



BENEMÉRITA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE PUEBLA

INSTITUTO DE FÍSICA "LUIS RIVERA TERRAZAS"

**"PROPIEDADES ÓPTICAS DE MULTICAPAS DE
SILICIO POROSO: ESCALERAS DE WANNIER-
STARK Y OSCILACIONES DE BLOCH"**

TESIS

QUE PARA OBTENER EL GRADO DE
DOCTOR EN CIENCIAS
(EN LA ESPECIALIDAD DE CIENCIA DE
MATERIALES)

PRESENTA:
JOSÉ OCTAVIO ESTEVEZ ESPINOZA

ASESOR(ES):
DR. JESÚS ARRIAGA RODRÍGUEZ
DRA. VIVECHANA AGARWAL

FEBRERO DE 2014

Resumen

En este trabajo de tesis se muestran resultados teóricos y la evidencia experimental de las escaleras de Wannier-Stark (EWS), oscilaciones de Bloch (OB) y tunelamiento Zener (TZ) para fotones en superredes dieléctricas fabricadas a base de silicio poroso (SP). Con el fin de observar las escaleras de Wannier-Stark (EWS) y consecuentemente las oscilaciones de Bloch fotónicas (OBF), se consideró un gradiente lineal (Estructuras doblemente periódicas) y no lineal (estructuras simples) en el espesor óptico de las capas que componen el sistema. Usando el método de la matriz de transferencia, se calculó la respuesta óptica de las estructuras de multicapas, tal como la estructura de bandas, reflectividad, transmitancia, intensidad del campo eléctrico dentro de las estructuras y la reflectancia e intensidad del campo eléctrico en resolución temporal de un pulso gaussiano que incide sobre la estructura y así poder observar las oscilaciones de Bloch o tunelamiento Zener. Dependiendo de los parámetros estructurales, es posible diseñar los sistemas fotónicos en la región visible e infrarroja del espectro electromagnético, dando como resultado la modulación de la radiación en el rango de los terahertz.

Abstract

In this thesis we show theoretical results and the experimental evidence of the photonic Wannier-Stark ladders (WSL), Bloch oscillations (BO) and Zener tunneling (ZT) that occurs in dielectric superlattices based on porous silicon (PS). In order to observe the Wannier-Stark ladders (WSL) and consequently the photonic Bloch oscillations (PBO), we considered a lineal gradient (structure dual-periodic) and a non-lineal gradient (simple structure) in the optical thickness of the layers that conform the system. Using the transfer matrix method, the optical response of the multilayered structures was calculated, i.e., the band structure, reflectivity, transmittance, electric field intensity inside of structures, and time-resolved reflectance and electric field intensity, in order to observe the Bloch oscillations or Zener tunneling. In function of the structural parameters, it is possible to design photonic systems in the visible and infrared region of the electromagnetic spectrum, resulting in the modulation of the radiation in the terahertz range.

Participación en eventos

1. PHOTONIC ZENER TUNNELING IN ONE-DIMENSIONAL DUAL-PERIODICAL MULTILAYERS STRUCTURES BASED ON POROUS SILICON, J. O. Estevez, 4to Mexican Workshop on Nanostructured Materials, BUAP, Puebla, México (2013).
2. DEMONSTRATION OF PHOTON BLOCH OSCILLATIONS AND WANNIER-STARK LADDERS IN DUALPERIODICAL MULTILAYER BASED ON POROUS SILICON. J. Octavio Estevez, J. Arriaga, A. Méndez-Blas, E. Reyes-Ayona, J. Escorcía, V. Agarwal, PSST-2012, Malaga, Spain (2012).
3. DUAL PERIODIC STRUCTURES BASED ON POROUS SILICON FOR OPTICAL BIOSENSING APPLICATIONS, K. S. Pérez-Aguilar, J. O. Estevez, A. Méndez-Blas, G. Palestino, 22nd General Congress of the International Commission for Optics (ICO).
4. HETERO ESTRUCTURAS DE SILICIO POROSO: EVALUACIÓN DE LA SENSIBILIDAD ÓPTICA DE MOLÉCULAS, K. S. Pérez-Aguilar, J. O. Estevez, G. Palestino, A. Méndez-Blas, J. Arriaga, 5to taller de Física de la Materia Condensada y Molecular, UAEM, Cuernavaca Morelos, (2012).
5. ESTUDIO DE LAS PROPIEDADES ÓPTICAS DE ESPEJOS OMNIDIRECCIONALES DE SILICIO POROSO PARA APLICACIONES COMO REFLECTORES LASER, J. O. Estevez, K. S. Pérez, J. Arriaga, A. Méndez-Blas, D. Mayorga y V. Agarwal, 5to taller de Física de la Materia Condensada y Molecular, UAEM, Cuernavaca Morelos, (2012).
6. RESONANCIAS DE WANNIER-STARK Y OSCILACIONES DE BLOCH EN ESTRUCTURAS DIELECTRICAS DE SILICIO POROSO, J. O. Estevez, Primer taller de propiedades eléctricas, ópticas y magnéticas de Materiales, Universidad Autónoma de Zacatecas, Zacatecas, México, (2011).

