00362



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO

POSGRADO EN CIENCIAS FÍSICAS

"DISPERSIÓN DE RAYLEIGH EN MULTICAPAS DE SILICIO POROSO"

TESIS

QUE PARA OBTENER EL GRADO DE: MAESTRO EN CIENCIAS (FÍSICA)

PRESENTA: MILLER TOLEDO SOLANO

DIRECTOR DE TESIS: DR. YURIY RUBO

COMITÉ TUTORAL:

DR. ANTONIO DEL RIO PORTILLA DRA. JULIA TAGÜENA PARGA



posgrado en ciencias físicas un a m

MÉXICO, D.F.

2004



Universidad Nacional Autónoma de México



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.

A mis padres:

Zolia Solano Ramírez y Lair Toledo Domínguez

A mis hermanos: Olver Tavo José Rubén Norma David Lair Alejandro

AGRADECIMIENTOS

Agradezco al Dr. Yuri Rubo, por haber dirigido el trabajo de tesis, por el apoyo que me ha bridado, tanto en lo personal como en lo profesional, y sobre todo por su amistad.

Al Dr. Antonio del Río Portilla y a la Dra. Julia Tagüeña Parga, miembros del comité tutoral, por las sugerencias realizadas durante el desarrollo del trabajo de investigación, así como por su revisión cuidadosa y escrita del manuscrito.

A los profesores que integran el jurado: Dr. Chumin Wang Chen, Dr. Eugenio Méndez Méndez y Dr. Luis Mochán, por sus valiosos comentarios que contribuyeron a mejorar el trabajo escrito.

Al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACyT) y a la Dirección General de Estudios de Posgrado (DGEP), por las becas otorgadas para la realización de esta tesis.

A la Dirección General de Asuntos del Personal Acádemico (DGAPA) por el apoyo otorgado a través del proyecto IN116402.

Al Centro de Investigación en Energía (CIE) de la UNAM, por todas las facilidades otorgadas durante mi estadía en él.

Quiero aprovechar la oportunidad para agradecer el apoyo y la amistad de mis compañeros y amigos Saúl, Daniel, Alejandro, Marielena, Mauricio, Yazmín y a todas las bellas personas que han estado conmigo en los momentos más dificiles.

Deseo agrader a toda mi familia por su cariño y apoyo, muy especialmente a mis padres a quienes amo, admiro y respeto. A mis hermanos, que me han enseñado todo lo bueno de las personas. A mis sobrinos maravillosos, a mis cuñadas. A mi amiga y novia Dolores por soportame y estar aca conmigo.

RESUMEN DE LA TESIS

Nombre: "Dispersión de Rayleigh en multicapas de silicio poroso"

Sustenta: Miller Toledo Solano Dirigida por el Dr. Yuriy Rubo

El silicio poroso (Si-por) es un material nanoestructurado, considerado como prospecto para la fabricación de dispositivos fotónicos. La tecnología para hacer la porosidad espacialmente periódica es relativamente simple y barata. Sin embargo, como el Si-por es un material altamente desordenado, todavía no existe una teoría que describa adecuadamente las propiedades ópticas que tome en cuenta la modificación de las propiedades de la luz, debido a las fluctuaciones de la constante dieléctrica. Este trabajo se enfoca a considerar los efectos de la dispersión de Rayleigh (DR) de la luz en la estructura desordena del Si-por, para explicar discrepancias apreciables entre los espectros de reflectancia y transmitancia experimentales y los teóricos, obtenidos en el caso ideal por el método de matriz de transferencia. En particular, se estudia el espectro de transmitancia de estructuras de multicapas que contienen una microcavidad. Se observa que el pico de transmitancia resonante es fuertemente reducido. Se elabora un modelo teórico para las fluctuaciones de la constante dieléctrica en Si-por, y se calcula el tiempo de dispersión del modo de luz localizado en la microcavidad con respecto a la DR. Las pérdidas debidas a la DR explican satisfactoriamente los datos experimentales.

Índice general

Pr	Prólogo		
1.	Est	ructuras fotónicas de silicio poroso	3
	1.1.	Fabricación de silico poroso	3
	1.2.	Crecimiento de multicapas de silicio poroso	5
	1.3.	Propiedades ópticas de las multicapas de silicio poroso	6
2.	El r	nétodo de matriz de transferencia	9
	2.1.	Reflexión y refracción de ondas planas	9
	2.2.	Derivación de la ecuaciones de Fresnel	11
	2.3.	Matriz de transferencia de una capa delgada	13
	2.4.	Matriz de transferencia para un sistema de multicapas	15
	2.5.	Medio de capas periódicas (espejos de Bragg)	17
	2.6.	Ondas de Bloch y estructura de bandas	19
3.	Con	nparación del método de matriz de transferencia con experimen-	21
	3.1	Simulación de la reflectancia experimental	21
	3.2.	De espeios de Bragg a microcavidades	24
	3.3.	Probabilidad de transmisión en multicapas con una microcavidad	25
	3.4.	Comparación con resultados experimentales	31
4.	Disp	persión de Rayleigh en silicio poroso	34
	4.1.	Modificación a la transmisión Breit-Wigner por dispersión de Rayleigh	34

4.2.	Modelo de desorden en silicio poroso	39
4.3.	Estimación del tiempo de vida de los modos de luz	46
Conclusiones		
Bibliografía		

Prólogo

El silicio cristalino (Si-c) es el material más importante en la industria electrónica, ya que constituye el 95 % del mercado de los semiconductores. Gran parte de su éxito se basa en que sus propiedades electrónicas son controlables, es relativamente fácil obtener la impurificación tipo n y p. Puede decirse que vivimos en la era del silicio, que comenzó alrededor de los años sesentas con los primeros circuitos integrados, ya que en la actualidad se pueden conectar un gran número de circuitos en dimensiones muy pequeñas. Pero sin duda, el gran reto es incrementar la velocidad de procesamiento de datos y de comunicación por arriba de los valores conocidos, lo cual sugiere cada vez más la sustitución de electrones por fotones. Pero el Si-c presenta problemas en aplicaciones ópticas, ya que no es ni electro ni fotoluminiscente y cuando emite luz lo hace de forma muy poco eficientemente.

Debido a la problemática presentada, se generó un gran interés cuando en los trabajos de Pickering [1] y Canham [2], se descubrieron las propiedades de luminicencia del silicio poroso (Si-por).

El Si-por, obtenido mediante la disolución del Si-c en una solución electrolítica de ácido fluorhídrico (HF) en diferentes concentraciones, es capaz de emitir luz visible, tanto por exitación electrónica como fótonica de manera eficiente [3]. Una de las grandes ventajas del Si-por es sin duda que su fabricación es simple y barata, de ahí tantos trabajos realizados en estudios experimentales y teóricos [4, 5] (ver también [6] y las referencias ahí mencionadas).

La propiedad recien discutida, hace al silicio poroso un excelente candidato para aplicaciones en la optoelectrónica, esto es, combinaciones de óptica y electrónica. Muchos de los componentes optoelectrónicos, tales como los LEDs y las guías de ondas, pueden hacerse de silicio, y ya se piensa en un láser de silicio como una nueva tecnología que podría tener un impacto masivo en el futuro de los semiconductores y en industrias de telecomunicaciones [7].

Aún cuando existen muchos estudios en el Si-por, todavía no se han estudiado a fondo los efectos de dispersión que sufren las ondas electromagnéticas debido a la naturaleza desordenada presente en el Si-por. Estos efectos son fuentes importantes de pérdidas de energías que limitan las características ópticas del material. Por tal

Prólogo

motivo, esta tesis se enfoca en la dispersión de Rayleigh (DR) como un mecanismo de pérdida de energía, para explicar discrepancias apreciables, entre los datos experimentales y las predicciones teóricas obtenidas mediante el método de matriz de transferencia (donde no se consideran pérdidas), en los espectros de reflectancia y trasnmitancia de multicapas de *Si-por*. En particular, los efectos de pérdida de energía resaltan a la vista en los espectros de transmitancia de una estructura de microcavidad, que se forma por dos multicapas periódicas y una cavidad incrustada en ellas. Los modos de luz localizados dentro de la cavidad resultan en la existencia de máximos de transmitancia. Estos picos son suprimidos parcial o totalmente por la *DR*.

Esta tesis se divide en cuatro Capítulos y una sección de conclusiones. Los dos primeros Capítulos tienen un carácter introductorio. En el primer Capítulo se hace una descripción de la fabricación del *Si-por* y el crecimiento de las multicapas en una dimensión. También se analizan las propiedades ópticas de estas multicapas así como sus usos.

En el segundo Capítulo se presenta el método de matriz de transferencia, capaz reproducir los espectros de transmisión y reflexión de medios dieléctricos de capas perfectas. En particular, se estudia un medio de capas dieléctricas periódicas y se obtiene su relación de dispersión, misma que permite la obtención de la estructura de bandas, la densidad de estados, y otras caractrísticas que necesitaremos después.

En el tercer Capítulo se llevan a cabo simulaciones teóricas para la reflectancia de las estructuras fotónicas analizadas en las figuras 3(c) y 3(d) reportadas en [8]. Estas simulaciones se comparan con los datos experimentales reportados ahí mismo. También se presentan los espectros de transmitancia de estructuras de microcavidad que fueron fabricadas y analizadas como parte de esta tesis, y se presenta un desarrollo para obtener la expresión analítica de la transmitancia de los modos que son localizados dentro de la cavidad. Esta expresión se compara con la transmitancia experimental de la microcavidad.

En el cuarto Capítulo se presenta un modelo teórico de las fluctuaciones en la constante dieléctrica del *Si-por*, y se calcula el tiempo de vida del modo de luz en la cavidad que disminuye con la DR. Este tiempo es tomado en cuenta para estimar pérdidas por dispersión. Finalmente se resumen las conclusiones de este trabajo.

Capítulo 1

Estructuras fotónicas de silicio poroso

1.1. Fabricación de silico poroso

El Si-por fue descubierto por Uhlir [9] en 1956, durante estudios de electropulido de obleas de Si-c, usando un electrolito que contenía HF. Él encontró que al incrementar la corriente sobre cierto umbral, comenzaba a ocurrir una disolución parcial de la oblea de Si-c. Ahora se sabe que la solución de HF sirve para que se dé el proceso de disolución.



Figura 1.1: Dispositivo para la preparación del Si-por.

Un dispositivo típico y sencillo que puede ser usado para producir Si-por se muestra en la figura 1.1. Una oblea de Si-c se coloca como el ánodo de la celda elec-

Estructuras fotónicas de silicio poroso

troquímica, el cátodo es un alambre de platino, el electrolito esta compuesto de HF/etanol/glicerina. El material que forma a la celda electroquímica es de teflón ya que es altamente resistente al ácido. Al pasar una corriente eléctrica de unos cuantos miliamperes a través de la celda electroquímica, comienza el ataque químico, creándose orificios o poros en la oblea de Si-c y dejando una estructura densa en canales que penetran profundamente en el interior de la oblea, lo que se conoce como Si-por.

Debido al gran número de burbujas que se generan durante la formación del Sipor, es necesario el uso del etanol para mejorar la penetración de la solución en los poros que se están formando, y al mismo tiempo ayuda al desprendimiento de burbujas de hidrógeno [10]. La glicerina se introduce porque se ha observado que disminuye la rugosidad de la superficie [11]. El Si-por puede fabricarse a partir de Si-c tipo n (Si-c envenenado con impurezas donadoras) o p (Si-c envenenado con impurezas aceptoras) y con cualquier orientación cristalográfica [12]. La necesidad de impurificar el material reside en que sin la acumulación de huecos en la interfaz donde se está formando el poro, no se da el proceso electroquímico de ataque [13]. En el caso de muestras tipo n, es necesario iluminar durante el proceso de fabricación para la generación de huecos [14].

Se han propuesto varios modelos diferentes para la disolución química del Si-c y en todos ellos como se mencionó antes, se acepta que los huecos son requeridos para la formación de los poros. El proceso de disolución del Si-c, es debido a la transferencia de dos electrones a través de la red del Si-c, con la siguiente reacción química [16]

 $Si + 2HF + 2h^+ \longrightarrow SiF_2 + 2H^+$,

donde h $^+$ son los huecos y H $^+$ son los iones de hidrógeno. El SiF₂ es atacado nuevamente con HF vía la siguiente reacción

$$\operatorname{Si} F_2 + 4\operatorname{H} F \longrightarrow \operatorname{H}_2 \operatorname{Si} F_6 + \operatorname{H}_2,$$

dejando una estructura que posee una superficie enorme pasivada con hidrógeno.

Entre los varios modelos propuestos para la disolución del Si-c, el mecanismo presentado por Lehmann y Gösele [17] es el más aceptado en la comunidad del Si-por. Éste propone que un hueco h⁺ no se puede aproximar a la interfaz del Si-por ya que requiere una energía adicional para penetrar dentro de la pared que divide dos poros; en cambio, para trasladarse a la punta del poro no requerirá energía adicional por lo que se moverá a esa zona. Por lo tanto la pared del poro quedará libre de huecos, sin embargo, un lento ataque químico comienza debido a la permanencia en HF, mientras que la disolución química continuará en la punta del poro.

La morfología del poro y el porcentaje de porosidad del Si-por fabricado depende de la concentración de HF en la solución, de la resistividad de la oblea de Si-c que a su vez depende del tipo de impurificación, y de la densidad de corriente eléctrica usada.

Estructuras fotónicas de silicio poroso

El tiempo de reacción que se requiere varía, dependiendo del tipo de Si-c usado, así como de la concentración de HF en la solución. Se ha observado que existe una dependencia lineal entre el tiempo de anodización y el grosor del Si-por obtenido [15]. Existen diversos tamaños y formas de poros. El poro más común es de cilindro, con varios grados de ramificación y estrechamiento del área transversal [18]. La diferencia en la morfología del poro para materiales tipo n y p son evidentes en la figura 13 en [19]. En el caso de Si-c tipo p^+ , es decir, Si-c altamente impurificado, se observa una estructura altamente anisotrópica de filamentos o alambres de Si-c perpendiculares la superficie.

Es posible desprender el Si-por del substrato del Si-c si se aplica una densidad de corriente del orden de 500 mA/cm² durante unos segundos. Exiten métodos de secado para evitar que las muestras sean menos frágiles. Uno consiste en colocar las muestras en solución de etanol, después calentar estas muestras en un ambiente de oxígeno a temperaturas de hasta 300°C.

Es posible variar la intensidad la corriente eléctrica en una forma periódica y obtener capas porosas periódicas formando lo que se conoce como multicapas.

1.2. Crecimiento de multicapas de silicio poroso

La posibilidad de formar estructuras de multicapas usando *Si-por* de diferentes porosidades, radica en las características básicas del proceso de crecido. Es decir, la influencia de los parárametros de entrada, tal como la densidad de corriente aplicada, la concentración del ácido, el tipo del silicio y el tiempo de reacción. El control de todos estos parámetros es crucial para la formación de una multicapa de alta calidad.

