente debería ser una subida rápida hasta la temperatura de 620 grados. Sin embargo, al ser tan alta la temperatura, la capa de óxido formada es difícilmente repetible, resultando en un corrimiento espectral a su vez poco repetible. Por esa razón, para un análisis práctico se puede incrementar el tiempo de oxidación, aunque ese proceso de oxidación resulta en la extinción de los puntos cuánticos en periodos del orden de semanas.

La alta transmitancia en el centro de las brechas de las microcavidades no es exclusivo de este tipo de arreglos. Se ha reportado en arreglos semisimétricos, asimétricos, de Fibonacci en simetría de espejos y algunos conjugados. Todos esos arreglos son un caso particular de un arreglo completamente aleatorio de capas, que cumple con la condición de tener un número de bicapas AB y BA iguales, además de un número de bicapas AA o BB cualquiera. Si la relación del número de bicapas no se cumple se pueden tener otros efectos interesantes, como el de microcavidades acopladas descritos en la literatura. Además, en algunos casos los arreglos aleatorios, como en los arreglos de Fibonacci, presentan una localización extendida del campo electromagnético, favoreciendo algunos efectos como el acoplamiento fuerte.

Cuando una microcavidad se coloca sobre un sustrato de soporte muchas de sus características se ven afectadas, no solamente se reduce la intensidad del campo y la intensidad del campo localizado, además hay una reducción de la densidad de estados y por ende una reducción del factor de calidad. El efecto del sustrato en las propiedades de la microcavidad puede ser compensado con un espejo de Bragg, colocado antes o después de la microcavidad, dependiendo del orden de las capas, es decir, si las primeras dos capas, del primer espejo de Bragg, que conforman la microcavidad cumplen con que, el índice de refracción de la primera capa es menor al índice de refracción de la segunda capa, el espejo se deberá colocar entre la microcavidad y el sustrato, y si por el contrario, el índice de la primera capa es mayor al de la segunda capa el espejo se debe colar antes de la microcavidad.

Los índices de refracción y el número de bicapas del espejo de Bragg que compensa la admitancia del medio de transmisión, deben cumplir con la condición  $(n_A/n_B)^N \approx n_t/n_i$  para favorecer tanto la transmitancia en la frecuencia de resonancia como la formación de la brecha alrededor de la frecuencia resonante. Donde  $N$  es el número de bicapas, que una vez superado el espejo de Bragg comienza a reducir la transmitancia de la microcavidad. Si los índices de refracción del espejo de Bragg son los mismos índices que los espejos que conforman la microcavidad se puede considerar como una asimetría.

La localización extendida del campo en los bordes de las pseudobrechas de los arreglos de Fibonacci también está presente en los arreglos de Fibonacci conjugado. Una ventaja de los segundos frente a los primeros es que el máximo de localización de campo es mayor, esto probablemente se deba a la simetría de espejo en sus primeras capas. La alta intensidad del campo, asociada a la densidad de estados o la reducción de la velocidad de grupo respecto al vacío, favorece el acoplamiento fuerte entre partículas luminiscentes y las regiones de alta densidad de estados.

Al introducir puntos cuánticos en una estructura, no activa de silicio poroso, su espectro de emisión pasa de ser un pico simple, para puntos cuánticos en una solución coloidal, a una emisión de dos picos principales. Esa es la característica propia de la separación de Rabi. Sin embargo, el acoplamiento no ocurre en una región de índice de refracción muy bajo, como suele suceder en otros arreglos fotónicos debido a que se debe garantizar que los emisores están en un mínimo del campo, sino que sucede a lo largo de la estructura debido a la localización extendida del campo.

La separación de Rabi observada cumple con ser repulsiva para ángulos de incidencia menores a los  $10^\circ$ , que está por debajo de ángulo crítico de las capas de alto contraste formadas en el silicio poroso. La separación de los picos a los  $10^\circ$  es del orden de los  $30 \text{ nm}$ , similar a los  $30 \text{ nm}$  del ancho del pico en la solución coloidal y están localizados en regiones espectrales que no corresponden a la emisión de los puntos cuánticos.