-
7. OPTICAL BIOSENSORS BASED ON POROUS SILICON DUAL PERIODICAL STRUCTURES, K. S. Pérez, J.O. Estevez, A. Méndez-Blas, NANOTECH 8, Tuxtla Gutierrez, Chis., México, (2011).
 8. SELF-SIMILAR OPTICAL PROPERTIES IN POROUS SILICON DIELECTRIC MULTILAYERS, J. O. Estevez, J. Arriaga, A. Méndez-Blas, NANOTECH 8, Tuxtla Gutierrez, Chis., México, (2011).
 9. WANNIER-STARK LADDERS IN POROUS SILICON OPTICAL SUPERLATTICES, J. O. Estevez, J. Arriaga, A. Méndez-Blas, G. Monsivais, International Conference on Surfaces, Materials and Vacuum 2010, Playa del Carmen, Qro. México, Septiembre (2010).
 10. WANNIER-STARK LADDERS IN ONE DIMENSIONAL PHOTONIC CRYSTALS BASED ON POROUS SILICON, J. Arriaga, J. O. Estevez, G. Monsivais, 16th International Conference on Superlattices, Nanostructures and Nanodevices, Beijing, China, Agosto (2010).
 11. SENSITIVITY OF OPTICAL BIOSENSORS BASED ON POROUS SILICON STRUCTURES WITH REFRACTIVE INDEX GRADIENT, Pérez-Aguilar Karina S., Estevez Espinoza J. Octavio, Méndez-Blas Antonio, Arriaga-Rodríguez Jesús, NANO-BIO, Puerto Rico (2010).
 12. ANALYSIS OF THE SENSITIVITY OF POROUS SILICON PHOTONIC STRUCTURES WITH POROSITY GRADIENT, J.O. Estevez, J. Arriaga, A. Méndez-Blas, V. Agarwal; International Topical Meeting on Nanostructured Materials and nanotechnology, León Gto, México, Abril (2010).
 13. ESCALERAS DE STARK BASADAS EN MULTICAPAS DE SILICIO POROSO, J. O. Estevez, J. Arriaga, A. Méndez-Blas, G. Monsivais. LII Congreso Nacional de Física (2009).
 14. TRANSMITANCIA OPTICA DE MULTICAPAS DE SILICIO POROSO CREADAS CON UN PATRON DE MUSICA AUTOSIMILAR, J. O. Estevez, LII Congreso Nacional de Física (2009).

-
15. CARACTERIZACION DE MUESTRAS DE SILICIO POROSO EMPLEANDO ESPECTROSCOPIA FOTOACUSTICA, LII Congreso Nacional de Física (2009).
 16. CRISTALES FOTONICOS OMNIDIRECCIONALES 1D CON CAPAS DE ESPESOR CONSTANTE A BASE DE SILICO POROSO, LII Congreso Nacional de Física (2009).
 17. DISEÑO DE UN FILTRO PARA FOTOLUMINISCENCIA A BASE DE SILICIO POROSO, LII Congreso Nacional de Física (2009).
 18. ESTUDIO TEÓRICO-EXPERIMENTAL DE LA ABSORCIÓN EN MULTICAPAS DE SILICIO POROSO, 29 Annual Meeting International Conference on Surfaces, Materials and Vacuum (2009).
 19. ESTUDIO DEL DEFECTO DE CAPA EN CRISTALES FOTÓNICOS 1D BASADOS EN MULTICAPAS DE SILICIO POROSO, VI encuentro Participación de la mujer en la ciencia (2009).
 20. CARACTERIZACION POR GRAVIMETRIA DE SILICIO POROSO TIPO-n PARA APLICACIONES EN DISPOSITIVOS OPTICOS, VI encuentro Participación de la mujer en la ciencia (2009).