El crecimiento de multicapas de *Si-por* se lleva a cabo mediante una variación de la porosidad con la profundidad. En la figura 1.2 se muestra el proceso de crecido de una multicapa periódica. Con la variación de la densidad de corriente, la porosidad cambia únicamente en la dirección del ataque electroquímico. El proceso de crecido es controlado por una computadora permitiendo una alta reproducibilidad de la propiedades estructurales de las multicapas. De esta manera, es posible fabricar cualquier multicapa que se tenga en mente, como por ejemplo, estructuras aleatorias, estructuras de Fibonacci [20], además de las periódicas mencionadas. Las multicapas pueden observarse mediante microscopía electrónica de barrido (en ingles SEM).

Actualmente el laboratorio del Dr. J. Antonio del Río en el Centro de Investigación en Energía, UNAM, cuenta con el equipo necesario para llevar a cabo el crecido de un gran número de multicapas con la más altas espectativas, por ejemplo, se han observado oscilaciones del campo electromagnético en una superred basada en Sipor [21]. En ese laboratorio se ha logrado crecer multicapas formadas por cientos de capas [8], como en muy pocos lugares en el mundo se consigue. Los anchos de las



Figura 1.2: Representación esquemática del proceso de formación de multicapas de Si-por mediante variaciones de la corriente. Si-c es transformado en Si-por por anodización en HF con una densidad de corriente j_1 fija. Después de un tiempo t_1 la corriente j_1 es cambiada a un valor más alto j_2 y el resultado es una capa más porosa (la capa gris). La capa porosa la cual ha sido establecida después de un cierto tiempo persiste durante el ataque electroquímico. Después de un tiempo t_2 la densidad de corriente es bajada a j_1 lo cual da como resultado una capa menos porosa(la capa gris-oscuro). Este proceso puede ser repetido muchas veces.

capas oscilan entre algunas decenas hasta algunos de cientos de nm.

En la figura 1.3 se muestra la sección transversal de un espejo diseñado en este laboratorio para reflexión parcial del visible y completa para el infrarrojo cercano [8].

1.3. Propiedades ópticas de las multicapas de silicio poroso

La propagación de la luz en multicapas dieléctricas tiene propiedades similares al movimiento de electrones en un cristal convencional. En particular, existen las bandas de frecuencias prohibidas (brechas fotónicas) para la luz. Ningún modo de Estructuras fotónicas de silicio poroso



Figura 1.3: Una multicapa de *Si-por*, hecha por ataque electroquímico de una oblea de silicio normal. Las capas más claras son más porosas que las capas oscuras. Esta multicapa es un espejo muy efectivo con pico de reflectividad del 95% en el intervalo de 700 nm a 800 nm [8].

luz con frecuencia dentro de esta brecha puede entrar a la estructura fotónica. Por otro lado, existen regiones de frecuencias, donde es posible localizar espacialmente los modos fotónicos y aumentar la intensidad del campo eletromagnético.

La multicapa periódica en una dimensión es el cristal fotónico más simple, aunque existen cristales fotónicos en dos y tres dimensiones. Esta tesis se limita al estudio en una dimensión. El cristal fotónico en una dimensión actúa como un espejo perfecto para la luz con una frecuencia dentro de la brecha fótonica, misma que se incrementa proporcionalmente a la razón de los índices de refración [22, 6] y, para una razón de los índices de refración, hasta un cierto límite, la brecha se alarga definiéndose mejor a medida que el número de periodos aumenta [6]. En una dimensión, la brecha se mueve a frecuencias mayores a medida que la onda incidente se aleja de la dirección normal a las capas, por lo que término brecha debe reemplazarse por el de pseudobrecha, tal como se vera más adelante. La estructura de las multicapas con diferentes índices de refracción no es nueva y sus propiedades ópticas ya han sido muy estudiadas [23, 24, 25, 26].

La posibilidad de modular fácilmente los índices de refración, abrió la puerta para la fabricación de reflectores de Bragg de alta reflectividad, junto con los filtros Fabry-Perot [25], [26], y guías de ondas [26], [27]. Por otro lado, estructuras de microcavidad han ayudado a reducir el ancho de la línea fotoluminiscente y aumentar la intensidad en magnitudes considerables [28]. Por todo lo anterior se espera que el *Si-por* sea para la fotónica lo que el silicio es para la electrónica.

Para entender cómo funciona una multicapa, se hace incidir una onda plana a través del material. Es bien sabido que cuando una onda es reflejada por las varias interfaces dieléctricas, un efecto de interferencia multiple ocurre. En este principio simple está basado el funcionamiento de las multicapas dieléctricas. Escogiendo en una manera apropiada los espesores y los valores de los índices de refracción de las capas, es posible generar diferentes espectros de reflexión. Es así como se fabrican espejos dieléctricos y filtros ópticos.

Para comparar la respuesta óptica de las multicapas con datos experimentales, generalmente se usa el método de matriz de transferencia. En el caso ideal de capas perfectas, esta aproximación se cumple, ya que describe la respuesta óptica del sistema global en términos del comportamiento de la luz en capas continuas. Este método es introducido en el próximo Capítulo.

Capítulo 2

El método de matriz de transferencia

2.1. Reflexión y refracción de ondas planas

Antes de abordar el método de la matriz de transferencia, se revisará brevemente el problema de la reflexión y refracción de ondas planas monocromáticas en una interfaz plana entre dos medios homogéneos, isotrópicos, no magnéticos y con indices de refracción reales.

Una onda incidiendo en la interfaz, en general se dividirá en dos ondas en la interfaz z = 0, una onda transmitida avanzando en el segundo medio y una onda reflejada propagándose de regreso dentro del primero (ver figura 2.1). Las leyes de la teoría electromagnética conducen a ciertos requisitos que se deben cumplir para los campos, y son referidas como las condiciones de contorno sobre el campo electromagnético. Específicamente, una de éstas es que la componente de la intensidad del campo eléctrico E que es tangente a la interfaz debe ser continua a través de ésta (lo mismo debe suponerse para el campo magnético H).

Sea $\mathbf{E_1} \exp[i(\mathbf{k_1} \cdot \mathbf{r} - \omega t)]$ la amplitud de la onda incidente con frecuencia ω y vector de onda $\mathbf{k_1}$. Las amplitudes de la onda plana reflejada y transmitida son $\mathbf{E'_1} \exp[i(\mathbf{k'_1} \cdot \mathbf{r} - \omega t)]$ y $\mathbf{E_2} \exp[i(\mathbf{k_2} \cdot \mathbf{r} - \omega t)]$ respectivamente. Aquí $\mathbf{k'_1}$ y $\mathbf{k_2}$ son los vectores correspondientes de la propagación. La condición límite que relaciona estas tres amplitudes de campo en la interfaz requerirá que la variación espacial (y temporal) a lo largo de la superficie de todos los campos sea la misma, de esta manera

$$(\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r})_{z=0} = (\mathbf{k}'_1 \cdot \mathbf{r})_{z=0} = (\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{r})_{z=0}.$$
 (2.1)



Figura 2.1: Onda plana incidiendo en el la frontera z=0 entre dos medios homogéneos, isotrópicos, sin pérdidas. θ_1 , θ'_1 y θ_2 , son los ángulos de incidencia, reflejado, y transmitido de los vectores de onda $\mathbf{k_1}$, $\mathbf{k'_1}$ y $\mathbf{k_2}$, respectivamente.

De (2.1) obtenemos que

$$|\mathbf{k}_1| = |\mathbf{k}_1'| = \frac{\omega}{c} n_1, \qquad |\mathbf{k}_2| = \frac{\omega}{c} n_2.$$
(2.2)

donde n_1 y n_2 son los índices de refracción del medio 1 y 2, respectivamente.

Si $\theta_1, \theta_{1'}$ y θ_2 , son los ángulos de incidencia, reflejado, y transmitido de los vectores de onda con respecto a la normal del plano de incidencia respectivamente, entonces de la ecuación (2.1), cumple con la ley de la reflexión y $\theta_1 = \theta_2$

$$n_1 \sin \theta_1 = n_2 \sin \theta_2. \tag{2.3}$$

Las amplitudes de las ondas reflejada y transmitida pueden expresarse en términos de la amplitud de la onda incidente imponiendo condiciones límites en la interfaz z = 0. En la figura 2.2 se muestra un medio en ambos lados de la interfaz z = 0con índices de refracción n_1 y n_2 , respectivamente. Una onda plana con vector de onda $\mathbf{k_1}$ y frecuencia ω incide desde el medio 1. La figura 2.2 (a), muestra una onda incidente donde el vector de campo eléctrico \mathbf{E} es perpendicular al plano de incidencia, mientras que la figura 2.2 (b), muestra una onda donde \mathbf{E} se encuentra en éste. Las condiciones de contorno en las componentes tangenciales de los vectores de campo eléctrico y magnético, requieren que E_x , E_y , H_x y H_y sean continuos en la interfaz z = 0.

Por otro lado, dentro un medio homogéneo, isotrópico y no magnético, los vectores de campo eléctrico y magnético satisfacen la ecuación de onda

$$\nabla^{2}\mathbf{E} - n^{2}\frac{\partial^{2}\mathbf{E}}{\partial t^{2}} = 0, \qquad \nabla^{2}\mathbf{H} - n^{2}\frac{\partial^{2}\mathbf{H}}{\partial t^{2}} = 0.$$
(2.4)

y una solución a esta ecuación puede ser tomada como la superposición de las ondas reflejadas y transmitidas en cada medio. De esta manera



Figura 2.2: Onda plana incidiendo en el límite entre dos medios homogéneos, de índices de refracción n_1 y n_2 . (a) Una onda entrante para quien su campo **E** es normal al plano de la incidencia, (b) Ahora el campo **E** esta en el plano de incidencia.

$$\mathbf{E} = \begin{cases} (\mathbf{E}_1 \ e^{i\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r}} + \mathbf{E}'_1 \ e^{i\mathbf{k}'_1 \cdot \mathbf{r}})e^{-i\omega t}, & z < 0\\ (\mathbf{E}_2 \ e^{i\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{r}} + \mathbf{E}'_2 \ e^{i\mathbf{k}'_2 \cdot \mathbf{r}})e^{-i\omega t}, & z > 0 \end{cases},$$
(2.5)

donde $\mathbf{E_1}$ es la amplitud incidente, $\mathbf{E'_1}$ es la amplitud reflejada, y $\mathbf{E_2}$ es la amplitud transmitida. La magnitud del campo magnético puede ser obtenido de

$$\mathbf{H} = n \, \frac{\mathbf{k} \times \mathbf{E}}{k}.\tag{2.6}$$

La amplitud \mathbf{E}'_2 es cero a causa de que no hay una onda incidiendo desde la región z > 0, incluimos este término ya que el resultado obtenido puede ser generalizado para estructuras de multicapas.

2.2. Derivación de la ecuaciones de Fresnel

La onda TE, donde el vector de campo eléctrico es transversal al plano de incidencia, también se conoce como onda s derivado de alemán senkrecht (perpendicular). La figura 2.2(a) muestra la reflexión y transmisión de la onda s. Haciendo uso de las condiciones de continuidad en las componentes tangenciales de \mathbf{E} y \mathbf{H} , se tiene que para algún punto y en algún tiempo

$$\mathbf{E}_{1s} + \mathbf{E}'_{1s} = \mathbf{E}_{2s} + \mathbf{E}'_{2s}$$

$$\left(-\mathbf{H}_{1s} + \mathbf{H}'_{1s}\right) \cos \theta_1 = \left(-\mathbf{H}_{2s} + \mathbf{H}'_{2s}\right) \cos \theta_2,$$

(2.7)

donde los lados izquierdo y derecho de la última ecuación son las magnitudes totales de **H** paralelas a la interfaz entre los medios 1 y 2, repectivamente. La dirección positiva se toma a donde x se incrementa, es por eso que las componentes H_{1s} y H_{2s} aparecen con signo menos. La ecuación anterior puede escribirse en una forma matricial de la forma

$$D_s(1) \begin{pmatrix} E_{1s} \\ E'_{1s} \end{pmatrix} = D_s(2) \begin{pmatrix} E_{2s} \\ E'_{2s} \end{pmatrix}, \qquad (2.8)$$

donde

$$D_s(i) = \begin{pmatrix} 1 & 1\\ -n_i \cos \theta_i & n_i \cos \theta_i \end{pmatrix}, \quad i = 1, 2$$
(2.9)

donde la ecuación (2.6) ha sido utilizada.

Un par de ecuaciones similares pueden derivarse cuando la onda entrante tiene al vector de campo eléctrico paralelo al plano de incidencia. Esta onda también se conoce como onda p. Imponiendo de nuevo la continuidad en las componentes tangenciales de **E** y **H** se obtiene

$$(E_{1p} - E'_{1p})\cos\theta_1 = (E_{2p} - E'_{2p})\cos\theta_2, n_1 (E_{1p} + E'_{1p}) = n_2 (E_{2p} + E'_{2p}),$$
(2.10)

otra vez estas dos ecuaciones pueden reescribirse en una forma matricial

$$D_p(1) \begin{pmatrix} E_{1p} \\ E'_{1p} \end{pmatrix} = D_p(2) \begin{pmatrix} E_{2p} \\ E'_{2p} \end{pmatrix}, \qquad (2.11)$$

donde

$$D_p(i) = \begin{pmatrix} \cos \theta_i & \cos \theta_i \\ -n_i & n_i \end{pmatrix}, \quad i = 1, 2.$$
(2.12)

Los coeficientes de reflexión y transmisión para las ondas s y p también conocidos como los coeficientes de Fresnel, están dados por

$$r_{s,p} = \left(\frac{E'_{1s,p}}{E_{1s,p}}\right)_{E'_{2s,p}=0}, \quad t_{s,p} = \left(\frac{E_{2s,p}}{E_{1s,p}}\right)_{E'_{2s,p}=0}.$$
(2.13)

La reflectancia y la transmitancia están relacionados por las ecuaciones

$$R_{s,p} = |r_{s,p}|^2, \quad T_{s,p} = \frac{n_2 \cos \theta_2}{n_1 \cos \theta_1} |t_{s,p}|^2, \qquad (2.14)$$

a los coeficientes de Fresnel $r_{s,p}$ y $t_{s,p}$.

El método de matriz de transferencia

2.3. Matriz de transferencia de una capa delgada

Ahora se estudiará el problema de la reflexión y tansmisión de la radiación electromagnética a través de una capa delgada homogénea e isotrópica, tratando con los campos eléctricos y magnéticos y sus condiciones de continuidad en ambas interfaces. Supondremos a partir de ahora y en lo que sigue que la onda incidente es una onda TE (onda s), ha no ser que se diga lo contrario.



Figura 2.3: Capa delgada de medio dieléctrico homogéneo. Las índicaciones representan las amplitudes del campo eléctrico como está explicado en el texto.

La estructura dieléctrica está descrita por (ver figura 2.3)

$$n(z) = \begin{cases} n_1, & z < 0\\ n_2, & 0 < z < d\\ n_3, & d < z \end{cases}$$
(2.15)

donde n_1 , n_2 , y n_3 son los índices de refracción y d es el espesor de la capa. Como el medio es homogéneo en la dirección x, la componente del campo eléctrico que es paralela a la interfaz puede escribirse como

$$E = E(z) \ e^{i(k_x x - \omega t)},\tag{2.16}$$

donde ω es la frecuencia de la onda y k_x es la componente del vector de onda k a lo largo de las interfaces, y de la ecuación (2.1), debe tener el mismo valor en todas las capas de manera similar al caso de una sola interfaz.