#### **Trabajo a futuro.**

Comprobar que existe un acoplamiento fuerte para los puntos cuánticos en la estructura de Fibonacci conjugado genera nuevas preguntas que se pueden explorar:

- ¿Es posible observar acoplamiento fuerte en arreglos aleatorios con localización extendida del campo electromagnético?
- Debido a que la respuesta del arreglo depende de la polarización ¿Cuál es el efecto de la polarización en el sistema?
- ¿Se pueden acoplar plasmones al sistema en lugar de excitones?
- ¿Se puede lograr acoplamiento fuerte si la estructura de silicio poroso está formada por capas de silicio poroso luminiscente? ¿Ese acoplamiento es lo suficientemente eficiente como para favorecer una emisión tipo laser ya observada en sistemas similares?

## Anexo A

### Técnica de suavizado Gaussiano

Cuando se analiza una señal, el ruido puede influir u obstaculizar el análisis, en particular cuando se buscan los picos principales en la curva a partir de deconvolución o máximos locales, pues el ruido puede formar picos aparentes y resultar en una mala determinación del máximo. Podría parecer que emplear un algoritmo de suavizado es una buena alternativa al problema, sin embargo, el algoritmo de suavizado modifica la señal, por poner algunos ejemplos, de los más comunes y fáciles de implementar en Matlab® (La documentación del software servirá como introducción):

- La decimación, consiste en eliminar puntos de la señal, este algoritmo afecta mucho la calidad de la información, eliminando no tan solo la mitad de las frecuencias disponibles, sino que incrementa el error en la variable dependiente. Aunque puede reducir la desviación estándar de la respuesta.
- Filtro de Fourier, consiste en obtener la transformada de Fourier y antes de implementar la transformada inversa se elimina parte de las frecuencias que se consideran ruido, la determinación de la banda permitida puede hacerse intuitivamente o a partir de algún parámetro que trata de ser más objetivo.
- Filtro de media móvil, este filtro es muy empleado en los manuales de economía cuando se trata de hacer algún reporte proforma, consiste en sustituir el punto medido por el punto promedio de los datos que lo anteceden o lo suceden. El inconveniente principal es un corrimiento proporcional al número de datos empleado para el suavizado.

El efecto del corrimiento no es exclusivo de los procesos de suavizado, lo mismo sucede con la derivada numérica definida a partir de la relación intuitiva

$$f'(x_i) = \frac{f(x_{i-1}) - f(x_i)}{\Delta x} \quad (1)$$

Este desplazamiento se reduce si en lugar de aplicar la definición anterior se calcula la derivada en el punto medio como se propone en los textos de métodos numéricos [1], deducida de la serie de Taylor de la función

$$f'(x_i) = \frac{f(x_{i-1}) - f(x_{i+1})}{2\Delta x} \quad (2)$$

La diferencia entre las ecuaciones (1) y (2) además de los puntos ocupados y el formalismo detrás de cada una, radica en la posición de los puntos empleados respecto a  $x_i$ , en el primer caso los puntos están a la izquierda de  $x_i$  y en el segundo están alrededor.

Lo que sugiere que: para reducir los desplazamientos en los procesos numéricos, es conveniente ocupar un número simétrico de datos en lugar de hacerlo solo a la izquierda o la derecha.

Podríamos pensar que un algoritmo de suavizado numérico, que no involucre ninguna transformación de los datos (como el algoritmo de filtro por FFT), se escribe, de forma general a partir de una función de densidad o función de peso, es decir, la variable dependiente se aproxima el punto  $x_j$  con la relación:

$$y(x_j) = \frac{\sum_i y_i \rho(i)}{\sum_i \rho(i)} \quad (3)$$

donde  $y_i$  es el dato obtenido durante la medición,  $\rho(i)$  es la variable función de peso para el  $i$ ésimo dato,  $x_j$  es la  $j$ 'ésima variable independiente. En los ejemplos anteriores:

- Decimación

$$\rho_i = \begin{cases} 1 & \text{si } i = j \\ 0 & \text{si } i \neq j \end{cases} \quad e \quad \begin{matrix} i \text{ par} \\ i \text{ impar} \end{matrix}$$

- Media móvil.

$$\rho_i = \frac{1}{n} \quad \text{si } j \geq i > j - n$$

Entonces para reducir el corrimiento en la media móvil se puede modificar la función de peso por una función simétrica, ecuación (4). Sin embargo, no se puede evitar por completo el crecimiento del error en la variable independiente, al aplicar el método de suavizado simétrico como el anterior, se puede incrementar la incertidumbre en el pico por lo menos  $\frac{\delta x}{2}$ .

$$\rho_i = \frac{1}{n-1} \quad \text{si } j+n > i > j-n \quad (4)$$

El teorema de ajuste de Rosenfeld y Kad enunciado en 1982 establece que la elección de la función de densidad óptima debe resultar en el ajuste perfectamente entre la señal suavizada y la señal detectada. Eso implica que el tamaño del alcance de la función de densidad debe ser del orden de los cambios que se quieren detectar, si se aplica un filtro con alcance medio  $n$ , dos picos separados por una distancia menor a ese alcance se detectarán como un solo pico [2].

Frecuentemente encontramos trabajos donde se define el ancho del alcance a priori, se conoce previamente, se calcula en función de la información de muchas señales, es decir, una vez que se midieron muchas señales (o se segmentó una señal con mucha información) se aproxima el alcance con la desviación estándar de cada punto, o se detecta el promedio de la distancia de los picos importantes y se emplea un filtro con la mitad de esa distancia [3].

Por otro lado una vez aplicado el algoritmo, si no se obtiene un resultado satisfactorio se puede aplicar nuevamente el algoritmo de suavizado, generando la señal suavizada por segunda vez  $y_2$ , sin embargo, debe tenerse en cuenta que una segunda aplicación aumenta el alcance. Para verlo basta con pensar en el algoritmo de media móvil a un vecino, una vez que se aplica por segunda vez el algoritmo la aproximación será:

$$y_2(x_i) = \frac{1}{2} (y(x_i) + y(x_{i-1}))$$

$$y_2(x_i) = \frac{1}{4} (y_i + y_{i-1} + y_{i-1} + y_{i-2})$$

Note que en la media móvil un alcance igual al total de datos, equivale al promedio de la señal. Esto es importante porque al aplicar un algoritmo de suavizado a una señal ya suavizada se va atenuando al mismo tiempo el área bajo la curva de los picos.

## Suavizado Gaussiano

Una función de densidad muy común para el suavizado de señales es la gaussiana, propia de un suavizado gaussiano. El elemento más importante para este algoritmo es la constante de dispersión, que en general cambia en cada punto de la señal.

Al aplicar un algoritmo de suavizado como el Gaussiano se asume que los datos experimentales  $y_i$  dependientes de una variable explicativa  $x_i$ , pueden considerarse como la respuesta " $f(x_i)$ " más una aportación de ruido aleatorio " $u_i$ ", ecuación (5). El ruido puede tener diferentes estructuras, en particular si asumimos que es blanco y normalmente distribuido, se puede aproximar la función de densidad del ruido como una gaussiana centrada en el "0",  $u \sim N(0, \sigma_u)$  (distribución normal con media 0 y desviación  $\sigma_u$ ).

$$y_i = f(x_i) + u_i \quad (5)$$

Donde  $f(x_i)$  es la función real,  $y_i$  es la magnitud medida y  $u_i$  es el ruido.

Asumiendo que no conocemos la forma funcional de  $f(x)$  podemos decir que  $f(x_i)$  se trata de la función aproximada o suavizada. En el caso del algoritmo de suavizado gaussiano, se estima que la función suave o aproximada está dada por la relación:

$$f(x_i) = \frac{\sum_i y_i \rho_i}{\sum_i \rho_i} \quad (6)$$

donde  $\rho_i$  seguirá una distribución simétrica  $\rho_i \sim N(x_i, \sigma_i)$ .