Artículos de investigación

1. K. S. Pérez Aguilar, J. O. Estevez, A. Méndez Blas, E. Sánchez Mora, CARACTERIZACIÓN POR GRAVIMETRÍA DE SILICIO POROSO TIPO-n PARA APLICACIONES EN DISPOSITIVOS ÓPTICOS, VI ENCUESTRO PARTICIPACIÓN DE LA MUJER EN LA CIENCIA, ISBN: 978-607-95228-0-3, (2009).
K. Pérez, J. O. Estevez, A. Méndez-Blas, and J. Arriaga, LOCALIZED DEFECT MODES IN DUAL-PERIODICAL MULTILAYERS STRUCTURES BASED ON POROUS SILICON, *J. Opt. Soc. Am. B* 29, No. 4 (2012).
2. J. O. Estevez, J. Arriaga, A. Méndez Blas, M. G. Robles-Cháirez and D. A. Contreras-Solorio, EXPERIMENTAL REALIZATION OF THE POROUS SILICON OPTICAL MULTILAYERS BASED ON THE 1-S SEQUENCE, *J. Appl. Phys.* 111, 013103, (2012).
3. J. O. Estevez, J. Arriaga, A Mendez-Blas, E. Reyes-Ayona, J. Escorcía, and V. Agarwal, DEMONSTRATION OF PHOTON BLOCH OSCILLATIONS AND WANNIER-STARK LADDERS IN DUALPERIODICAL MULTILAYER STRUCTURES BASED ON POROUS SILICON. *Nanoscale Research Letters*, 7 413 (2012).
4. Karina S. Pérez, J. Octavio Estevez, Antonio Mndez-Blas, J. Arriaga, Gabriela Palestino and Miguel E. Mora-Ramos. TUNABLE RESONANCE TRANSMISSION MODES IN HYBRID HETEROSTRUCTURES BASED ON POROUS SILICON. *Nanoscale Research Letters*, 7 392 (2012).
5. J. O. Estevez, J. Arriaga, A Mendez-Blas, V. Agarwal, ESPEJOS OMNIDIRECCIONALES BASADOS EN MULTICAPAS DE SILICIO POROSO, *Temas actuales de la Física y de la ciencia de materiales*, Primera edición (2013), ISBN: 976-607-487-534-8.
6. J. O. Estevez, J. Arriaga, E. Reyes-Ayona, and V. Agarwa, PHOTONIC BLOCH OSCILLATIONS AND ZENER TUNNELING IN DUAL PERIODICAL MULTILAYERS MADE OF POROUS SILICON: EFFECT OF ANGLE

OF INCIDENCE, (In press, JOURNAL OF NANO RESEARCH, ISSN: 1661-9897).

7. J. O. Estevez and V. Agarwal, PHOTONIC CRYSTALS, (Articulo enviado a (Springer) para el Handbook sobre materiales porosos que edita L. T. Canham).
8. J. O. Estevez, J. Arriaga, E. Reyes-Ayona, and V. Agarwal, PHOTONIC ZENER TUNNELING IN ONE DIMENSIONAL DUAL-PERIODICAL MULTILAYER STRUCTURES, (enviado a J. Phys. D).

Contenido

Resumen	i
Contenido	viii
Introducción	1
1 Antecedentes	7
1.1 Generalidades	7
1.2 Cristales fotónicos fabricados con SP	12
1.3 Estructuras con banda prohibida fotónica a base de silicio poroso	15
1.3.1 Monocapas y multicapas 1D basadas en SP	16
1.4 Aplicaciones de estructuras 1D basadas en SP	18
1.4.1 Heteroestructuras híbridas	18
2 Obtención del silicio poroso	23
2.1 Silicio cristalino	23
2.2 Proceso de formación del silicio poroso	23
2.3 Celda usada para la anodización electroquímica	25
2.4 Mecanismos de anodización electroquímica	26
2.5 Química de formación del SP	27
2.6 Formación del poro	30
2.7 Características principales del SP	31
2.8 Parámetros de anodización	33
2.8.1 Dopaje del sustrato	34
2.8.2 Resistividad	34