En la ecuación (2.16), se supone que la onda electromagnética se propaga en el plano xz. El campo eléctrico consiste de una onda viajando hacia la derecha y una onda viajando hacia la izquierda y puede ser escrito como

$$E(z) = a \ e^{ik_z z} + b \ e^{-ik_z z}, \tag{2.17}$$

donde $\pm k_z$ son las componentes z del vector de onda, y a y b son constantes en cada capa homogénea. La matriz característica que relaciona los campos en dos límites adyacentes, puede ser introducida definiendo

$$a_{1} = a(0^{-}),$$

$$b_{1} = b(0^{-}),$$

$$a'_{2} = a(0^{+}),$$

$$b'_{2} = b(0^{+}),$$

$$a_{2} = a(d^{-}),$$

$$b_{2} = b(d^{-}),$$

$$a'_{3} = a(d^{+}),$$

$$b'_{3} = b(d^{+}),$$
(2.18)

donde 0⁻ representa el lado izquierdo de la interfaz, z = 0, y 0⁺ representa el lado derecho de la misma interfaz. De la misma manera, d^- y d^+ se definen para la interfaz z = d. Si se representan las dos componentes de E(z) como vectores columnas, los vectores columnas mostrados en la figura 2.3 están relacionados por

$$\begin{pmatrix} a_1 \\ b_1 \end{pmatrix} = D_1^{-1} D_2 \begin{pmatrix} a'_2 \\ b'_2 \end{pmatrix},$$

$$\begin{pmatrix} a'_2 \\ b'_2 \end{pmatrix} = P_2 \begin{pmatrix} a_2 \\ b_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{-i\phi_2} & 0 \\ 0 & e^{i\phi_2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_2 \\ b_2 \end{pmatrix},$$

$$\begin{pmatrix} a_2 \\ b_2 \end{pmatrix} = D_2^{-1} D_3 \begin{pmatrix} a'_3 \\ b'_3 \end{pmatrix},$$

$$(2.19)$$

donde D_1 , D_2 , y D_3 son las matrices introducidas en la sección 2.2 y están dadas por

$$D_s(i) = \begin{pmatrix} 1 & 1\\ -n_i \cos \theta_i & n_i \cos \theta_i \end{pmatrix}, \qquad (2.20)$$

donde i = 1, 2, 3 y θ_i es el ángulo de propagación en cada medio y se relaciona a k_{iz} por

$$k_{iz} = \frac{n_i \omega}{c} \cos \theta_i. \tag{2.21}$$

 P_2 es la matriz de propagación, la cual toma en cuenta los cambios de fase debido a la propagación a través de la capa, y ϕ_2 está dado por

$$\phi_2 = k_{2z}d. \tag{2.22}$$

Los vectores columnas representados por las amplitudes de onda en cada interfaz se relacionan por un producto de matrices 2×2 en secuencia. Cada lado de la interfaz

está representada por una matriz, y el bulto en cada capa esta representado por una matriz de propagación [29].

De la ecuación (2.19), las amplitudes a_1 , b_1 y a_2 , b_2 están relacionados por

$$\begin{pmatrix} a_1 \\ b_1 \end{pmatrix} = D_1^{-1} D_2 P_2 \begin{pmatrix} a_2 \\ b_2 \end{pmatrix}.$$
(2.23)

y la matriz $D_1^{-1} D_2 P_2$ que relaciona las amplitudes de los campos en dos límites adyacentes es conocida como como la matriz de transferencia [30].

2.4. Matriz de transferencia para un sistema de multicapas

En el caso de multicapas, la estructura dieléctrica se describe por

$$n(z) = \begin{cases} n_0, & z < z_0, \\ n_1, & z_0 < z < z_1, \\ n_2, & z_1 < z < z_2, \\ \vdots \\ n_N, & z_{N-1} < z < z_N, \\ n_s, & z_N < z, \end{cases}$$
(2.24)

donde n_l es el índice de refracción en la capa l, z_l es la posición de la interface entre la capa l y la capa l + 1, n_s es el índice de refracción del substrato y n_0 es el índice refracción del medio incidente. Los espesores de la capas d_l están relacionados a las z_l 's por

$$d_{1} = z_{1} - z_{0},$$

$$d_{2} = z_{2} - z_{1},$$

$$\vdots$$

$$d_{N} = z_{N} - z_{N-1}.$$

(2.25)
(2.26)

La distribución de campo eléctrico puede escribirse como

$$E(z) = \begin{cases} a_0 \ e^{ik_{0z}(z-z_0)} + b_0 \ e^{-ik_{0z}(z-z_0)}, & z < z_0, \\ a_l \ e^{ik_{lz}(z-z_l)} + b_l \ e^{-ik_{lz}(z-z_l)}, & z_{l-1} < z < z_l, \\ a'_s \ e^{ik_{sz}(z-z_0)} + b'_s \ e^{-ik_{sz}(z-z_0)}, & z_N < z, \end{cases}$$
(2.27)

donde k_{lz} es la componente z del vector de onda

$$k_{lz} = \left[\left(\frac{n_l \omega}{c} \right)^2 - k_x^2 \right]^{1/2}, \quad l = 0, 1, 2, \dots, N, s,$$
 (2.28)

y está relacionado al ángulo θ_l por la ecuación (2.21). Los valores a_l , b_l representan las amplitud de la onda en lado izquierdo de la interfaz $z = z_l$. Usando el mismo argumento que en la sección anterior, se escribe

$$\begin{pmatrix} a_0 \\ b_0 \end{pmatrix} = D_0^{-1} D_1 P_1 \begin{pmatrix} a_1 \\ b_1 \end{pmatrix},$$

$$\begin{pmatrix} a_l \\ b_l \end{pmatrix} = D_l^{-1} D_{l+1} P_{l+1} \begin{pmatrix} a_{l+1} \\ b_{l+1} \end{pmatrix}, \quad l = 1, 2, ..., N,$$
 (2.29)

donde N + 1 representa al medio substrato, $a_{N+1} = a_s$, $a_{N+1} = b_s$ y las matrices $D'_l s$ están dadas por las ecuaciones (2.9) y (2.12), para las ondas s y p respectivamente. La relación entre a_0 , b_0 y a_s , b_s puede escribirse como

$$\begin{pmatrix} a_0 \\ b_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a'_s \\ b'_s \end{pmatrix}, \qquad (2.30)$$

con la matriz dada

$$\begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} = D_0^{-1} \left[\prod_{l=1}^N D_l P_l D_l^{-1} \right] D_s;$$
(2.31)

Los elementos matriciales M_{ij} satisfacen la relación

$$M_{21} = M_{12}^*, \quad M_{22} = M_{11}^*.$$
 (2.32)

y el determinante de la matriz M es muy simple [29] y está dado por

$$|M| = \frac{n_s \cos \theta_s}{n_0 \cos \theta_0}.$$
(2.33)

Los coeficientes de reflexión y transmisión de una onda plana monocromática que incide desde el medio de índice de refracción n_0 a través de una estructura de multicapas dieléctricas a un substrato de índice de refracción n_s , definen como

$$r = \left(\frac{b_0}{a_0}\right)_{b_s=0},\tag{2.34}$$

у

$$t = \left(\frac{a_s}{a_0}\right)_{b_s=0},\tag{2.35}$$

respectivamente.

De la ecuación matricial (2.30) y siguiendo las definiciones (2.34) y (2.35), obtenemos

$$r = \left(\frac{M_{21}}{M_{11}}\right),\tag{2.36}$$

El método de matriz de transferencia

у

$$t = \left(\frac{1}{M_{11}}\right),\tag{2.37}$$

de esta manera la matriz M también se puede escribir como

$$M = \begin{pmatrix} \frac{1}{t} & \frac{r^*}{t^*} \\ \frac{r}{t} & \frac{1}{t^*} \end{pmatrix}.$$
 (2.38)

La reflectancia R y la transmitancia T de la estructura de capas se escriben como

$$R = |r|^2 = \left|\frac{M_{21}}{M_{11}}\right|^2,\tag{2.39}$$

$$T = \frac{n_s \cos \theta_s}{n_0 \cos \theta_0} |t|^2 = \frac{|M|}{|M_{11}|^2},$$
(2.40)

у

$$R + T = 1.$$
 (2.41)

por conservación de la energía.

2.5. Medio de capas periódicas (espejos de Bragg)

Los medios de capas periódicos son una clase especial de medios en los cuales capas alternantes de dos diferentes medios dieléctricos, son apiladas de forma periódica. La propagación de ondas en estos medios exhibe mucho interés y fenómenos potencialmente útiles. Estos incluyen reflexión de Bragg, la holografía, y las brechas fotónicas.

Consideremos un medio periódico donde el eje z se toma a lo largo de la dirección normal a las capas. El perfil del índice de refracción está dado por

$$n(z+j\Lambda) = n(z), \tag{2.42}$$

donde j es un entero en el rango fijo $1 \le j \le N$. Las capas que definen el primer periodo tienen índices de refracción

$$n(z) = \begin{cases} n_2, & 0 < z < b; \\ n_1, & b < z < \Lambda; \end{cases}$$
(2.43)

donde b y $a = \Lambda - b$ son los espesores de las capas y Λ es el periodo. La distribución de campo eléctrico E(z) dentro de cada capa homogénea puede ser expresada como la suma de una onda plana incidente y una onda plana reflejada. Las amplitudes complejas de estas dos ondas constituyen las componentes de un vector columna. El

campo eléctrico en la n-ésima celda unitaria puede escribirse como (usemos n en vez de j por comodidad)

$$E(z) = \begin{cases} c_n e^{i k_{2z}(z - n\Lambda + a)} + d_n e^{-i k_{2z}(z - n\Lambda + a)}, & (n - 1)\Lambda < z < n\Lambda - a; \\ a_n e^{i k_{1z}(z - n\Lambda)} + b_n e^{-i k_{1z}(z - n\Lambda)}, & n\Lambda - a < z < n\Lambda; \end{cases}$$
(2.44)

donde los valores para k_{1z} y k_{2z} están dados por la ecuación (2.28).

La matriz de transferencia \mathcal{M} que relaciona las amplitudes complejas de la onda plana incidente a_{n-1} y la onda reflejada b_{n-1} en una capa de una celda unitaria a la capa equivalente en la próxima celda, puede obtenerse usando la ecuación (2.29), de ésta manera las constantes a_{n-1} , b_{n-1} , a_n y b_n , se relacionan por por

$$\begin{pmatrix} a_{n-1} \\ b_{n-1} \end{pmatrix} = D_1^{-1} D_2 P_2 D_2^{-1} D_1 P_2 \begin{pmatrix} a_n \\ b_n \end{pmatrix},$$
$$= \begin{pmatrix} \mathcal{A} & \mathcal{B} \\ \mathcal{C} & \mathcal{D} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_n \\ b_n \end{pmatrix} = \mathcal{M} \begin{pmatrix} a_n \\ b_n \end{pmatrix}$$
(2.45)

Los elementos matriciales de \mathcal{M} para una onda TE son

$$\mathcal{A}_{TE} = e^{-ik_{1z}a} \left[\cos(k_{2z}b) - \frac{1}{2}i\left(\frac{k_{2z}}{k_{1z}} + \frac{k_{1z}}{k_{2z}}\right) \operatorname{sen}(k_{2z}b) \right],$$

$$\mathcal{B}_{TE} = e^{ik_{1z}a} \left[-\frac{1}{2}i\left(\frac{k_{2z}}{k_{1z}} - \frac{k_{1z}}{k_{2z}}\right) \operatorname{sen}(k_{2z}b) \right],$$

$$\mathcal{C}_{TE} = e^{-ik_{1z}a} \left[\frac{1}{2}i\left(\frac{k_{2z}}{k_{1z}} - \frac{k_{1z}}{k_{2z}}\right) \operatorname{sen}(k_{2z}b) \right],$$

$$\mathcal{D}_{TE} = e^{ik_{1z}a} \left[\cos(k_{2z}b) + \frac{1}{2}i\left(\frac{k_{2z}}{k_{1z}} + \frac{k_{1z}}{k_{2z}}\right) \operatorname{sen}(k_{2z}b) \right],$$
(2.46)

y de acuerdo a la ecuación (2.46), pueden ser vistos como una función de k_x .

Debido a que la matriz \mathcal{M} relaciona los campos de dos capas equivalentes, ésta es unimodular, es decir,

$$\mathcal{A}\mathcal{B} - \mathcal{C}\mathcal{D} = 1. \tag{2.47}$$

En la misma manera que en el caso anterior

$$\mathcal{A}_{TM} = e^{-ik_{1z}a} \left[\cos(k_{2z}b) - \frac{1}{2}i \left(\frac{n_1^2 k_{2z}}{n_2^2 k_{1z}} + \frac{n_2^2 k_{1z}}{n_1^2 k_{2z}} \right) \operatorname{sen}(k_{2z}b) \right],$$

$$\mathcal{B}_{TM} = e^{ik_{1z}a} \left[-\frac{1}{2}i \left(\frac{n_2^2 k_{1z}}{n_1^2 k_{2z}} - \frac{n_1^2 k_{2z}}{n_2^2 k_{1z}} \right) \operatorname{sen}(k_{2z}b) \right],$$

$$\mathcal{C}_{TM} = e^{-ik_{1z}a} \left[\frac{1}{2}i \left(\frac{n_2^2 k_{1z}}{n_1^2 k_{2z}} - \frac{n_1^2 k_{2z}}{n_2^2 k_{1z}} \right) \operatorname{sen}(k_{2z}b) \right],$$

$$\mathcal{D}_{TM} = e^{ik_{1z}a} \left[\cos(k_{2z}b) + \frac{1}{2} \left(\frac{n_1^2 k_{2z}}{n_2^2 k_{1z}} + \frac{n_2^2 k_{1z}}{n_1^2 k_{2z}} \right) \operatorname{sen}(k_{2z}b) \right],$$

(2.48)

El método de matriz de transferencia

son los elementos matriciales de \mathcal{M} para una onda TM, ligeramente diferentes de aquellos para una onda TE.

Con el diseño apropiado de un medio de capas periódicas, es posible alcanzar extremadamente alta reflectancia para alguna región espectral selecionada. A ésta multicapa se le conoce como *reflector de Bragg*.

2.6. Ondas de Bloch y estructura de bandas

La propagación de ondas en medios periódicos es muy similar al movimiento de electrones en sólidos cristalinos. De nuevo consideremos un medio homogéneo en el plano xy y periódico a lo largo del eje z, idéntico a una red unidimensiónal que es invariante ante traslaciones de la red, tal como lo muestra la ecuación (2.42). Es posible escribir al vector de onda usando \mathbf{k}_{\perp} y q: el vector de onda en el plano y el vector de onda en la dirección z.