Note que el factor de peso es un estimador simétrico, que se puede aplicar para cualquier  $x$ , no solamente a  $x_i$ , esto implica que el algoritmo de suavizado también es un algoritmo de interpolación. Además, la dispersión o influencia de los vecinos, dependerá del punto a estudiar, si partimos de  $\sigma_x = 1$  la influencia de los vecinos será aproximadamente 2 vecinos, pues la influencia del tercer vecino es prácticamente nula [4].

En general el suavizado de espectros cuenta únicamente con una medición, sin embargo, para hacer una estimación del error en cada punto se puede partir de forma análoga con el análisis de muchas señales. En ese caso se tienen varias curvas de un mismo fenómeno y al estudiar un punto particular  $x_i$ , se define  $\sigma_{u_i}$  como la desviación estándar de  $y_i$  [5], por lo tanto:

$$Var(f(x_i) - y_i) = Var(u_i) = \sigma_{u_i}^2 \quad (7)$$

De esta relación se puede establecer que  $\sigma_{u_i} \sim \sigma_{x_i}$ , la desviación estándar en la curva es igual a la desviación estándar en la variable. Esta conclusión puede tener sentido matemático y en algunos fenómenos económicos es aparentemente correcto, pero no lo es físicamente:

- Primero porque en general  $[\sigma_{u_i}] \neq [\sigma_x]$  (las desviaciones tienen magnitudes diferentes).
- Segundo por que la varianza en  $y_i$  no es de magnitud constante. Como es el caso de los fallecimientos por Covid\_19, donde la en la variable explicativa es constante (1 día) y la variación en la cantidad de decesos  $y_i$  cambia de unos cuantos muertos los primero días a miles conforme avanza la enfermedad. En ese caso particular, si se sigue el modelo propuesto se llega a un absurdo pues si  $\sigma_x \gg 1$  entonces  $f(x_i) \rightarrow \bar{y}$ . Note que

$$\lim_{\sigma_{x_i} \rightarrow \infty} f(x_i) = \bar{y}$$

A pesar de eso es claro que  $\sigma_x(\sigma_u)$ , o en otras palabras, si la inestabilidad crece en la respuesta se deben tomar una mayor influencia de los vecinos para estimar el valor de la curva aproximada. La dependencia entre las sigmas no puede ser simplemente lineal ya que  $A * N(\mu, \sigma) = N\left(\mu, \frac{\sigma}{A}\right)$  [4] es decir al multiplicar por un valor constante la distribución, la desviación estándar crece proporcionalmente, dificultando encontrar un criterio para el ajuste. Este pasa a ser el problema más importante a resolver.

Cuando no se tiene un número suficiente de curvas o se tiene solamente una, determinar el valor de  $\sigma_u$  no es posible a partir de la desviación estándar alrededor de  $y_i$  ( $\sigma_{u_i}$ ) en cada punto de la variable dependiente. Una alternativa la ofrece estudiar la integralidad de las curvas como en la generación de modelos empíricos en economía [6]. Cuando se trata de construir un modelo económico lo primero que se debe verificar es el orden de integralidad de las funciones, o el número de veces que se tiene que diferenciar para que el residuo se componga únicamente de ruido blanco. Para ver cómo funciona considere una dependencia lineal entre las variables, entonces.

$$f(x_i) = mx_i + x_0 + u_i$$

$$f(x_i) - f(x_{i-1}) = m\Delta_x + u_i + u_{i-1}$$

$$f(x_i) - f(x_{i-1}) - f(x_{i-1}) - f(x_{i-2}) = u_i + 2u_{i-1} + u_{i-2}$$

Asumiendo que la varianza en los errores a lo largo de la serie es constante la desviación estándar de la primera diferencia definida arriba es  $\sqrt{\sigma_{u_i}^2 + \sigma_{u_{i-1}}^2} = \sqrt{2}\sigma_{u_i}$ , por lo que al repetir el proceso de diferenciar llegamos a la conclusión de que la desviación estándar de la enésima diferencia es  $\sqrt{2^n}\sigma_{u_i}$ . En otras palabras, si calculamos la desviación estándar de la enésima diferencia obtendremos la desviación estándar del ruido de la señal, siempre que este ruido tenga una distribución constante.