2.8.3	Densidad de corriente	34
2.8.4	Tiempo de ataque electroquímico	35
2.8.5	Electrolito	35
2.9	Propiedades del SP	37
2.9.1	Propiedades químicas	37
2.9.2	Propiedades eléctricas	38
2.9.3	Propiedades ópticas	39
2.10	Preparación de las muestras	40
2.10.1	Secado de las muestras	41
2.10.2	Estabilización del SP	42
2.11	Caracterización del SP	43
2.11.1	Porosidad	43
2.11.2	Espesor	44
2.11.3	Índice de refracción	45
2.12	Detalles experimentales	46
2.12.1	Celda electroquímica	46
2.12.2	Características de la celda utilizada	46
2.12.3	Electrodos	47
2.12.4	Fuente de corriente programable	48
2.12.5	Composición del electrolito	49
2.12.6	Caracterización por gravimetría	49
3	Sistemas ordenados	53
3.1	Propagación de la luz en sistemas de multicapas	53
3.1.1	Estructura de bandas fotónica	56
3.2	Propagación de la luz en estructuras simples	59
3.2.1	Espejos omnidireccionales	59
3.3	Método de la matriz de transferencia	62
3.3.1	Respuesta resuelta en el tiempo	66
3.4	Métodos de aproximación del medio efectivo	67

4	Escaleras de Wannier-Stark y oscilaciones de Bloch	69
4.1	Rompiendo la simetría traslacional	69
4.1.1	Fundamento teórico	70
4.1.2	Oscilaciones de Bloch ópticas	74
4.1.3	Sistemas 1D propuestos para observar OB ópticas	75
4.2	Estructuras simples	78
4.2.1	Propagación de la luz en estructuras Simples	79
4.3	Estructuras Doblemente-periódicas DP	81
4.3.1	Propagación de la luz en estructuras DP	83
5	EWS y OB en estructuras Simples	86
5.1	Variación no-lineal en los índices de refracción	86
5.1.1	Filtros que dependen del ángulo de incidencia	91
5.1.2	Escaleras de Wannier-Stark localizadas espacialmente dentro de la estructura	94
6	Escaleras de Wannier-Stark, oscilaciones de Bloch y tunelamiento Zener en estructuras DP	102
6.1	Gradiente lineal en el espesor óptico	102
6.1.1	Rompimiento de la simetría traslacional en estructuras DP	103
6.1.2	Gradiente lineal en los índices de refracción	103
6.1.3	Resultados y discusión	105
6.1.4	Gradiente lineal en los espesores físicos	108
6.1.5	Detalles experimentales	109
6.1.6	Resultados y discusión	110
6.2	Efecto del ángulo de incidencia	116
	Conclusiones	123
	Bibliografía	125
A	Pasos para la fabricación de silicio poroso.	137
A.1	Pasos para la fabricación de silicio poroso	137

Introducción

Una consecuencia asombrosa de la teoría de electrones de Bloch en un cristal perfecto es la concerniente a la localización dinámica de una partícula cargada en presencia de un campo eléctrico uniforme, fenómeno conocido como oscilaciones de Bloch (OB) electrónicas. Las oscilaciones de Bloch fueron predichas por Bloch y Zener desde 1928 [1], y éstas condujeron a varias controversias las cuales permanecieron durante mucho tiempo. Una de ellas fue el hecho de que un campo eléctrico constante produjera una corriente oscilante. La primera confirmación del modelo de Bloch-Zener llegó con la observación de las escaleras de Wannier-Stark (EWS), las cuales aparecen cuando un campo eléctrico estacionario es aplicado a un cristal. Las escaleras de Wannier-Stark son la contraparte, en el espacio de las frecuencias, de las oscilaciones de Bloch electrónicas [2]. Las EWS aparecen como una serie de niveles de energía separados por un valor constante en la estructura de bandas electrónica. Un electrón en un cristal experimenta OB electrónicas si el tiempo de desfaseamiento es más grande que el tiempo de oscilación $\tau = h/eEd$, donde h es la constante de Planck, e la carga electrónica, E es el campo eléctrico aplicado y d es el periodo de la red. El periodo de oscilación es inversamente proporcional al periodo d del potencial. En un sólido natural d es muy pequeño por lo que el periodo τ es muy grande y, por tanto, el electrón pierde su coherencia antes de poder completar un ciclo (el tiempo en el cual el electrón sufre un proceso de *scattering* es menor que el periodo del campo E externo). Por otra parte, cuando se incrementa E , el periodo de las oscilaciones decrece facilitando la detección de las OB electrónicas. Sin embargo, no se puede aplicar un campo eléctrico constante intenso debido a que ocurre el denominado tunelamiento Zener entre las bandas adyacentes del cristal (o las minibandas de las superredes). Debido a que las superredes semiconductoras presentan una celda unitaria más grande que la de un cristal natural, resulta una pequeña oscilación de Bloch en el tiempo, por lo tanto es más fácil observar estas oscilaciones en las superredes que en los semiconductores [3]. El análogo entre un electrón en un cristal real y un fotón en un medio dieléctrico periódico permitió especular sobre las oscilaciones de Bloch fotónicas en estructuras dieléctricas cuasiperiódicas especiales. Debido a que un campo eléctrico no afecta a