De acuerdo al teorema de Bloch, las soluciones a las ecuaciones de onda para un medio periódico son de la forma

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}_{\perp}\cdot\boldsymbol{\rho}} e^{iqz} \mathbf{u}_q(z), \qquad (2.49)$$

donde la función $\mathbf{u}_q(z)$ es periódica con periodo Λ , es decir,

$$\mathbf{u}_q(z+\Lambda) = \mathbf{u}_q(z). \tag{2.50}$$

La constante q es el vector de onda de Bloch. En términos de nuestra representación de vector columna y de la ecuación (2.44), la condición de periodicidad (2.50) para la onda de Bloch es simplemente

$$\begin{pmatrix} a_n \\ b_n \end{pmatrix} = e^{i q \Lambda} \begin{pmatrix} a_{n-1} \\ b_{n-1} \end{pmatrix}, \qquad (2.51)$$

y de las ecuaciones (2.45) y (2.51) se sigue que el vector columna de Bloch satisface el problema de valores propios

$$\mathcal{M}\left(\begin{array}{c}a_n\\b_n\end{array}\right) = e^{-i\,q\Lambda}\left(\begin{array}{c}a_n\\b_n\end{array}\right),\tag{2.52}$$

donde el factor de fase $e^{-iq\Lambda}$ es el valor propio de la matriz de transferencia \mathcal{M} . La relación de dispersión entre ω , k_x , y q para la función de onda de Bloch se obtiene de resolver el determinante $det|\mathcal{M} - Ie^{-iq\Lambda}| = 0$, donde I es una matriz unitaria, esto tiene como resultado

$$q(k_x,\omega) = \frac{1}{\Lambda} \cos^{-1} \left[\frac{1}{2}(\mathcal{A} + \mathcal{B})\right].$$
(2.53)

donde (\mathcal{A} y (\mathcal{D} están dadas por la ecuaciones (2.46) y (2.48) para una onda TE o TM, respectivamente.

Regímenes donde $|\frac{1}{2}(\mathcal{A} + \mathcal{D})| < 1$ corresponden para q real, y la onda de Bloch se propaga; cuando $|\frac{1}{2}(\mathcal{A} + \mathcal{D})| > 1$, $q = m\pi/\Lambda + i K_i$ tiene una parte imaginaria K_i y por ello el vector de onda de Bloch es evanecente, m es un entero y denota las bandas llamadas prohibidas del medio periódico. Los bordes de las bandas están en los regímenes donde $|\frac{1}{2}(\mathcal{A} + \mathcal{D})| = 1$. Finalmente, la estructura de bandas para una onda TE en medio de capas periódicas está dada por la relación de dispersión [29].

$$\cos(q\Lambda) = \cos(k_{1z}a)\cos(k_{2z}b) - \frac{1}{2}\left(\frac{k_{2z}}{k_{1z}} + \frac{k_{1z}}{k_{2z}}\right)\sin(k_{1z}a)\sin(k_{2z}b).$$
(2.54)

De la misma manera es posible obtener la esctructura de bandas para una onda TM mediante la relación de dispersión

$$\cos(q\Lambda) = \cos(k_{1z}a)\cos(k_{2z}b) - \frac{1}{2}\left(\frac{n_a^2k_{2z}}{n_b^2k_{1z}} + \frac{n_b^2k_{1z}}{n_a^2k_{2z}}\right)\sin(k_{1z}a)\sin(k_{2z}b).$$
(2.55)

Si la onda de Bloch se encuentra en una de las brechas prohibidas, como ya mencionamos arriba, la onda es evanecente y no puede propagarse en el cristal, de esta manera, se espera que la energía de la luz sea totalmente reflejada y el medio actúa como reflector de alta reflectancia para la onda incidente.

Finalmente, con el método de matriz de transfrencia presentado en este Capítulo, se pueden llevar acabo simulaciones teóricas de las respuestas ópticas de las multicapas hechas con *Si-por*, y compararlas con los resultados obtenidos de los experimentos realizados en el laboratorio, tal como se describe en el Capítulo siguiente.

Capítulo 3

Comparación del método de matriz de transferencia con experimentos

3.1. Simulación de la reflectancia experimental

Se han llevado a cabo simulaciones teóricas del espectro de reflectancia, y se han comparado con los datos experimentales obtenidos recientemente por V. Agarwal y J. A. del Río [8]. Este artículo enfocado a multicapas de *Si-por*, describe una técnica experimental para modificar y adaptar la brecha fotónica de la estructura a los propósitos necesarios. Se prepararon subespejos apilados para diferentes longitudes de onda λ centradas en las regiones del visible y en el infrarrojo cercano. Estos subespejos consisten de un arreglo periódico de capas, con índices de refracción n_a y n_b , tales que $n_a a = n_b b = \lambda/4$, donde *a* y *b* son los espesores de las capas correspondientes. La estructura completa se forma por una superposición de estos subespejos, lo cual amplía la región de frecuencias donde la reflectancia alcanza un máximo.

El trabajo [8] presenta los datos para dos espejos de este tipo. El primer espejo, diseñado para el rango completo de luz visible, consiste de 77 subespejos, y la longitud de onda λ con la que fue preparado el primer subespejo es $\lambda_1 = 450$ nm, los subsecuentes subespejos son preparados a partir de la relación $\lambda_{i+1} - \lambda_i = 3$ nm. Cada subespejo tiene cuatro periodos, con un contraste de índices de refracción $n_a/n_b = 1.4/2.2$ el mismo en todos los subespejos, cambiando únicamente los espesores de las capas a_i y b_i . Mediante el uso del método de matriz de transferencia y aprovechando los resultados obtenidos para un sistema de capas periódicas vistos en las secciones 2.5 y 2.6, se obtiene el espectro de reflectancia para este primer espejo y se compara con el obtenido experimentalmente en [8]. El resultado se presenta en la figura 3.1.

El segundo espejo preparado y estudiado en [8] es más simple, ya que consiste sólo



Figura 3.1: Reflectancia absoluta vs longitud de onda del espejo hecho en [8] para el rango completo del visible, con contraste de los índices de refracción 1.4/2.2. La línea a trazos muestra los datos de simulación y la línea continua muestra los datos experimentales de V. Agarwal y J. A. del Río [8].

de dos subespejos, y refleja solamente dos diferentes rangos de longitudes de onda. El primer subespejo es preparado para $\lambda = 600 \text{ nm}$ con el contraste de índices de refracción $n_b/n_a = 1.3/2.3$, y el segundo para $\lambda = 1700 \text{ nm}$ con contraste $n_b/n_a = 1.6/2.0$. Cada subespejo tiene 10 periodos. Los resultados de la comparación entre los datos de la simulación teórica y los datos experimentales se muestran en la figura 3.2.

De estas figuras podemos hacer las siguientes observaciones. En la figura 3.1 el ancho de la región donde la reflectancia alcanza un máximo más pronunciado, está satisfactoriamente reproducido; sin embargo, la amplitud los datos experimentales no alcanzan el máximo predicho por la teoría. Además, en las predicciones teóricas se pueden observar picos de interferencia secundarios que no se observan experimentalmente.



Figura 3.2: Reflectancia absoluta vs longitud de onda del espejo formado con dos subespejos diseñados para reflejar en las longitudes de 600 nm y 1700 nm. Los contrastes en los índices de refracción son 1.3/2.3 y 1.6/2.0 respectivamente. La línea a trazos muestra los datos de simulación y la línea continua muestra los datos experimentales de V. Agarwal y J. A. del Río [8].

En la figura 3.2 se observa que la amplitud donde se alcanza el primer máximo está muy bien reproducida, puesto que los valores de los máximos coinciden. Sin embargo no ocurre lo mismo con los anchos, pues el ancho experimental es más agudo. El segundo máximo experimental observado en la misma figura, muestra un ancho más pronunciado y movido a longitudes de onda más grandes de lo esperado. Nosotros no hemos tomado en cuenta ninguna dependencia del índice de refracción con la longitud de onda; sin embargo, esto nos podría ayudar a explicar porqué existe este corrimiento de la región del máximo. Por otro lado, al igual que en el caso anterior, los picos secundarios son suprimidos experimentalmente.

Se han llevado a cabo comparaciones de resultados teóricos con datos experimentales en [31, 21] y se observaron discrepancias muy parecidas a las aquí presentadas.

Existen muchos factores involucrados para que la reproducibilidad en general, no sea satisfactoria. Los factores que influyen directamente en las posiciones de los intervalos de longitudes de onda, donde la reflectancia alcanza máximos, están intimamente ligados a los cambios de los caminos ópticos de las capas. Existen varios argumentos para los cambios tanto en los índices de refracción como en los espesores. Uno de éstos, son las pequeñas fluctuaciones tanto en la densidad de corriente aplicada, como en las concentraciones de los componentes de la solución del electrolito. También se puede suponer que la disolución de capas ya formadas durante el proceso de crecido, provoca que las primeras capas estén expuestas a mayor tiempo de ataque electroquímico, y en consecuencia el índice de refracción presenta una degradación conforme el número de periodos aumenta. Por otro lado, falta considerar el cambio del índice de refracción con la longitud de onda, que ha sido ignorado hasta ahora.

Todos estos factores mencionados no influyen de manera importante en la disminución de los máximos como se vera más adelante. Las pérdidas de energía que conlleva a una disminución en la amplitud de los máximos, se deben pricipalmente a la absorción del *Si-por* y a los efectos de la dispersión de las ondas electromagnéticas a través de la estructura entera.

Para explicar las discrepancias visibles en los espectros de transmitancia, tales como la disminución en la amplitud en los máximos y la desaparición de picos secundarios experimentales, nosotros proponemos que el mecanismo importante de pérdida de energía (ya que para el intervalo de longitudes de onda considerado, la absorción del por- Si resulta despreciable) se debe a la dispersión de Rayleigh (RS) de la luz en la estructura naturalmente desordenada presente en el *Si-por*. Tal propuesta se discutirá en detalle en el Capítulo cuatro.

Al tratar de analizar el efecto de la RS en sistemas como los reflectores de Bragg vistos anteriormente, la situación se vuelve muy compleja por los muchos picos de interferencia que existen. Es por ello que estudiamos tal efecto en una microcavidad embebida en un reflector de Bragg que nos ayuda a analizar un solo pico del espectro, tal como se discute en la siguiente sección.

3.2. De espejos de Bragg a microcavidades

El sistema de capas periódicas conocido también como el cristal fotónico unidimensional más simple, actúa como un espejo perfecto para una frecuencia dentro de una brecha. Ésta se ve reemplazado por "pseudobrecha", debido a que para ondas incidentes que se alejan de la dirección pérpendicular a las capas, la brecha se mueve a frecuencias cada vez mayores. La brecha completa aparece únicamente en los cristales tridimensionales ya que para toda dirección del vector de onda, las brechas vienen a traslaparse y se consigue así una brecha fótónica completa. En una dimensión la brecha fotónica existe sólo a lo largo de una dirección de propagación.

Para un modo de luz dentro de una brecha fotónica de una estructura de capas periódicas, su vector de onda $q \simeq \pi/\Lambda + i K_i$ tiene una parte imaginaria K_i . Por eso el modo es evanecente y presenta una razón de decaimiento más grande, a medida que la frecuencia se acerca al centro de la brecha fotónica de la estructura.

Cuando un defecto es introducido en medio de un sistema de capas periódicas (ver figura 3.3) el sistema es llamado resonador Fabry-Perot. La principal característica de este defecto es que permite la existencia de modos localizados dentro de la brecha fotónica, y esto debe a que los modos decaen exponencialmente en ambos lados del defecto dentro de los dos subespejos. La onda de luz perteneciente a un modo localizado, queda atrapada y se mueve hacia atrás y hacia adelante entre los subespejos. Para subespejos de tamaños finitos, una onda de frecuencia ω puede, por tunelaje de resonancia, atravesar la estrutura completa y un máximo se alcanza en la transmisión en $\omega = \omega_0$ dentro de la brecha fotónica, este patrón se repite de nuevo en otras frecuencias resonantes tal como se mostrará más adelante.

La estructura fotónica unidimensional con subespejos de Bragg a ambos lados del defecto que se muestra en la figura 3.3, se asemeja al caso de una doble barrera de potencial, donde la probabilidad de transmisión T(E) puede mostrar resonancia debido a tunelaje a través de estados cuasi-ligados en el pozo entre las barreras. Tal estudio teórico de tunelaje resonante fue hecho por Breit y Wigner [32], en el contexto del incremento resonante de la captura de neutrones en física nuclear. Para este caso, los subespejos funcionan como "barreras de potencial para fotones".

Usando el método de matrices descritos en las secciones anteriores es posible calcular la probabilidad de transmisión a través de esta estructura completa.

3.3. Probabilidad de transmisión en multicapas con una microcavidad

Esta estructura con una microcavidad ya presentada en la figura 3.3, se compone de N periodos con contraste en los índices de refracción n_a/n_b , un defecto de índice de refracción n_a y espesor d, seguido por otros N periodos con contraste en los índices de refracción n_b/n_a . Las superfices enfrente y trasera son aire, de esta manera tenemos una estructura totalmente simétrica.

Si una onda con polarización TE incide desde la izquierda con un ángulo de incidencia θ_0 , de la ecuación (2.19) y de la figura 3.3 es fácil deducir que las amplitudes de las ondas incidentes se relacionan por

$$\begin{pmatrix} a_0 \\ b_0 \end{pmatrix} = D_0^{-1} D_1 P_1 \begin{pmatrix} a_1 \\ b_1 \end{pmatrix}.$$
(3.1)



Figura 3.3: Un defecto en una película de multicapas formado por un ensanchamiento doble de una de las capas del dieléctrico. Note que éste puede ser considerado como una interfaz entre dos espejos de Bragg.

De la ecuación-(2.45)

$$\begin{pmatrix} a_1 \\ b_1 \end{pmatrix} = \mathcal{M} \begin{pmatrix} a_2 \\ b_2 \end{pmatrix}$$
$$= \begin{pmatrix} \mathcal{A} & \mathcal{B} \\ \mathcal{C} & \mathcal{D} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_2 \\ b_2 \end{pmatrix},$$
(3.2)

donde \mathcal{M} es la matriz de transferencia analizada en la sección 2.6. Por lo tanto, las amplitudes complejas $a_0 \neq b_0$ de las ondas incidente y reflejada, respectivamente, están relacionadas después de N periodos, a las amplitudes $\alpha_1 \neq \beta_1$ de las ondas transmitidas y reflejadas en el defecto por

$$\begin{pmatrix} a_0 \\ b_0 \end{pmatrix} = D_0^{-1} D_1 P_1 \begin{pmatrix} \mathcal{A} & \mathcal{B} \\ \mathcal{C} & \mathcal{D} \end{pmatrix}^N P_1^{-1} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \beta_1 \end{pmatrix}$$
$$= J \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \beta_1 \end{pmatrix},$$
(3.3)

mientras que las amplitudes α_2 y β_2 de las ondas incidente y reflejada desde el defecto, se relacionan a las amplitudes complejas a_s y b_s por

$$\begin{pmatrix} \alpha_2 \\ \beta_2 \end{pmatrix} = P_1^{-1} \begin{pmatrix} \mathcal{A}^* & \mathcal{B}^* \\ \mathcal{C}^* & \mathcal{D}^* \end{pmatrix}^{-N} P_1 D_1^{-1} D_0 \begin{pmatrix} a_s \\ b_s \end{pmatrix}$$
$$= K \begin{pmatrix} a_s \\ b_s \end{pmatrix}.$$
(3.4)

Como las matrices D_s tienen coeficientes reales, se deduce fácilmente de las ecuaciones anteriores que

$$J = (K^*)^{-1}, (3.5)$$

y entonces es posible escribir la relación entre $a_0, b_0, y a_s, b_s$ como

$$\begin{pmatrix} a_0 \\ b_0 \end{pmatrix} = (K^*)^{-1} P_d K \begin{pmatrix} a_s \\ b_s \end{pmatrix}$$
$$= M_T \begin{pmatrix} a_s \\ b_s \end{pmatrix},$$
(3.6)

donde P_d es la matriz de propagación a través del defecto

$$P_d = \begin{pmatrix} e^{-i\phi_d} & 0\\ 0 & e^{i\phi_d} \end{pmatrix}, \tag{3.7}$$

y $\phi_d = k_{dz} d$, k_{dz} es la componente z del vector de onda en el defecto, y d es el tamaño del mismo.