Si la desviación estándar de  $y_i$  no es constante y no se conoce el nivel de integralidad, se debe calcular las diferencias que preservan el ruido hasta obtener ruido blanco. Lo que no sucederá en una distribución heterosedástica, en ese caso se puede definir hasta que factor de la serie de Taylor se puede aproximar la función, pues cada diferenciación va eliminando la influencia de cada uno de los elementos de la serie. Teniendo en cuenta que mientras más diferenciaciones se hagan peor será la aproximación de  $\sigma_{u_i}$ .

Asumir que  $\sigma_{u_i}$  cambia lentamente, es decir, que la distribución de ruido de la señal permanece aproximadamente constante en vecinos cercanos, permite aproximar la desviación a partir de la distribución local del ruido. Una vez obtenida la segunda diferencia el análisis de la desviación estándar se puede hacer a partir de una gráfica de probabilidad normal [7], donde se compara el ruido de los datos experimentales, que se asume distribuido normalmente, con los que se obtendrían de forma equivalente en una distribución  $N(0,1)$ . En una gráfica normal es fácil mostrar que la pendiente de la recta que representa una gaussiana es la relación entre su varianza la varianza de  $N(0,1)$ , si la pendiente es 2 implica que la varianza de la variable asumida dependiente (coordenada y) es el doble de la independiente ( $N(0,1)$ ), y si la pendiente es  $1/2$ , la desviación de

la dependiente es la mitad de la independiente. En caso muy particular de tener muchos puntos donde se cumpla la condición de lenta variación, el análisis de la normal puede hacerse a partir de la función de densidad asociada al histograma del ruido, eliminando el problema de las escalas.

En una distribución heterosedástica no se pueden tomar conjuntos arbitrarios de datos, mientras más puntos se tomen, menos se cumple que la desviación es constante. Asumir que el ruido es homosedástico en pocos puntos, implica conocer cuántos son pocos puntos, tomando en cuenta que la prueba de normalidad de Anderson-Darling necesita como mínimo 5 puntos, para calcular la desviación del punto  $x_i$ , la alternativa mínima es emplear 5 puntos de las segundas diferencias  $dd(y_i)$ , en otras palabras para calcular la desviación se ocuparan 7 puntos de la señal original:  $y_{i-3}, y_{i-2}, y_{i-1}, y_i, y_{i+1}, y_{i+2}, y_{i+3}$ .

Una ventaja de calcular  $\sigma_{u_i}$  de esa forma, es que se puede aplicar a los puntos la prueba de Anderson-Darling para comprobar que ese conjunto en la segunda diferencia tenía una distribución aproximadamente normal, como respaldo del análisis. Hay factores que afectan la normalidad de los errores, como son las estacionalidades de los puntos (fines de semana), donde ocupar un poco más de 7 datos afecta seriamente la prueba de normalidad, resultando en curvas que no son normales en ningún punto u otros fenómenos asociados al cambio en el error.

Ya que todo lo anterior es válido para el  $\ln(y_i)$  y que la primera diferencia en los logaritmos es una cantidad adimensional, para el suavizado de señales se recomienda ocupar  $\sigma_x = e^{\sigma(dd \ln(x_i))}$  que en el caso de espectros medidos en el laboratorio estuvieron en general entre valores en (0.9,1.5).

Para verificar que efectivamente lo que se ha quitado a la señal es únicamente ruido, se puede seguir las técnicas de modelos empíricos de econometría, analizando el ruido eliminado a partir de su auto correlación. En caso de que la correlación tenga valores por encima de 2 se puede decir que el ruido no solo no es aleatorio, sino que tiene estructura o que tiene información que no es ruido.