los fotones que se propagan en una superred dieléctrica, es necesario introducir un gradiente de “potencial” por otros medios para poder observar las OB fotónicas. En las superredes dieléctricas es más fácil observar las OB fotónicas, ya que el proceso de desfase juega un papel menor que en el caso electrónico [4, 5]. El equivalente óptico de las EWS ha sido discutido teóricamente por Monsivais *et al.* [6] y desde entonces se han propuesto diferentes sistemas fotónicos para observar las OB de ondas de luz [3]. El análogo fotónico al de un cristal bajo un campo eléctrico externo, aparece cuando en un cristal fotónico unidimensional su índice de refracción presenta un incremento a lo largo de la dirección de periodicidad o a una modulación geométrica de sus parámetros en esa misma dirección, resultando en una inclinación lineal de la estructura de bandas. Estos cristales fotónicos denominados “chirped” del *inglés*, dan lugar a un conjunto de niveles de frecuencias equidistantes que son la contraparte óptica de las EWS en superredes de semiconductores. La inclinación de las bandas fotónicas puede ser obtenida por diferentes medios, por ejemplo, en los espejos de Bragg confinados, los gradientes en la estructura de bandas son causados por un cambio gradual del confinamiento lateral [7]; en superredes ópticas de índice graduado, el gradiente proviene de una modificación lineal del índice de refracción de las capas [3, 8], etc. Recientemente se han observado experimentalmente las OB fotónicas en los espectros de transmisión con resolución temporal de superredes fotónicas a base de silicio poroso (SP), donde se usó un gradiente lineal en el espesor óptico para proveer confinamiento longitudinal del paquete de ondas ópticas con la finalidad de inclinar la banda prohibida fotónica (BPF), en analogía directa con el caso electrónico y se ha encontrado que en estas superredes fotónicas el periodo de oscilación depende linealmente del gradiente de espesor óptico [4, 5, 9]. El fenómeno de las oscilaciones de Bloch se extiende a diferentes tipos de sistemas y excitaciones elementales y durante los últimos 15 años se ha demostrado la existencia de EWS y OB en átomos [10, 11], condensados de Bose-Einstein [12], plasmones [13], fotones [3, 5] y sonido [14], proponiendo caminos alternativos para imitar los efectos de los potenciales periódicos bajo campos externos.

El SP es obtenido por anodización electroquímica en una solución de ácido fluorhídrico cuando se le aplica una densidad de corriente (J) y es posible crecer capas

con diferente porosidad, una seguida de la otra, al cambiar las condiciones de anodización sin alterar las características de las capas ya formadas [15], es decir, se pueden construir estructuras multicapas de SP con este método. El SP provee una alta flexibilidad en la realización de varios dispositivos ópticos debido a su estructura porosa (área superficial específica $> 200 \text{ m}^2/\text{cm}^3$) y sus propiedades ópticas sintonizables, así como también a su naturaleza biodegradable. Todas las propiedades de este material, tales como la porosidad, espesor, diámetro de poro y morfología, dependen de las condiciones de anodización. Así una variedad de estructuras de SP pueden ser fabricadas, tales como microcavidades, filtros rugate [16], espejos omnidireccionales [17, 18], entre otros [19]. Las superredes fotónicas 1D a base de SP han permitido la demostración de los análogos ópticos de los fenómenos clásicos electrónicos [20], tales como oscilaciones de Bloch fotónicas, tunelamiento Zener, localización de Anderson de ondas de luz [3, 21] y muy recientemente un interruptor óptico de control de vapor [22].