Usando la ecuación (2.38), la matriz K puede escribirse como

$$K = \begin{pmatrix} \frac{1}{t_2} & \frac{r_2^*}{t_2} \\ \frac{r_2}{t_2} & \frac{1}{t_2^*} \end{pmatrix},$$
(3.8)

donde r_2 , t_2 son los coeficientes de reflexión y trasmisión cuando la onda incide desde el *defecto* hacia la derecha, al medio con índice de refracción n_0 (segundo subespejo). Usando de nuevo (2.38) y la ecuación (3.5), la matriz J viene a escribirse como

$$J = \begin{pmatrix} \frac{1}{t_1} & \frac{r_1^*}{t_1^*} \\ \frac{r_1}{t_1} & \frac{1}{t_1^*} \end{pmatrix} = \frac{1}{|K|} \begin{pmatrix} \frac{1}{t_2} & -\frac{r_2}{t_2} \\ -\frac{r_2^*}{t_2^*} & \frac{1}{t_2^*} \end{pmatrix},$$
(3.9)

de donde se deduce que

$$t_1 = |K|t_2 \quad -\frac{r_2}{t_1} = \frac{r_1^*}{t_1^*},\tag{3.10}$$

tal como era de esperarse del teorema de incidencia izquierda y derecha. Aqui r_1, t_1 son los coeficientes de reflexión y transmisión cuando la onda incide por la izquierda desde el medio con índice de refracción n_0 al defecto (primer subespejo).

Haciendo uso de las ecuaciones (2.39) y (2.40), la reflectancia y la transmitancia de cada subespejo se escriben como

$$R_{1} = |r_{1}|^{2}, \quad T_{1} = \frac{n_{a} \cos \theta_{a}}{n_{0} \cos \theta_{0}} |t_{1}|^{2},$$

$$R_{2} = |r_{2}|^{2}, \quad T_{2} = \frac{n_{0} \cos \theta_{0}}{n_{a} \cos \theta_{a}} |t_{2}|^{2},$$
(3.11)

y ya que $|K| = \frac{n_0 \cos \theta_0}{n_a \cos \theta_a}$ por (2.33), de las ecuaciones (3.10) y (3.11) se deduce que $T_1 = T_2$ y $R_1 = R_2$.

Desarrollando el producto $(K^*)^{-1} P_d K$ a partir de las ecuaciones (3.7), (3.8) y (3.9), obtenemos que el elemento M_{T11} se escribe como

$$M_{T11} = \frac{1 - r_2 r_2 e^{i2\phi_d}}{t_1 t_2 e^{i\phi_d}},$$
(3.12)

por lo tanto, el coeficiente de transmisión total es

$$t = \frac{1}{M_{T11}} = \frac{t_1 t_2 e^{i \phi_d}}{1 - r_2 r_2 e^{i 2 \phi_d}}.$$
(3.13)

De la ecuación (3.11) se tiene que

$$|t_1|^2 \, |t_2|^2 = T_2^2,$$

y el coeficiente de reflexión r_2 está relacionado con la reflectancia R_2 por

$$r_2 = R_2^{\frac{1}{2}} e^{i\delta}, \tag{3.14}$$

donde δ es el cambio de fase que incurre debido a la reflexión. El valor de la fase se obtiene de Arctan $(\delta) = \text{Im}(r_2)/\text{Re}(r_2)$.

Finalmente la probabilidad de transmisión para la estructura con una microcavidad incrustada entre dos subespejos de Bragg se escribe como

$$T = |t|^2 = \frac{T_2^2}{1 + R_2^2 - 2R_2\cos(2\phi_d + 2\delta)}.$$
(3.15)

La probabilidad de transmisión alcanza la unidad cuando $2\phi_d + 2\delta = 2\pi m$, condición para la existencia de un estado resonante, lo que sucede cuando $\lambda = \lambda_m$, donde *m* es un entero.

Desarrollando $2\phi_d + 2\delta$ alrededor de $2\pi m$

$$\cos(2\phi_d + 2\delta) \approx 1 - \frac{1}{2}(2\phi_d + 2\delta - 2\pi m)^2$$
 (3.16)

y considerando $T_2 \ll 1$ debido que la onda decae exponencialmente en ambos lados del defecto, encontramos que

$$1 + R_2^2 - 2R_2\cos(2\phi_d + 2\delta) \approx T_2^2 + (2\phi_d + 2\delta - 2\pi m)^2.$$
(3.17)

De esta manera la probabilidad de transmisión cerca de la longitud de onda de resonancia λ_m se escribe como

$$T = \frac{T_2^2}{T_2^2 + (2\phi_d + 2\delta - 2\pi m)^2}$$
(3.18)

En el caso $n_a > n_b$, la fase δ toma valor de cero en $\lambda = \lambda_m$ y el defecto tiene un valor tal que

$$2\phi_d = 2k_{dz}d = 2\pi m. (3.19)$$

Desarrollando la expresión anterior tenemos

$$n_a \cos(\theta_d d) = m \frac{\lambda_m}{2},\tag{3.20}$$

donde θ_d es el ángulo de refracción en el defecto. Así cuando la incidencia es normal $\theta_d = 0$, el estado base o el primer modo localizado se presentara cuando el defecto tenga una longitud

$$d = \frac{\lambda_1}{2n_a} \tag{3.21}$$

Una vez que la longitud del defecto queda fija, se presentarán modos resonantes en

$$\lambda = \frac{2n_a d}{m},\tag{3.22}$$

para $m = 1, 2, \ldots$ Cuando $n_b > n_a$, la fase δ toma valor de π en $\lambda = \lambda_m$, en este caso los modos resonantes se presentan cuando $m = 2, 3, \ldots$ En adelante se va a considerar el caso $n_a > n_b$ y el valor resonante λ_1 , de esta manera cambiamos el índice m = 1 por el índice 0.

Por conveniencia escribimos la ecuación para la probabilidad de transmisión como función de la frecuencia en vez del vector de onda. Muy cerca de la frecuencia de resonancia ω_0 , δ presenta una dependencia lineal como función de ω . Llevando a cabo un desarrollo alrededor de este valor tenemos que

$$\delta = \operatorname{Arctan}'(\delta)_{\omega_0}(\omega - \omega_0) = \gamma \, \frac{\omega - \omega_0}{\omega_0},\tag{3.23}$$

por otro lado, de las ecuaciones (3.19) y (3.20)

$$2k_{dz} d = 2\pi \frac{\omega}{\omega_0}.$$
(3.24)

De esta manera la probabilidad de transición cerca de la frecuencia de resonancia ω_0 viene a escribirse como

$$T(\omega) = \frac{\Gamma_N^2}{\Gamma_N^2 + (\omega - \omega_0)^2},$$
(3.25)

donde

$$\Gamma_N = \frac{T_2(\omega_0, N)\,\omega_0}{2(\gamma + \pi)},\tag{3.26}$$



Figura 3.4: Espectro de transmitancia obtenido para N = 3. El conjunto de líneas sólidas representan los datos experimentales de la muestra en diferentes puntos de iluminación, la línea de trazos son los datos teóricos obtenidos por el método de matriz de transferencia y la línea suave representa la aproximación Breit-Wigner. $\lambda_0 = 651$ nm, los índices y los espesores de ajuste son $n_a = 1.89$, $n_b = 1.34$ y a = 86 nm y b = 121 nm, respectivamente.

En el caso de incidencia oblicua y capas de espesores ópticos $\lambda_0/4$, con un defecto de espesor óptico de $\lambda_0/2$, la trasmitancia de cada subespejo obtenida de las ecuaciones (3.8) y (3.11), cerca de la frecuencia de resonancia ω_0 se escribe como

$$T_2(w_0, N) = \frac{4\sqrt{\left(\frac{n_a}{n_0}\right)^2 \sec^2\theta_0 - \tan^2\theta_0} \left(\frac{n_a^2 - n_0^2 \sin^2\theta_0}{n_b^2 - n_0^2 \sin^2\theta_0}\right)^N}{\left(1 + \sqrt{\left(\frac{n_a}{n_0}\right)^2 \sec^2\theta_0 - \tan^2\theta_0} \left(\frac{n_a^2 - n_0^2 \sin^2\theta_0}{n_b^2 - n_0^2 \sin^2\theta_0}\right)^N\right)^2}, \qquad (3.27)$$

que sólo depende del ángulo de incidencia θ_0 y de lo índices de refracción de las capas. La anchura Γ_N del pico muestra un decaimiento exponencial con el número de periodos N.

La ecuación (3.25) tiene una forma Lorentziana, y puede llamársele en analogía a la a la doble barrera de potencial como la probabilidad de transmisión Breit-Wigner para

fotones. Con una expresión analítica para el espectro de transmitancia se prosiguió en seguida a efectuar los experimentos con ayuda de la M. en C. M. C. Arenas y que son presentados en la siguiente sección para su discusión.

3.4. Comparación con resultados experimentales

De acuerdo al método de fabricación del Si-por presentado en el Capítulo 1, se llevó a cabo el crecimiento de estructuras tal como la presentada en la figura 3.3. Las distintas estructuras correponden a $N \ge 3$. De acuerdo a lo análisis de muchos experimentos realizados en el CIE, se ha logrado identificar de manera aproximada que para una oblea de Si-c impurificada con boro (p^+) de resistividad 0.002 Ω cm, un electrolito de HF/etanol/glicerina con una relación en concentración de 3/7/1, y densidades de corrientes de $I_a = 5 \text{ mA/cm}^2$ y $I_b = 45 \text{ mA/cm}^2$, se consiguen índices de refracción con valores $n_a = 1.95$ y $n_b = 1.45$, respectivamente.

Por conveniencia se escoge $\lambda_0 = 785 \text{ nm}$, longitud de onda donde la absorción del *Si-por* es despreciable. Los espesores de las capas que intencionalmente fueron crecidos se escogieron de la relacción

$$n_a a \simeq n_b b \simeq \frac{\lambda_0}{4}$$

dando como resultado espesores con longitudes $a \simeq 100$ nm y $b \simeq 135$ nm, respectivamente. El defecto con índice de refracción n_a tiene una longitud $d \simeq 2a$. Los espesores a y b se consiguen con tiempos de ataque de 28 y 6.1 segundos en cada caso, respectivamente. Para las densidades de corrientes I_a y I_b las porosidades son 26 % y 56 %, respectivamente. Todas las muestras fueron térmicamente oxidadas en un ambiente de oxígeno a 300°C por 10 minutos. El espectro de transmitancia de las muestras fue tomado con un espectrómetro Shimadzu ultraviolet-visible-NIR.

Los resultados obtenidos de los espectros de transmitancia tanto teóricos como experimentales son presentados en las figuras 3.4, 3.5 y 3.6 para N = 3,4 y 5, respectivamente. El conjunto de líneas sólidas representan los datos experimentales de la muestra en diferentes puntos de iluminación. Debido a que éstos presentan satisfactoriamente el mismo parecido, se puede hablar de muestras de buena calidad, que tienen una gran homogeneidad en la capas. La línea de trazos son los datos teóricos obtenidos por el método de matriz de transferencia y la línea completa representa la aproximación Breit-Wigner (3.25).

Para todo el rango de longitudes de onda considerado en cada figura, los datos experimentales siempre se encuentran de bajo de los datos teóricos. En particular, se observa claramente como la amplitud de la transmitancia en la longitud de onda de resonancia λ_0 se ve fuertemente suprimida, y disminuye conforme el número de periodos aumenta, tanto que los espectros experimentales para N = 6, 7, 8, 9 y 10,



Figura 3.5: Espectro de transmitancia obtenido para N = 4. El conjunto de líneas sólidas representan los datos experimentales de la muestra en diferentes puntos de iluminación, la línea de trazos son los datos teóricos obtenidos por el método de matriz de transferencia y la línea completa representa la aproximación Breit-Wigner. $\lambda_0 = 638$ nm, los índices y los espesores de ajuste son $n_a = 1.82$, $n_b = 1.31$ y a = 87 nm y b = 122 nm, respectivamente.

fueron omitidos debido a que el máximo es observado completamente suprimido. Las regiones a la derecha y a la izquierda de λ_0 donde se esperan máximos, también sufren una disminución en sus amplitudes. Para longitudes de onda mucho menores a λ_0 , el efecto de la absorción no puede ser ignorado. En las mismas figuras también se presenta la probabilidad de transmitancia Breit-Wigner, que reproduce satisfactoriamente la forma de los datos teóricos obtenidos por método de matriz de transferencia y resulta una mejor aproximación conforme el número de periodos aumenta.

Anteriormente se mencionó que los cambios en los índices de refracción y en los espesores, provocan desplazamientos en las posiciones de los máximos de reflectancia. Si estos cambios están presentes en las estructuras crecidas con defecto, los diversos caminos ópticos ya no satisfacen la condición $n_a a \simeq n_b b$, y si existe una disminución de éstos, la longitud de onda de resonancia λ_0 aparecera en una longitud de onda menor que la esperada.



Figura 3.6: Espectro de transmitancia obtenido para N = 5. El conjunto de líneas sólidas representan los datos experimentales de la muestra en diferentes puntos de iluminación, la línea de trazos son los datos teóricos obtenidos por el método de matriz de transferencia y la línea completa representa la aproximación Breit-Wigner. $\lambda_0 = 613 \text{ nm}$, los índices y los espesores de ajuste son $n_a = 1.76$, $n_b = 1.28 \text{ y } a = 87 \text{ nm y } b = 120 \text{ nm}$, respectivamente.

Se pueden suponer distintos valores tanto para los índices de refracción como para los espesores, esto en acuerdo con los caminos ópticos $n_a a \ y \ n_b b$, ya que un cambio en el índice de refracción provoca un cambio en el espesor y viceversa. Con los índices y espesores mostrados en cada figura, el modo resonante esperado de la teoría en 785nm, aparece en la longitud de onda del experimento λ_0 . En todas las figuras puede observarse que cambios en los caminos ópticos no afectan la amplitud del máximo de transmitancia, de esta manera no juegan un papel importante en la disminución del máximo experimental.

Es claro que los efectos de la dispersión de la luz que provocan una disminución en la amplitud del máximo de transmitancia, debe ser un fenómeno presente en la estructura del *Si-por*, es por eso que dedicaremos el siguiente Capítulo para estudiar este efecto y su contribución a la modificación de la transmitancia Breit-Wigner esperada.