Una vez que se tiene las curvas suavizadas a veces es necesario calcular la derivada sin desplazamiento (a diferencia de la derivada exponencial que al ser un suavizado no simétrico tiende a desplazar la respuesta).

$$f'(x) = \frac{(\sum \rho_i)(\sum \rho_i x_i y_i) - \sum \rho_i x_i \sum \rho_i y_i}{(\sum \rho_i)^2} \quad (8)$$

Una vez que se tiene la curva suavizada y su derivada se pueden hacer otro tipo de análisis, como correlación o integrales, la primera muy útil en análisis de fotoacústica, como el expuesto en esta tesis.

El error de la correlación no suele reportarse, dado que no es fácil encontrar como se propaga el ruido en correlación. Por un lado, la correlación entre dos señales de ruido es 0, por lo tanto, se puede asumir equivocadamente que la correlación no propaga el ruido y que el único ruido que existe es la desviación estándar de las correlaciones.

Tanto la correlación como las integrales tienen un error asociado a la forma de las curvas suaves y, por lo tanto, pueden ser estimados a partir del algoritmo de suavizado. La correlación depende del valor esperado de la respuesta, una alternativa para estimar el error en este valor esperado, es ocupar la banda de confianza, definida como:

$$\delta f(x_i) = \sqrt{\frac{\sum_n [(\sum_j y_j \rho_i(x_j)) - y_n] \rho_i(x_n)}{\sum_n \rho_i(x_n)}} \quad (9)$$

Una forma de interpretar este resultado es, que el error en un punto en la curva es el promedio ponderado de los errores a lo largo de toda la curva.

Dado que la esperanza de una función se puede definir como:

$$E(f(x)) = \frac{\int_a^b f(x) \rho(x) dx}{\int_a^b \rho(x) dx} \quad (10)$$

Notamos que el error en el valor esperado de la curva experimental está dado por el valor esperado de  $\delta f(x)$  que no es 0, pues es el intervalo de confianza. O, en otras palabras, el error en la esperanza de una función es el área entre las líneas que definen la banda de confianza.

Con esto en mente al calcular la covarianza de dos curvas:

$$Cov(g, f) = \langle (g - \langle g \rangle)(f - \langle f \rangle) \rangle \quad (11)$$

El error de la curva suave estaría asociado al error en la esperanza de la curva suave definida como la integral (suma) de  $\delta f(x_i)$ , por lo tanto el error en la covarianza será:

$$\delta Cov(f, g) = \sum_n [(g(x_n) - \langle g \rangle) \delta f(x_n) + (f(x_n) - \langle f \rangle) \delta g(x_n)] \quad (12)$$

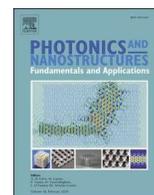
Con esta estimación del error se deduce directamente el error en la correlación, definida como:

$$corr(f, g) = \frac{cov(f, g)}{\sqrt{cov(f, f) * cov(g, g)}}$$

$$\frac{\delta corr(f, g)}{|corr(f, g)|} = \frac{\delta cov(f, g)}{|cov(f, g)|} + \frac{\delta \sqrt{cov(f, f) * cov(g, g)}}{|\sqrt{cov(f, f) * cov(g, g)}|}$$

## Bibliografía

- [1] A. Taflove, A. Oskooi, y S. G. Johnson, Eds., *Advances in FDTD computational electrodynamics: photonics and nanotechnology*. Boston: Artech House, 2013.
- [2] K. J. Worsley, S. Marrett, P. Neelin, y A. C. Evans, «Searching scale space for activation in PET images», *Hum. Brain Mapp.*, vol. 4, n.º 1, pp. 74-90, 1996, doi: 10.1002/(SICI)1097-0193(1996)4:1<74::AID-HBM5>3.0.CO;2-M.
- [3] Dong-Hyuk Shin, Rae-Hong Park, Seungjoon Yang, y Jae-Han Jung, «Block-based noise estimation using adaptive gaussian filtering», *IEEE Trans. Consum. Electron.*, vol. 51, n.º 1, pp. 218-226, feb. 2005, doi: 10.1109/TCE.2005.1405723.
- [4] «normal.pdf». Accedido: nov. 11, 2020. [En línea]. Disponible en: <https://www.uv.es/ceaces/pdf/normal.pdf>.
- [5] J. L. G.-S. Martínez y G. M. González, «Método gaussiano de suavización de datos experimentales», *Nereis Rev. Iberoam. Interdiscip. Metod. Model. Simul.*, n.º 6, pp. 47-67, 2014.
- [6] R. S. Pindyck y D. L. Rubinfeld, *Econometría: modelos y pronósticos*. México: McGraw-Hill, 2001.
- [7] R. M. Heiberger y B. Holland, *Statistical analysis and data display: an intermediate course with examples in S-plus, R, and SAS*. New York: Springer, 2004.