A diferencia de los trabajos realizados con SP para observar las OB fotónicas, donde se mantienen constantes los índices de refracción de la superred dieléctrica, en el presente trabajo de tesis se propone la fabricación de sistemas a base de SP con diferentes perfiles, que son lineales y no lineales en el índice de refracción. Debido al valor del índice de refracción del silicio cristalino, las estructuras que se consideran están limitadas por los valores máximos y mínimos que se obtienen variando la porosidad [17, 18]. Con este tipo de perfiles "simples", se pueden observar las resonancias de Wannier-Stark de forma precisa sin la necesidad de introducir defectos en el sistema como en el caso de microcavidades acopladas. También se puede controlar el periodo de las oscilaciones de Bloch seleccionando adecuadamente los parámetros que describen al sistema "simple". Además, el factor de calidad definido como $Q = \lambda_0/\Delta\lambda$, donde λ_0 es la longitud de onda de la caída de resonancia y $\Delta\lambda$ el ancho de la resonancia a la mitad del punto máximo (FWHM por sus siglas en inglés) tiene un valor más alto que el que presentan las microcavidades (de $\sim 10\text{-}15 \text{ nm}$). Esto se ve reflejado por un modo altamente distinguible en el espectro de reflectividad o transmitancia y un aumento considerable en la intensidad del campo eléctrico.

En el presente trabajo, sólo nos enfocaremos al estudio de estructuras fotónicas en una dimensión. Recientemente se han fabricado este tipo de estructuras periódicas a base de silicio poroso (SP) por medio de anodización electroquímica, debido a que es una técnica barata y sencilla de desarrollar. Se ha establecido que los principales parámetros que fijan las características obtenidas por medio de anodización electroquímica son: el tipo de oblea, la composición del electrolito, la densidad de corriente aplicada, y el tiempo de aplicación de la corriente. Mientras el tiempo determina el espesor de la capa porosa, la corriente determina la porosidad o equivalentemente, el índice de refracción. Debido a que la disolución del silicio solo ocurre en las puntas de los poros, en la interfase entre el sustrato de silicio y el electrolito, la capa de SP ya formada no es afectada por las subsecuentes condiciones de anodización (corriente y espesor de la siguiente capa porosa). Por consiguiente, cualquier tipo de perfil de porosidad, o equivalentemente índice de refracción, puede ser considerado para su fabricación.

En este contexto, esta tesis se enfoca al estudio de sistemas ópticos 1D a base de SP. Para lograr este objetivo, se realizaron diferentes actividades. Primeramente, se desarrolló el estudio teórico de multicapas considerando estructuras periódicas (monocapas, espejos de Bragg, espejos omnidireccionales, microcavidades, sistemas aperiódicos, etc.) donde los índices de refracción y espesores físicos de las capas que conforman las estructuras se mantienen constantes o siguen un perfil en sus índices de refracción. Las simulaciones se llevaron a cabo con el método de la matriz de transferencia considerando las limitaciones permitidas por el SP. Una vez simulada y diseñada la estructura de multicapas de SP, se procedió a su fabricación. Para este propósito se utilizó un sistema de crecimiento electroquímico para SP, el cual se calibró previamente. Finalmente, las multicapas de SP fueron estabilizadas por oxidación térmica y caracterizadas para determinar sus propiedades ópticas. Lo anterior fue necesario para lograr nuestro objetivo principal y final: la fabricación de dos tipos de estructuras donde se ha introducido un gradiente en los espesores ópticos de las capas que conforman la estructura, esto es, donde se rompe la simetría traslacional y donde es posible observar las escaleras de Wannier-Stark, las oscilaciones de Bloch y el tunelamiento Zener.