Capítulo 4

Dispersión de Rayleigh en silicio poroso

4.1. Modificación a la transmisión Breit-Wigner por dispersión de Rayleigh

El método de matriz de transferencia usado hasta el momento para comparar resultados teóricos con resultados experimentales, es un método idealizado que no toma encuenta los siguientes efectos de pérdidas de energía: 1) se ignora la absorción por el material, 2) se consideran índices de refracción efectivos que son independientes de la posición, hechos que no siempre suceden.

Si observamos de cerca la estructura de *Si-por*, encontramos una estructura semejante a la de una esponja con esqueleto de *Si-c* tal como se muestra en la figura 4.1. Los diámetros de los alambres que forman el esqueleto tienen tamaños típicos a_{\perp} de unos cuantos nanómetros y las longitudes a lo largo de la dirección de crecimiento, donde estas ramas comienzan a tener fluctuaciones y se alejan de una forma cilindrica son de tamaños a_{\parallel} , del orden de unas cuantas decenas de nanómetros. Son estas variaciones en regiones microscópicas que provocan fluctuaciones de la constante dieléctrica $\delta \varepsilon(\mathbf{r})$, las que no han sido consideradas por el método de matriz de transferencia.

Debido a estas fluctuaciones en la constante dieléctrica, la dispersión de Rayleigh viene a ser particularmente importante como un medio de pérdida de energía, especialmente en bajas frecuencias de luz (infrarrojo y inicio de visible), cuando la absorción de Si-por es despreciable. Notamos que la absorción de Si-por decae con la frecuencia en una forma exponencial (de acuerdo con la regla de Urbah para un aislante), mientras las pérdidas gracias a la dispersión de Rayleigh van con la cuarta potencia de la frecuencia.

Dispersión de Rayleigh en silicio poroso



Figura 4.1: Arreglo de alambres de Si-c, dando como resultado la estructura del Si-por.

Entonces describimos al *Si-por* como un medio dieléctrico inhomogéneo pero no disipativo, es decir, $\varepsilon(\mathbf{r})$ es en cualquier lugar real y positivo, de esta manera la constante dieléctrica puede escribirse como

$$\varepsilon(\mathbf{r}) = \varepsilon_{eff} + \delta\varepsilon(\mathbf{r}), \tag{4.1}$$

donde ε_{eff} es la constante dieléctrica efectiva que conduce a un índice de refracción efectivo $n = \sqrt{\varepsilon_{eff}}$, utilizado en nuestros cálculos de matriz de transferencia pero donde las fluctuaciones en $\varepsilon(\mathbf{r})$ son ignoradas. La ecuación (4.1) es aproximada y no toma en cuenta las efectos cuánticos en los estados electrónicos en las alambres nanométricos de *Si-por*. Pero esperamos que nuestra aproximación pueda estimar la dispersión de Rayleigh satisfactoriamente.



Figura 4.2: La magnitud del campo |E(z)| en una estructura finita de N = 10 periodos. El modo con amplitud más alta corresponde al modo localizado en en centro de la brecha en una frecuencia ω_0 . El modo con amplitud menor corresponde a un modo con la misma frecuencia, pero con una una componente transversal $k_{\perp} = k_{min}$ del vector de onda k.



Figura 4.3: Estructura de bandas de modos de luz en un espejo de Bragg. La constante de la red es Λ y las capas alternantes tienen diferentes anchos. El ancho de la capa con $\epsilon_a = 3.61$ es $a = 0.4\Lambda$ y el ancho de la capa con $\epsilon_b = 1.69$ es $b = 0.6\Lambda$. Las tres figuras corresponden a diferentes valores de vector de onda transversal k_{\perp} . La microcavidad produce un estado quasi-localizado adentro de la brecha. Las flechas indican posibles procesos de dispersión de estado localizado en los modos extendidos.

En la figura 4.2 se muestra la magnitud del campo eléctrico, |E(z)| medido en unidades del campo incidente. La estructura corresponde a la mostrada en la figura 3.3 con N = 10 periodos. El modo que alcanza una magnitud más alta, corresponde a un modo localizado en el centro de la brecha que tiene una componente transversal $k_{\perp} = 0$ del vector de onda k. Notamos que por la situación típica experimental, este modo se encuentra en gran parte fuera del defecto. El modo de magnitud menor corresponde a uno con la misma frecuencia pero con una componente $k_{\perp} \neq 0$, este modo es extendido.

Lo anterior puede entenderse mejor a partir de la estructura de bandas para los modos electromagnéticos en un espejo de Bragg mostrada en la figura 4.3. En el caso cuando una microcavidad es introducida entre dos espejos de Bragg, aparece un modo localizado dentro de la brecha para cada valor del vector de onda transversal. Este modo para $k_{\perp} = 0$ está en resonancia con modos extendidos con $k_{\perp} \neq 0$. En particular, el modo localizado dentro de la brecha puede transferirse en modos extendidos que tienen el valor de k_{\perp} entre k_{min} y k_{max} . El valor k_{min} se obtiene de la relación de dispersión (2.54) dejando $q = \pi/\Lambda$, y k_{max} se obtiene cuando q = 0, es decir, cuando las ondas se propagan por completo en la dirección perpendicular a la de crecimiento.

Debido a lo anterior, los modos que están localizados dentro de la brecha en incidencia normal pueden, por dispersión de Rayleigh, llevar a cabo una transición a modos extendidos que se propagan en el resto del cristal. Por tal motivo la probabilidad de transimisión Breit-Wigner para fotones presentada en la ecuación (3.25) es

Dispersión de Rayleigh en silicio poroso



Figura 4.4: Espectro de transmitancia obtenido para N = 3. El conjunto de las líneas sólidas muestran los datos experimentales en diferentes puntos de iluminación y la línea de trazos muestra la transmisión de Breit-Wigner modificada (4.2) que mejor ajusta éstos datos. $\Gamma_p = 24.25 \text{ ps}^{-1}$.

válida solo para modos que no sufren dispersión de Rayleigh.

El caso de transmisión de fotones a través de los subespejos de Bragg de alta reflectividad, con una microvavidad entre ellos, presenta el mismo fenómeno físico mostrado en el caso de partículas que inciden sobre dos barreras de potencial consecutivas con una región clásicamente permitida entre ellas, donde las alturas de las barreras son mucho más grandes que las energías de las partículas incidentes. Los efectos de pérdidas en transmisión resonante pueden ser considerados en la misma manera que en el caso de tunelaje electrónico, y la expresión de Breit-Wigner (3.25) se transforma en [33, 34, 35]

$$T(\omega) = \frac{\Gamma_N^2}{(\Gamma_N + \Gamma_p)^2 + (\omega - \omega_0)^2}.$$
(4.2)

donde Γ_N^{-1} es el tiempo de vida del modo de luz en la cavidad debida a la probabilidad finita de atravesar los espejos de Bragg y Γ_p es la razón de pérdida en el curso del proceso de transmisión resonante, y en general incorpora los efectos de absorción (que no vamos a considerar aqui) y las pérdidas por dispersión de Rayleigh: $\Gamma_p = \Gamma_A + \Gamma_R$,



Figura 4.5: Espectro de transmitancia obtenido para N = 4. El conjunto de las líneas sólidas muestran los datos experimentales en diferentes puntos de iluminación y la línea de trazos muestra la transmisión de Breit-Wigner modificada (4.2) que mejor ajusta éstos datos. $\Gamma_p = 21.22 \text{ ps}^{-1}$.

y define un tiempo de vida $\tau = \Gamma_p^{-1}$ por respecto a estas pérdidas.

En la sección 3.4, las figuras 3.4, 3.5 y 3.6 mostraban los espectros de transmitancia en varios puntos de iluminación para la misma muestra de N = 3, 4 y 5 periodos, respectivamente. Con el fin de estimar la tasa de pérdidas Γ_p , estos mismos espectros se presentan ahora como una función de la energía del fotón y se muestran en las figuras 4.4, 4.5, y 4.6, donde además se presenta la probabilidad de trasmisión Breit-Wigner modificada (4.2) con el valor de Γ_p que ajusta los datos experimentales.

Las razones de escape $\Gamma_N \operatorname{son} \Gamma_3 = 49.5 \operatorname{ps}^{-1}$, $\Gamma_4 = 28.7 \operatorname{ps}^{-1} \operatorname{y} \Gamma_5 = 15.8 \operatorname{ps}^{-1}$. Los valores de Γ_p estimados de las figuras corresponden a $\Gamma_p = 24.25 \operatorname{ps}^{-1}$ para N = 3 periodos, $\Gamma_p = 21.22 \operatorname{ps}^{-1}$ para N = 4 periodos, y $\Gamma_p = 33.35 \operatorname{ps}^{-1}$ para N = 5 periodos. Usando los valores de Γ_p antes mensionados, se estima el tiempo de vida del modo localizado como $\tau = 0.045 \operatorname{ps}$.

El valor de Γ_p en el último caso de 5 periodos resulta un poco diferente a los primeros dos. Es necesario mencionar que este caso es poco reproducible experimentalmente y poco confiable como puede verse de la figura 4.6. Notamos también que aparece pequeño doblamiento del pico, que puede afectar el ajuste. Una posible razón de este



Figura 4.6: Espectro de transmitancia obtenido para N = 5. El conjunto de las líneas sólidas muestran los datos experimentales en diferentes puntos de iluminación y la línea de trazos muestra la transmisión de Breit-Wigner modificada (4.2) que mejor ajusta éstos datos. $\Gamma_p = 33.354 \,\mathrm{ps}^{-1}$.

doblamiento es la diferencia entre las frecuencias resonantes de los modos TE y TM que existe en el caso de incidencia oblicua (experimentalmente el ángulo de incidencia es aproximadamente 5° y la luz es no-polarizada). Para confirmar esto hace falta llevar a cabo más experimentos estudiando las dependencia de transmitancia como función de ángulo de incidencia y polarización.

En la siguiente sección se propone un modelo de desorden del *Si-por*, que nos permite calcular el tiempo de vida del modo localizado debido a la dispersión de Rayleigh y comparar con este mismo tiempo obtenido experimentalmente.

4.2. Modelo de desorden en silicio poroso

El Si-por, como se ha mencionado anteriormente, presenta una estructura naturalmente desordenada con variaciones en regiones micróscopicas que provocan fluctuaciones en la constante dieléctrica $\delta \varepsilon(\mathbf{r})$. Imaginemos al Si-por como una mezcla azarosa de ramas o alambres de Si-c alargados en la dirección de crecimiento, caracterizados con una constante dieléctrica $\varepsilon_2 = 12$ embedidas en un medio de constante dieléctrica ε_1 compuesto por aire (Ai) y residuos de SiO₂ que se producen debido a la oxidación térmica. De esta manera la constante dieléctrica en un punto **r** puede ser escrita como

$$\varepsilon(\mathbf{r}) = \varepsilon_1 + (\varepsilon_2 - \varepsilon_1)\Theta(\mathbf{r}).$$
 (4.3)

En este modelo la constante dieléctrica $\varepsilon(\mathbf{r})$ sólo puede tomar los valores ε_1 o ε_2 , de esta manera la función $\Theta(\mathbf{r})$ presenta una forma escalonada y puede ser definida como

$$\Theta(\mathbf{r}) = \begin{cases} 1, & \mathbf{r} \in \mathrm{Si} \\ 0, & \mathbf{r} \in \mathrm{Ai.} \end{cases}$$
(4.4)

La forma de definir si el vector de posición \mathbf{r} se encuentra en una región de constante dieléctrica ε_1 o se encuentra en una región de constate dieléctrica ε_2 , puede ser obtenida mediante el uso de una función $f(\mathbf{r})$ descrita por un ensamble de funciones aleatorias dando como resultado, la función de ruido mostrada en la figura 4.7, donde c es un parámetro que determina la porosidad de la estructura (ver ecuación (4.19) que sigue).



Figura 4.7: Representación esquemática de la función aleatoria $f(\mathbf{r})$. Las líneas de trazos señalan las regiones de Si-c y aire.

De acuerdo a la figura 4.7, si la función aleatoria $f(\mathbf{r})$ toma valores mayores a la constante c, el vector de posición \mathbf{r} se encontrará en una región de Si-c, de otra manera se encontrará en el medio compuesto con aire. Entonces, la constante dieléctrica $\varepsilon(\mathbf{r})$ depende de la función aleatoria en la forma

$$f(\mathbf{r}) > c, \quad \varepsilon(\mathbf{r}) = \varepsilon_2, f(\mathbf{r}) < c, \quad \varepsilon(\mathbf{r}) = \varepsilon_1.$$

$$(4.5)$$

De esta manera, la probabilidad de encontrarse en cualquiera de los medios con constantes dieléctricas ε_1 y ε_2 dependerá de si la función aleatoria toma valores mayores o menores al parámetro de porosidad c.

En nuestro modelo, la función $f(\mathbf{r})$ es una función de ruido gaussiano y su distribución de probabilidad tiene la forma [36] Dispersión de Rayleigh en silicio poroso

$$\mathcal{P}\left\{f(\mathbf{r})\right\} \propto \exp\left\{-\frac{1}{2}\iint d\mathbf{r}\,d\mathbf{r}'\,f(\mathbf{r})A(\mathbf{r}-\mathbf{r}')f(\mathbf{r}')\right\},\tag{4.6}$$

la cual tiene el funcional característico Φ

$$\Phi = \left\langle \exp\left\{i \int d\mathbf{r} f(\mathbf{r})g(\mathbf{r})\right\} \right\rangle = \exp\left\{-\frac{1}{2} \iint d\mathbf{r} d\mathbf{r}' g(\mathbf{r})B(\mathbf{r} - \mathbf{r}')g(\mathbf{r}')\right\}, \quad (4.7)$$

donde $B(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ es la función de correlación y es la función inversa de $A(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$:

$$\int d\mathbf{r}'' A(\mathbf{r} - \mathbf{r}'') B(\mathbf{r}'' - \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}').$$
(4.8)

Los valores promedios de la función de ruido son obtenidos a partir del funcional característico Φ mediante la ecuación

$$\langle f(\mathbf{r}_1)f(\mathbf{r}_2)...f(\mathbf{r}_n)\rangle = (-i)^n \left.\frac{\delta^n \Phi}{\delta g(\mathbf{r}_1)\delta g(\mathbf{r}_2)...\delta g(\mathbf{r}_n)}\right|_{g(\mathbf{r})=0}.$$
(4.9)

Usando esta expresión el valor promedio $\langle f(\mathbf{r}) \rangle = 0$. El valor promedio del cuadrado de la función de ruido o, mejor, el valor esperado del producto de dos funciones de ruido en las posiciones $\mathbf{r} \neq \mathbf{r}'$, se obtiene apartir de la ecuación (4.9) como

$$\langle f(\mathbf{r})f(\mathbf{r}')\rangle = B(\mathbf{r} - \mathbf{r}'),$$
(4.10)

es por esto que la función B es llamada la función de correlación. En nuestro modelo la función de correlación tiene las siguientes límites

$$B = \begin{cases} 0, & |\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \to \infty \\ B(0), & \mathbf{r} = \mathbf{r}'. \end{cases}$$
(4.11)

De esta manera los valores de las funciones $f(\mathbf{r}) \ge f(\mathbf{r}')$ serán no correlacionados si la distancia entre los puntos $\mathbf{r} \ge \mathbf{r}'$ tiende a infinito. Las distancias típicas en las cuales la función de correlación se va a cero son a_{\perp} en la dirección transversal $\ge a_{\parallel}$ en la dirección longitudinal. Sin pérdida de generalidad es posible hacer un escalamiento de las funciones $f(\mathbf{r})$ para tener B(0) = 1.