## Generalization of microcavities: Effects of asymmetry in the field localization and transmittance for supported microcavities

Atzin David Ruiz-Pérez<sup>\*</sup>, Jorge-Alejandro Reyes-Esqueda<sup>\*</sup>

*Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México, Circuito de la Investigación Científica, Ciudad Universitaria, Delegación Coyoacán, C.P. 04510 Ciudad de México, México*

### ARTICLE INFO

#### Keywords:

1D photonic microcavity  
Porous silicon  
Field localization  
Density of states  
Random arrays  
Asymmetric microcavity  
Transfer matrix method

### ABSTRACT

Theoretical means are used to show how asymmetry allows the generalization of microcavity resonators. The transfer matrix method is used to show that field localization and maximum transmission reduction can be minimized by introducing an asymmetry into the cavity structure, for the case when refractive indexes of incident and transmission media are not the same, obtaining a generalization for this kind of system, and theoretically solving the effect of using an asymmetry. These calculations are explicitly shown for an experimental system consisting of a porous-silicon asymmetric microcavity, clearly obtaining a larger transmittance compared with the symmetric case.

### 1. Introduction

Light-matter interaction, in the strong- and weak-coupling regimes, has attracted much attention recently [1,2]. In particular, the coupling of quantum emitters, in both regimes, to optical microcavities formed by photonic crystals has resulted in a versatile way to control several parameters of that coupling, opening a wide path for very interesting applications, such as the simultaneous sensing of refractive index and temperature by using Fano resonances [3].

One of the most interesting properties of optical microcavity resonators is their ability for field localization at a given frequency [4]. In recent decades, the achievement of microcavities with high quality factors and small mode volumes [5,6], has allowed their study from fundamental physics to photonics devices. Their applications are usually related to high transmission, permitted states in the photonic bandgap, density of states (DOS), and field localization [7–9]. The control of the dielectric function has also allowed such applications as enhancement of photoluminescence and its lifetime for quantum dots or luminescent polymers [10–12], wavelength control of laser emission [7], modulation of photoluminescence [13–15], enhancement of emissive properties in angular resolution [16,17], laser devices [18,19], and advanced vapor sensing [20].

The reduction in transmittance and field localization due to supporting a photonic microcavity in a material with a refractive index larger than that of the incident media is well known [21,22], and has

been widely observed [23]. However, in most applications, there were no attempts to compensate for this reduction, but for the use of a simple and feasible solution, surged from a simple analysis: supporting the microcavity, not in a homogeneous material, but in a Bragg mirror. This mirror may be located between the support and the microcavity, if the refractive index of the first layer is larger than that of the second, or before the microcavity in the opposite case. These mirrors have an efficient number of layers, but if they exceed this number, then the quality factor, and its related properties, decrease drastically.