La presente tesis está organizada de la siguiente manera: En el capítulo 1 se explican algunos de los conceptos más importantes para describir a los cristales fotónicos. Se menciona el interés que han generado los CFs y sus amplias y novedosas aplicaciones cuando estos se fabrican a base de silicio poroso en 1D, 2D y 3D. En el capítulo 2 se detalla el proceso de fabricación del silicio poroso por el método de anodización electroquímica, en donde se exponen los parámetros principales que involucran la obtención de las capas porosas. También se detallan algunas técnicas para la caracterización de dichas capas porosas. En el capítulo 3 se describe la metodología empleada para simular las propiedades ópticas de las estructuras. Todos los cálculos mostrados en este trabajo se desarrollaron usando el método de la matriz de transferencia, el cual nos permite calcular la estructura de bandas, la reflectividad, la transmitancia, la distribución del campo eléctrico a través de toda la estructura, así como también la reflectancia resuelta en el tiempo. En el capítulo 4 se mencionan los principales conceptos físicos que describen a las EWS y OB electrónicas. Además de esto, se presentan algunos ejemplos de sistemas dieléctricos donde se pueden observar las EWS y las OB para fotones. También, se mencionan las principales características que describen a las estructuras, esto es, las estructuras que denotamos como "simples" y las estructuras que denotamos como doblemente-periódicas (DP), las cuales analizamos ampliamente. En el capítulo 5 se analizan y discuten los resultados obtenidos para el primer tipo de estructuras "simples", donde se presentan espectros de reflectancia, mapas de estados dispersivos donde se observan las EWS, y algunos cálculos de reflectancia resuelta en el tiempo donde se manifiestan las OB. En el capítulo 6 se analizan y discuten los resultados obtenidos para el segundo tipo de estructuras "DP", donde se presentan espectros de reflectancia, mapas de estados dispersivos donde se observan las minibandas y bandas prohibidas, las EWS y el TZ, así como también los gráficos de reflectancia y de la intensidad del campo eléctrico resueltos en el tiempo, donde es posible observar OBF y TZ cuando un pulso gaussiano incide sobre la estructura. Además, se presenta un análisis de la influencia del ángulo de incidencia de la luz en las estructuras. También se muestran algunas imágenes de microscopía electrónica de barrido de alta resolución (HRSEM), principalmente de las estructuras DP fabricadas, donde se muestra la morfología y la calidad de las multicapas generadas. Finalmente se presentan las conclusiones y

Introducción

perspectivas a futuro de este trabajo.

Capítulo 1

Antecedentes

1.1 Generalidades

Es bien sabido que los sólidos cristalinos que se caracterizan por presentar periodicidad atómica impiden la propagación de los electrones con energías situadas en la llamada brecha de energía prohibida [23]. La existencia de dichas bandas de energía permitidas y brechas de energía prohibidas determinan muchas de las propiedades de los materiales semiconductores [24]. Debido a la analogía que existe entre los cristales semiconductores y los llamados cristales fotónicos (arreglos periódicos de materiales dieléctricos), Yablonovitch propuso inhibir la propagación de la luz en materiales dieléctricos [25], mientras que Sajeev John lo hizo al estudiar la localización fuerte de fotones en superredes dieléctricas desordenadas [26]. En el CF, el “potencial” periódico es debido a una red de medios dieléctricos macroscópicos en lugar de átomos. Si las constantes dieléctricas de los materiales en el cristal son muy diferentes y la absorción de la luz por el material es mínima, entonces las dispersiones en las interfaces pueden producir muchos de los fenómenos para los fotones (modos de luz) como el potencial atómico lo hace para los electrones. Una solución al problema de manipulación y control óptico es por consiguiente un cristal fotónico, un medio periódico dieléctrico con baja absorción. En particular, podemos diseñar y construir CFs con bandas prohibidas fotónicas impidiendo que la luz se propague en