Debido a que la función de ruido $f(\mathbf{r})$ gaussiana es introducida en forma exponencial en el funcional característico, es provechoso escribir la función escalón $\Theta[f(\mathbf{r}) - c]$ de la forma

$$\Theta[f(\mathbf{r}) - c] = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq}{2\pi i} \frac{e^{iq[f(\mathbf{r}) - c]}}{q - i\delta},$$
(4.12)

donde $\delta \longrightarrow +0$. Cuando $f(\mathbf{r}) > c$, la integral es llevada a cabo sobre el semiplano superior del plano complejo y Θ toma el valor de la unidad. Si $f(\mathbf{r}) < c$ la integral es evaluada sobre el semiplano inferior y Θ toma el valor de cero.

Dispersión de Rayleigh en silicio poroso

Con todo lo anterior es posible obtener todos valores promedios de la constante dieléctrica $\varepsilon(\mathbf{r})$ y determinar sus fluctuaciones. Su valor promedio se obtiene de la ecuación (4.3) y resulta

$$\langle \varepsilon(\mathbf{r}) \rangle = \langle \varepsilon \rangle = \varepsilon_1 + (\varepsilon_2 - \varepsilon_1) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq}{2\pi i} \frac{\langle e^{i\,q[f(\mathbf{r}) - c]} \rangle}{q - i\delta},$$
 (4.13)

donde el valor de $\langle e^{i q f(\mathbf{r})} \rangle$ puede obtenerse del funcional característico Φ dejando $g(\mathbf{r}') = q \, \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r})$, lo cual da como resultado

$$\langle e^{i\,q\,f(\mathbf{r})}\rangle = e^{-\frac{1}{2}\,B(0)\,q^2} = e^{-\frac{1}{2}q^2}.$$
 (4.14)

Sustituyendo el valor anterior en la ecuación (4.13), el valor promedio resulta

$$\langle \varepsilon \rangle = \varepsilon_1 + (\varepsilon_2 - \varepsilon_1) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq}{2\pi i} \frac{e^{-icq}}{q - i\delta} e^{-\frac{1}{2}q^2}.$$
 (4.15)

Usando la definición del valor principal P

$$\frac{1}{q-i\delta} = \mathcal{P}\left(\frac{1}{q}\right) + i\pi\delta(q), \qquad (4.16)$$

la ecuación para el valor promedio de la constante dieléctrica viene a escribirse como

$$\langle \varepsilon \rangle = \varepsilon_1 + (\varepsilon_2 - \varepsilon_1) \left\{ \frac{1}{2} + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq}{2\pi i} \frac{e^{-\frac{1}{2}q^2 - icq}}{q} \right\}$$

$$= \varepsilon_1 + (\varepsilon_2 - \varepsilon_1) \left\{ \frac{1}{2} + \int_0^{\infty} \frac{dq}{2\pi i} \frac{e^{-\frac{1}{2}q^2 - icq}}{q} - \int_0^{\infty} \frac{dq}{2\pi i} \frac{e^{-\frac{1}{2}q^2 + icq}}{q} \right\}$$

$$= \varepsilon_1 + (\varepsilon_2 - \varepsilon_1) \left\{ \frac{1}{2} - \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq}{q} \operatorname{sen}(cq) e^{-\frac{1}{2}q^2} \right\}$$

$$= \varepsilon_1 + \frac{1}{2} (\varepsilon_2 - \varepsilon_1) \left[1 - \operatorname{erf} \left(\frac{c}{\sqrt{2}} \right) \right].$$

$$(4.17)$$

donde erf es la función error.

Por otro lado, el valor promedio puede obtenerse de

$$\langle \varepsilon(\mathbf{r}) \rangle = p\varepsilon_1 + (1-p)\varepsilon_2,$$
(4.18)

en donde p es la porosidad de la estructura, que toma valores entre 0 y 1. De las ecuaciones (4.17) y (4.18), es posible encontrar la porosidad como una función del parámetro c (ver figura 4.8):

$$p = \frac{1}{2} \left[1 + \operatorname{erf}\left(\frac{c}{\sqrt{2}}\right) \right].$$
(4.19)



Figura 4.8: Dependencia de la porosidad como función del parámetro c

Debido a que un esqueleto frágil de Si-c no puede soportar las grandes fuerzas capilares presentes dentro de los poros durante el secado, porosidades más altas que p = 0.8 son difíles de alcanzar. Por otro lado, nuestro modelo de Si-c comienza a tener problemas en los casos de porosidades cercanas a 0 y 1, respectivamente. En el caso de porosidades bajas, el problema consiste en que el modelo considera inclusiones de constante dieléctrica ε_1 que se encuentran aislada pero en la realidad, los poros que comienzan en la superficie de la oblea se alargan hasta la región próxima al substrato donde se termina la reacción. Por lo tanto, existe una trayectoria dentro del poro de constante dieléctrica ε_1 que conduce desde la superficie de la oblea donde comienza el poro hasta el otro extremo de éste, lo cual no es posible conseguirse con inclusiones aisladas de ε_1 . Lo mismo puede invocarse en el caso de porosidades altas.

Siguiendo con el cálculo del valores promedios, escribimos a la constante dieléctrica como la suma de su valor promedio más una parte fluctuante $\varepsilon(\mathbf{r}) = \langle \varepsilon \rangle + \delta \varepsilon(\mathbf{r})$, entonces la función de correlación de las fluctuaciones de la constante dieléctrica en dos puntos diferentes resulta

$$\langle \delta \varepsilon(\mathbf{r}) \delta \varepsilon(\mathbf{r}') \rangle = \langle \varepsilon(\mathbf{r}) \varepsilon(\mathbf{r}') \rangle - \langle \varepsilon \rangle^2.$$
 (4.20)

donde

$$\langle \varepsilon(\mathbf{r})\varepsilon(\mathbf{r}')\rangle = \varepsilon_1^2 + 2\varepsilon_1(\varepsilon_2 - \varepsilon_1)\langle \Theta(f(\mathbf{r}) - c)\rangle + (\varepsilon_2 - \varepsilon_1)^2 \langle \Theta(f(\mathbf{r}) - c) \Theta(f(\mathbf{r}') - c)\rangle = \varepsilon_1^2 + \varepsilon_1(\varepsilon_2 - \varepsilon_1) \left[1 - \operatorname{erf}\left(\frac{c}{\sqrt{2}}\right)\right] + (\varepsilon_2 - \varepsilon_1)^2 \langle \Theta(f(\mathbf{r}) - c) \Theta(f(\mathbf{r}') - c)\rangle.$$
(4.21)

El segundo término esta ecuación es

$$\langle \Theta(f(\mathbf{r}) - c) \Theta(f(\mathbf{r}') - c) \rangle = \iint \frac{dq \, dq'}{(2\pi i)^2} \frac{\langle e^{iqf(\mathbf{r}) + iq'f(\mathbf{r}')} \rangle}{(q - i\delta) \, (q' - i\delta)} e^{-ic(q+q')}, \tag{4.22}$$

El valor de $\langle e^{iqf(\mathbf{r})+iq'f(\mathbf{r}')} \rangle$ puede obtenerse del funcional Φ dejando $g(\mathbf{r}'') = q\delta(\mathbf{r}'' - \mathbf{r}) + q'\delta(\mathbf{r}'' - \mathbf{r}')$. De esta manera se obtiene

$$\langle e^{iqf(\mathbf{r})+iq'f(\mathbf{r}')}\rangle = \exp\left\{-\frac{1}{2}(q^2+q'^2) - B(\mathbf{r}-\mathbf{r}')qq'\right\}.$$
 (4.23)

Sustituyendo (4.23) en (4.22), y usando de nuevo la definición del valor principal P se tiene

$$\langle \Theta(f(\mathbf{r}) - c) \Theta(f(\mathbf{r}') - c) \rangle = \frac{1}{4} - \frac{1}{2} \operatorname{erf}\left(\frac{c}{\sqrt{2}}\right) + \zeta(B, c), \qquad (4.24)$$

donde

$$\zeta(B,c) = \frac{1}{(2\pi i)^2} \iint \frac{dq \, dq'}{qq'} \exp\left\{-\frac{1}{2}(q^2 + q'^2) - Bqq' - ic(q+q')\right\}.$$
(4.25)

De acuerdo con la ecuación (4.20), la función de correlación de las fluctuaciones de la constante dieléctrica $\varepsilon(\mathbf{r})$ en dos puntos puede escribirse como

$$\langle \delta \varepsilon(\mathbf{r}) \delta \varepsilon(\mathbf{r}') \rangle = (\varepsilon_2 - \varepsilon_1)^2 \left[\zeta(B, c) - \frac{1}{4} \mathrm{erf}^2 \left(\frac{c}{\sqrt{2}} \right) \right].$$
 (4.26)

En el caso de B = 0, la función $\zeta(B, c)$ tiene le valor

$$\zeta(0,c) = \left[\int \frac{dq}{(2\pi i)} \frac{e^{\left\{ -\frac{1}{2}q^2 - i\,c\,q \right\}}}{q} \right]^2 = \frac{1}{4} \mathrm{erf}^2\left(\frac{c}{\sqrt{2}}\right).$$

En este caso, la función de correlación de las fluctuaciones $\langle \delta \varepsilon(\mathbf{r}) \delta \varepsilon(\mathbf{r}') \rangle = 0$, lo cual era esperarse ya que B = 0 corresponde al caso cuando \mathbf{r} y \mathbf{r}' estan muy separados y no existe una correlación entre estos dos puntos.

Finalmente, la función de correlación de las fluctuaciones puede escribirse como

$$\langle \delta \varepsilon(\mathbf{r}) \delta \varepsilon(\mathbf{r}') \rangle = (\varepsilon_2 - \varepsilon_1)^2 G(B, c),$$
 (4.27)

donde

$$G(B,c) = \zeta(B,c) - \frac{1}{4} \operatorname{erf}^2\left(\frac{c}{\sqrt{2}}\right), \qquad (4.28)$$

que cumple con

$$G(B=0,c) = 0, \ \frac{\partial G}{\partial B} = \frac{1}{2\pi\sqrt{1-B^2}} \exp\left\{-\frac{c^2}{1+B}\right\}.$$
 (4.29)

Dispersión de Rayleigh en silicio poroso

Por otro lado, el medio azaroso presentado para el Si-por en la figura 4.1, muestra alambres de Si-c con diámetros a_{\perp} y longitudes de a_{\parallel} a lo largo de la dirección de crecimiento, la dirección z. Esta forma de crecido provoca fluctuaciones anisotrópicas en esta dirección, por tal motivo, las correlaciones anisotrópicas en los alambres de Si-c, pueden modelarse mediante la función de correlación de forma elíptica con longitudes de correlación a_{\perp} y a_{\parallel} :

$$B(\mathbf{r}) = \exp\left\{-\sqrt{\frac{x^2 + y^2}{a_{\perp}^2} + \frac{z^2}{a_{\parallel}^2}}\right\}.$$
(4.30)

De esta manera, $\langle (\delta \varepsilon)^2 \rangle_V$, la fluctuación cuadrática media en el volumen V de la constante dieléctrica que conduce a la dispersión de Rayleigh, puede obtenerse como una función de la porosidad. Usando la ecuación (4.27), $\langle (\delta \varepsilon)^2 \rangle_V$ se escribe como

$$\langle (\delta \varepsilon)^2 \rangle_V = \int_V d^3 \mathbf{r} \, \langle \delta \varepsilon(\mathbf{r}) \delta \varepsilon(0) \rangle$$

= $(\varepsilon_2 - \varepsilon_1)^2 a_\perp^2 a_{\parallel} \int_{-\infty}^{\infty} d^3 \rho \, G(B, c)$
= $4\pi (\varepsilon_2 - \varepsilon_1)^2 a_\perp^2 a_{\parallel} \int_0^{\infty} \rho^2 d\rho \, G(e^{-\rho}, c).$ (4.31)

Evaluando la integral por partes se obtiene

$$\langle (\delta\varepsilon)^2 \rangle_V = 4\pi (\varepsilon_2 - \varepsilon_1)^2 a_\perp^2 a_\parallel \int_0^\infty \frac{\rho^3}{3} \frac{\partial G(B,c)}{\partial B} e^{-\rho} d\rho$$

$$= \frac{2}{3} (\varepsilon_2 - \varepsilon_1)^2 a_\perp^2 a_\parallel \int_0^\infty \rho^3 \frac{e^{-\rho}}{\sqrt{1 - e^{-2\rho}}} \exp\left\{-\frac{c^2}{1 + e^{-\rho}}\right\}.$$
(4.32)

Haciendo el cambio de variables $z = e^{-\rho}$, finalmente se llega a

$$\langle (\delta\varepsilon)^2 \rangle_V = (\varepsilon_2 - \varepsilon_1)^2 a_\perp^2 a_\parallel \left[\frac{2}{3} \int_0^1 \frac{(-\ln z)^3}{1 + z^2} \exp\left\{ -\frac{c^2}{1 + z} \right\} \right]$$

= $(\varepsilon_2 - \varepsilon_1)^2 a_\perp^2 a_\parallel C(p),$ (4.33)

donde C escrita como función de p, se debe a que $\langle (\delta \varepsilon)^2 \rangle_V$ puede escribirse en función de la porosidad p mediante el uso de la ecuación (4.19). La figura 4.9 muestra la gráfica C(p).

Como se mencionó anteriormente, el modelo descrito para el Si-por, presenta problemas en los casos de porosidades cercancas a 0 y 1. Para porosidades medias el modelo debe ajustarse mejor a la realidad. En estos casos la curva 16p(1-p) reproduce satisfactoriamente los valores obtenidos para C(p), y la fluctuación cuadrática puede aproximarse por

$$\langle (\delta \varepsilon)^2 \rangle_V \simeq 16p(1-p)(\varepsilon_2 - \varepsilon_1)^2 a_\perp^2 a_\parallel,$$
(4.34)

donde se observa que $\langle (\delta \varepsilon)^2 \rangle_V$ es proporcional al volumen de los alambres.



Figura 4.9: La línea completa muestra la curva C(p). La línea a trazos es la curva 16p(1-p), donde p es la porosidad.

4.3. Estimación del tiempo de vida de los modos de luz

Las variaciones en las regiones microscópicas que provocan las fluctuaciones de la constante dieléctrica $\delta \varepsilon(\mathbf{r})$, conducen a escribir el operador de peturbación en el hamiltoniano del sistema que abarca al medio y al campo, mediante la integral [37]

$$\hat{V} = \frac{1}{8\pi} \int d^3 \mathbf{r} \,\delta\varepsilon(\mathbf{r}) \,\hat{\mathbf{E}} \cdot \hat{\mathbf{E}},\tag{4.35}$$

donde $\hat{\mathbf{E}}$ es el operador de campo eléctrico cuantizado.