Layers at a periodic distribution, with an optical path of  $\lambda_0/4n_i$ , with  $n_i$  the  $i$ -th layer refractive index, have a photonic bandgap centered at  $\lambda_0$ , and are called Bragg-reflector resonators. A microcavity array is formed by the coupling of two Bragg-reflectors in mirror symmetry [8], with behavior strongly defined by the contrast of the refractive index of the layers [24]. The symmetric microcavity shows a permitted state in the band gap at  $\lambda_0$ , where the field is also localized and the DOS increases. Because of that, it was determined that high transmission results from the mirror symmetry [25,26]. Nevertheless, other symmetries have been found to share these properties, such as generalized Fibonacci sequences [27] or Fibonacci coupled arrays in conjugated symmetry [28]. Some papers have been published in attempts to understand the transmission and field localization in these systems. In particular, the phase change model [29] showed this for two coupled high transmission structures – a microcavity and a half-wavelength one (asymmetric); and the “field flux” conservation model [30] showed this for a two-microcavity

<sup>\*</sup> Corresponding authors.

E-mail addresses: [atzin@ciencias.unam.mx](mailto:atzin@ciencias.unam.mx) (A.D. Ruiz-Pérez), [reyes@fisica.unam.mx](mailto:reyes@fisica.unam.mx) (J.-A. Reyes-Esqueda).

# *In situ* study of porous silicon thin films thermal oxidation by pulsed laser photoacoustics

Atzin David Ruíz Pérez<sup>1</sup>, M B de la Mora<sup>2</sup> , J L Benítez<sup>3</sup>,  
R Castañeda-Guzmán<sup>3</sup>, Jorge Alejandro Reyes-Esqueda<sup>1</sup> and  
M Villagrán-Muniz<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México, Ciudad de México, C.P. 04510, México

<sup>2</sup>CONACyT Fellow-ICAT, Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM), Ciudad de México, C. P. 04510, México

<sup>3</sup>ICAT, Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM), Ciudad de México, C.P. 04510, México

E-mail: [betarina@gmail.com](mailto:betarina@gmail.com) and [maria.delamora@ccadet.mx](mailto:maria.delamora@ccadet.mx)

Received 1 March 2018, revised 6 June 2018

Accepted for publication 12 June 2018

Published 29 June 2018



CrossMark

## Abstract

Passivation is of remarkable importance for porous silicon (PSi) applications to guarantee the chemical stability of its high surface area through time. Thermal oxidation is one of the most common methods to passivate the surface of PSi. In order to better understand the oxidation process, here we performed an *in situ* study by using pulsed laser photoacoustics. During the thermal oxidation, the photoacoustical signal was measured each 1 °C from 70 °C to 900 °C. The measurements were analyzed by standard correlation, and the significant signal changes were related to the presence of different surface species. We have found temperatures, where the photoacoustical signal changes drastically, that can be related to the absorption and desorption of chemical species in the surface. Species identification where made through Fourier-transform infrared spectroscopy-attenuated total reflection analysis of the PSi samples, at temperatures around where these notorious modifications on the surface were observed.

Keywords: porous silicon, thermal oxidation, pulsed laser photoacoustic, semiconductor nanomaterial

(Some figures may appear in colour only in the online journal)

## Abbreviations

**FTIR-ATR** Fourier-transform infrared spectroscopy-attenuated total reflection (ATR)

**PSi** Porous silicon

**PA** Photoacoustics

**PLPA** Pulsed laser photoacoustics

## 1. Introduction

Porous silicon (PSi) is a material that consists in silicon nanocrystals surrounded by air with the appearance of a sponge [1]. Due to its optical properties, high surface area and the possibility to fabricate multilayer structures, PSi has been used in a wide range of optical, sensing, optoelectronic and electrochemical applications [1–4]. In several of these applications, its low chemical stability in time is a problem to overcome [2, 3, 5]. Among the different fabrication methods to produce PSi, electrochemical etching presents various advantages such as simplicity and effectiveness. After the anodization, mainly Si–H groups are present in the surface.



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

---

FACULTAD DE CIENCIAS

ESTUDIO DE LOS EFECTOS DE UN CÁTODO  
VIBRANTE DURANTE LA SÍNTESIS DE  
PELÍCULAS SIMPLES DE SILICIO POROSO

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

FÍSICO

PRESENTA:

Ivan Montaña Jaramillo

DIRECTOR DE TESIS:

M. en C. Atzin David Ruiz Pérez

Ciudad Universitaria, Cd. Mx., 2021