La cuantización del campo electromagnético en los cristales fotónicos es llevado a cabo en [38]. En el caso del cristal unidimensional formado por dos subespejos y una microcavidad analizado en el Capítulo 3, el operador de campo eléctrico se expresa en términos de los operadores de creación y aniquilación de fotones en los estados $\nu = \{\mathbf{k}, \mathbf{e}\}$, localizados y extendidos. Los vectores **k** corresponden a los vectores de ondas y existen dos polarizaciones para cada uno, **e** indica la polarización de los campos. De esta manera

$$\hat{\mathbf{E}} = i \sum_{\nu} \sqrt{2\pi\hbar\omega_{\nu}} \left\{ \mathbf{E}_{\nu}(\mathbf{r})\hat{a}_{\nu} - \mathbf{E}_{\nu}^{*}(\mathbf{r})\hat{a}_{\nu}^{\dagger} \right\}.$$
(4.36)

Los vectores \mathbf{E}_{ν} son mutuamente ortogonales en el sentido

$$\int_{V} d^{3} \mathbf{r} \,\varepsilon(\mathbf{r}) \,\mathbf{E}_{\nu}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{E}_{\nu'}^{*}(\mathbf{r}) = \delta_{\nu,\nu'}, \qquad (4.37)$$

donde la integral es llevada a cabo sobre el volumen del cristal.

Como ya hemos mencionado anteriormente, el modo localizado con frecuencia ω_0 puede efectuar, gracias a la perturbación (4.35), una transición a modo extendido con la misma frecuencia ω_0 . El estado inicial donde se encuentra el modo localizado, puede obtenerse con un operador de creación \hat{a}_0^{\dagger} actuando en el estado de vacío $|vac\rangle$, es decir,

$$|ini\rangle = \hat{a}_0^{\dagger} |vac\rangle. \tag{4.38}$$

El estado final que corresponde a la descripción de un modo libre que se propaga en estructura periódica, puede escribirse como

$$|fin\rangle = \hat{a}^{\dagger}_{\nu}|vac\rangle. \tag{4.39}$$

Para calcular el tiempo de vida del modo localizado en el defecto, requerimos determinar la probabilidad de transición desde el estado inicial $|ini\rangle$ a estados del espectro continuo. Desarrollando el producto $\hat{\mathbf{E}} \cdot \hat{\mathbf{E}}$, el elemento de perturbación entre estos estados da como resultado

$$\langle fin| \left(-\frac{1}{8\pi} \int d^3 \mathbf{r} \,\delta\varepsilon(\mathbf{r}) \hat{\mathbf{E}} \cdot \hat{\mathbf{E}} \right) |ini\rangle = \frac{\hbar\omega_0}{2} \int d^3 \mathbf{r} \,\delta\varepsilon(\mathbf{r}) \,\mathbf{E}_0 \cdot \mathbf{E}_{\nu}^*, \tag{4.40}$$

donde \mathbf{E}_0 corresponde al vector de campo eléctrico del modo localizado en el defecto, y \mathbf{E}_v corresponde al campo eléctrico de un modo extendido. Promediando el valor absoluto cuadrado del elemento matricial de perturbación se obtiene

$$|\langle fin|\hat{V}|ini\rangle|_{\rm av}^2 = \left(\frac{\hbar\omega_0}{2}\right)^2 \iint d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \langle \delta\varepsilon(\mathbf{r})\delta\varepsilon(\mathbf{r}')\rangle \left(\mathbf{E}_0(\mathbf{r})\cdot\mathbf{E}_{\nu}^*(\mathbf{r})\right) \left(\mathbf{E}_0^*(\mathbf{r}')\cdot\mathbf{E}_{\nu}(\mathbf{r}')\right),\tag{4.41}$$

donde $\langle \delta \varepsilon(\mathbf{r}) \delta \varepsilon(\mathbf{r}') \rangle$ es la función de correlación de las fluctuaciones, que se obtiene del modelo de desorden del *Si-por* analizado en la sección anterior. Para el cálculo de integrales en la ecuación (4.41) no es necesario tomar en cuenta la forma específica de la caida de correlador del $\delta \varepsilon(\mathbf{r})$ m, porque las valores $a_{\perp} \ge a_{\parallel}$ son mucho menores que las longitudas de ondas. Por lo tanto, se puede escribir la función de correlación como

$$\langle \delta \varepsilon(\mathbf{r}) \delta \varepsilon(\mathbf{r}') \rangle = \langle (\delta \varepsilon)^2 \rangle_V \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'),$$
 (4.42)

donde $\langle (\delta \varepsilon)^2 \rangle_V$ está dado por la ecuación (4.34). La ecuación (4.41) se convierte entonces en

$$|\langle fin|\hat{V}|ini\rangle|_{\rm av}^2 = \left(\frac{\hbar\omega_0}{2}\right)^2 \langle (\delta\varepsilon)^2 \rangle_V \int d\mathbf{r} \left| \mathbf{E}_0(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{E}_\nu^*(\mathbf{r}) \right|^2, \tag{4.43}$$

Es posible ahora, determinar el tiempo de dispersion τ del modo localizado usando la regla de oro de Fermi

$$\frac{1}{\tau} = \Gamma_R = \frac{2\pi}{\hbar^2} \sum_{\nu} \left| \langle fin | \hat{V} | ini \rangle \right|_{\rm av}^2 \delta(\omega_{\nu} - \omega_0). \tag{4.44}$$



Figura 4.10: Densidad de estados para una estructura periódica de periodo Λ , capas alternantes de constantes dieléctricas $\epsilon_a = 3.61$ y $\epsilon_b = 1.69$, y anchos 0.4 Λ y 0.6 Λ , respectivamente.

En el caso cuando los espejos de Bragg están hechos de medios con pequeña diferencia entre las constantes dieléctricas efectivas, se puede considerar aproximadamente a estas multicapas como un medio uniforme que tiene la constante dieléctrica

$$\varepsilon^* = (\varepsilon_a a + \varepsilon_b b)/(a + b). \tag{4.45}$$

Esta aproximación es parecida al método de masa efectiva por los estados electrónicos en un cristal convencional. De la misma manera, se puede escribir el estado localizado que se propaga en muchas periodos de la estructura (ver figura 4.3). En este caso, la tasa de dispersión queda muy parecida a la tasa que se obtiene con ondas planas

$$\frac{1}{\tau} = \Gamma_R = \frac{\pi}{6} \frac{\langle (\delta \varepsilon)^2 \rangle_V \, \omega_0^2}{\varepsilon^{*2}} D(\omega_0), \tag{4.46}$$

donde $D(\omega_0)$ es la densidad de estados en el espejo de Bragg. Esta densidad de estados puede obtenerse de las relaciones de dispersión (2.54) y (2.55). En la figura 4.10 la línea de mayor espesor muestra la densidad de estados para una estructura periódica de periodo Λ , capas alternantes de constantes dieléctricas $\epsilon_a = 3.61$ y $\epsilon_b = 1.69$, y anchos 0.4Λ y 0.6Λ , respectivamente. Esta densidad de estados presenta cambios pronunciados en los bordes de la brecha fótonica, los cuales se han representado por dos líneas verticales. La parábola superpuesta con una línea de menor espesor, corresponde a una densidad de estados en un medio uniforme de constante dieléctrica ε^* dada por la ecuación (4.45). A parte de la región de la pseudobrecha, la parábola reproduce bien la densidad de estados para la estructra periódica, y en el caso $|\varepsilon_a - \varepsilon_b| \ll \varepsilon_{a,b}$ tampoco se observan grandes discrepancias en la brecha.

Usando la ecuaciones (4.34) y (4.46) es posible estimar los valores típicos de los tamaños a_{\perp} y a_{\parallel} de los alambres de *Si-c*. Para esta estimación se supone que todas

Dispersión de Rayleigh en silicio poroso

las pérdidas son debidas a la dispersión de Rayleigh (i.e., ignoramos posible absorción de luz). Se obtiene que el valor experimental del tiempo de vida se reproduce con a_{\perp} alrededor de 6 - 7 nm y a_{\parallel} alrededor de 130 nm. Aquí tomamos en cuenta que en una estructura de silicio poroso $a_{\parallel}/a_{\perp} \approx 20$ [39]. Estos valores son realistas e indican que la dispersión de Rayleigh sí juega un papel importante en las propiedades ópticas del silicio poroso. Los tamaños típicos de los alambres de *Si-c* pueden ser menores a los presentados si tomamos en cuenta la absorción de luz. Desafortunadamente, los experimentos presentados no permiten distingir las contribuciones de la dispersión de Rayleigh y la absorción de luz en las pérdidas observadas. Para tener la posibilidad de separar estas contribuciones, es necesario llevar a cabo mediciones de la transmitancia de las estructuras con diferentes valores de la frecuencia resonante ω_0 .

ESTA TESIS NO SALE DE LA BIBLIOTECA

Conclusiones

El trabajo presentado nos permite obtener las siguientes conclusiones sobre las estructuras de multicapas de silicio poroso y sus propiedades ópticas.

- Las propiedades estructurales de las multicapas de Si-por preparados en el Centro de Investigación en Energía, UNAM, son de alta calidad. Las fluctuaciones de las espesores de las capas son pequeñas, como se puede ver de la relativamente bajo ensanchamiento no-homogéneo de los picos de transmisión.
- Sin embargo, la teoría que trata de reproducir los espectros de transmisión y reflexión considerando las multicapas de Si-por como un sistema de capas dieléctricas perfectas (la teoría del método de matriz de transferencia) falla. La discrepancia principal entre los datos experimentales y dicha teoría es que experimentalmente se observan espectros mucho más suaves, con picos reducidos o desaparecidos por completo.
- La razón de esta discrepancia es el desorden microscópico naturalmente presente en el *Si-por*, como en un material que consiste de un conjunto de puntos y alambres nanométricos del *Si-c*. Debido a este desorden aparecen pérdidas por la dispersión de Rayleigh de las ondas electromagnéticas.
- Los experimentos sobre las propiedades ópticas de las multicapas de Si-por con una microcavidad adentro de los espejos de diferente tamaño y su comparación con la teoría de tipo de Breit-Wigner modificada con la presencia de pérdidas, confirmaron la existencia de dispersión de Rayleigh en el Si-por.
- La dispersión de Rayleigh produce un tiempo de vida finito del modo de luz localizado en la microcavidad, con valores realistas para los tamaños de los alambres de Si cristalino que constituyen el silicio poroso.

Bibliografía

- C. Pickering, M. J. Beatle, J. D. Robbins, P. J. Pearson y R. Greef, J. Appl. Phys., 17, 6535 (1984).
- [2] L. T. Canham, Appl. Phys. Lett., 57, 1046 (1990).
- [3] G. Amato, G. di Francia y P. Menne, Pour la Science, 216, 70 (1995).
- [4] O. Bisi, S. Ossicini, L. Pavesi, Surf. Sci. Rep., 264, 1-126 (2000).
- [5] A. G. Cullis, L.T. Canham y D. J. Calcott, J. Appl. Phys., 82, 909 (1997).
- [6] L. Pavesi, La revista del Nuevo Cimento, 20, 18 (1997).
- [7] L. Pavesi, L. Dal Negro, C. Mazzoleni, G. Franzo, F. Priolo Nature, 408, 440-444 (2000).
- [8] V. Agarwal, J. A. del Río. Appl. Phys. Lett., 82, 1512 (2003).
- [9] A.Uhlir, Bell. Syst. Tech. J., 35, (1956).
- [10] J. Von Behren, K. B. Ucer, L. Tsybeskov, Ju V. Vandyshev, P.M. Fauchet, J. Vac. Sci., 13, 1225 (1995).
- [11] S. Setzu, G. Lerondel, R. Romestain. J. Appl. Phys., 84, 3129 (1997).
- [12] V. Lehmann y U. Gösele. Appl. Phys. Lett., 60, 856 (1991).
- [13] H. Föll, Appl. Phys., 53, 8 (1991).
- [14] G. Bomchil, Halimaoui, A Sagnes, I. Badoz, P. A., Berbezier I., Perret P., LamberB., Vincent G., Garchery L. and Regolini. App. Surf. Sci., 65, 394 (1994).
- [15] D. Buttard, G. Dolino, D. Bellet, T. Baumbach, F. Rietord, Solid State Comm., 109, 1 (1999).
- [16] O. Bisi, Stefano Ossicini, L Pavesi. Surface Science Report, 38, 1-126 (2000).

- [17] V. Lehmann y U. Gösele. Appl. Phys. Lett., 60, 639 (1992).
- [18] X. G. Zhang. J. Electrochem. Soc., 134, 645 (1987).
- [19] R. L. Smith, and S. D. Collins J. Appl. Phys., 71, R1 (1992).
- [20] R. Nava, V. Agarwal, J.A. del Río, C. Wang Journal of Non-Crystalline Solids, 329, 140 (2003).
- [21] V. Agarwal et al., Phys. Rev. Lett., 92, 9401 (2004).
- [22] Photonic Crystals: Molding the flow of light, by John D. Joannopoulos, Robert D. Meade, Joshua N. Winn, Princenton University Press, 1995.
- [23] S. Frohnhoff and M. G. Berger, Adv. Mater., 12, 963 (1994).
- [24] M. G. Berger, C Dieker, M. Thonissen, H. Munder, H. Luth, J. Phys. D: Appl. Phys., 27, 1333 (1994).
- [25] M. G. Berger, M. Thonissen, R. Arens-Fischer, H. Munder, H. Luth, M. Arntzen, W. Theiss, *Thin Silid Films*, 297, 237 (1997).
- [26] C. Mazzoleni, L. Pavesi, Appl. Phys. Lett, 67, 2983 (1995).
- [27] A. Lonni, L. T. Canham, M. G. Berger, R. Arens-Fischer, H. Munder, H. Luth, H. F. Arrand, T. M. Benson, *Thin Silid Films*, 276, 143 (1996).
- [28] V. Pellegrini and A. Tredicucci, C. Mazzoleni, L. Pavesi, *Phys. Rev. B*, 52, 328 (1995).
- [29] Pochi Yeh, Optical waves in Layered Media, (John Wiley and Sons, Inc., 1988)
- [30] Eunene Hecht, (Optics, Second ed., Addison-Wesley Company, Inc., 1988)
- [31] G. Vincent, Appl. Phys. Lett., 64, 2367 (1994).
- [32] G. Breit and E. Wigner, *Phys. Rev.*, 49, 519 (1936).
- [33] A. Douglas Stone, P. A. Lee, *Phys. Rev. Lett.*, 54, 1196 (1985).
- [34] L. I. Glazman and R. I. Shekhter, Zh. Eksp. Teor. Fiz., 94, 292 (1988) [Sov. Phys. JETP 67, 163 (1988)]
- [35] Yu. G. Rubo, Zh. Eksp. Teor. Fiz., 104, 3536 (1993) [JETP 77, 685 (1993)]
- [36] R. P Feynman, A. R. Hibbs, (Quantum Mechanics and Path Integrals, McGraw-Hill, USA 1965), p. 170

- [37] L. D. Landau, E. M. Lifshitz, (Electrodynamics of Continuos Media, 2nd ed., Pergamon Press, Oxford, 1984), p. 425
- [38] Kazuaki Sakoda, (Optical properties of Photonic Crystals, 1rd ed., Germany 2001), p. 202
- [39] J. Antonio del Río, comunicación privada.