ciertas direcciones con frecuencias específicas. Los cristales fotónicos no solo pueden imitar las propiedades de las guías de ondas y cavidades, sino que también pueden ser escalables y aplicables a un amplio rango de frecuencias. Podemos construir un CF de una geometría dada con dimensiones de milímetros para control de microondas o con dimensiones de micras para el control en el infrarrojo. El cristal fotónico más simple es un espejo dieléctrico (arreglo de cuarto de onda) de capas alternantes de diferentes materiales dieléctricos. La luz con longitud de onda apropiada, cuando incide sobre tal material periódico, es completamente reflejada. La razón es que la onda de luz es dispersada en las interfases de las capas y si el espaciamiento es el correcto, las múltiples dispersiones de las ondas interfieren destructivamente dentro del material. Los CFs son materiales ópticos que poseen características que no se encuentran en los materiales convencionales. Son candidatos prometedores para realizar todas las funciones ópticas de circuitos ópticos integrados o componentes de fibras ópticas. A diferencia de los cristales naturales o cristales semiconductores, los CFs son estructuras periódicas artificiales, aunque existen algunos ejemplos en la naturaleza [27, 28]. Este tipo de arreglos periódicos también lo encontramos en la naturaleza. Miles de años en la evolución de algunas especies ha generado este tipo de estructuras en muchos sistemas vivos tales como insectos, mariposas, conchas de abulón y algunas plantas. La figura (1.1) muestra algunas fotos con sus respectivas imágenes TEM (Microscopía Electrónica de Trasmisión) de CFs naturales, donde se mencionan algunos ejemplos que pueden ser desarrollados en una área de la biología llamada "biomimética" (ver tabla 1.1). La mayoría de estas estructuras tienen arreglos periódicos en dos dimensiones como se observa en las imágenes de TEM (figura 1.1) y como se describe en la tabla 1.1. En años recientes surgió un gran interés en el uso de cristales fotónicos como un nuevo material que puede ser usado para el control de ondas electromagnéticas. Varias aplicaciones han sido propuestas y demostradas para CFs unidimensionales, bidimensionales y tridimensionales. Por ejemplo, la localización de la luz en sistemas con defectos fue investigada teórica y experimentalmente [29]. Un ejemplo del desarrollo actual de la tecnología y la investigación en cristales fotónicos es la observación experimental de la densidad local de estados (DLDE) de los modos de Bloch en un CF-2D, usando un microscopio óptico basado en la catodoluminiscencia resuelta en el ángulo, donde junto

con las propiedades del CF, es posible resolver propiedades por debajo de los 30 nm (ver figura (1.3))[30]. La importancia de conocer la DLDE es vital, debido a que es una cantidad fundamental en la interacción radiación-materia, ya que provee una medición directa para la probabilidad de la emisión espontánea y dispersión de la luz. De esta manera, conociendo LDOS en la nanoescala, muchas aplicaciones pueden surgir tales como iluminación, *displays*, manejo de la luz en celdas solares, óptica cuántica y tecnología de la información.

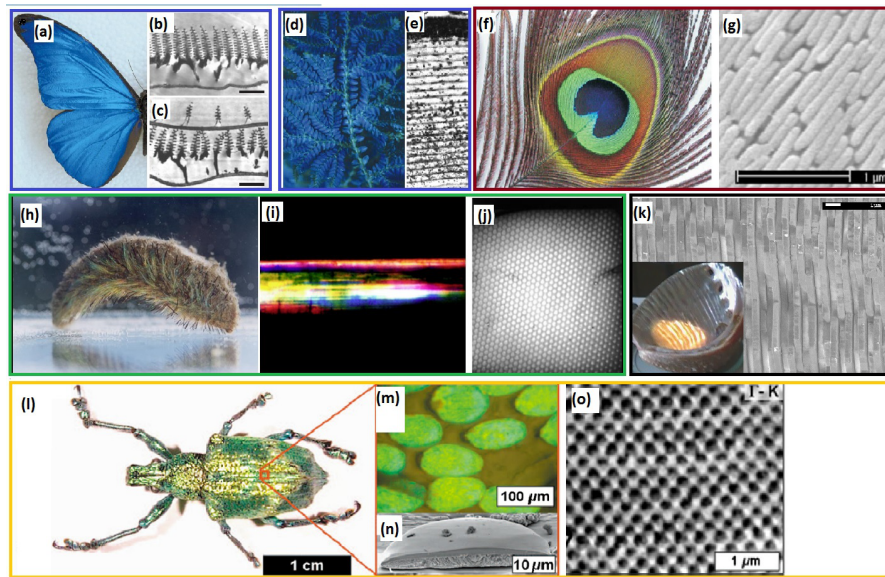


Figura 1.1: Estructuras fotónicas en la naturaleza: (a) Color azul real de ala de una mariposa (*M. rhetenor*). (b) Imagen de TEM de la sección transversal de la ala de mariposa (*M. rhetenor*). (c) Imagen de TEM de la sección transversal de la especie *M. didius*. (d) Iridiscencia azul del helecho tropical de los montes (del genero *Selaginella*). (e) Imagen de TEM de la sección transversal de una hoja joven de la planta *Diplazium Tomentosum*. (f) Iridiscencia de la pluma de un pavo real e (g) imagen de TEM de la misma. (h)-(i) Imagen gusano con arreglos estructurales que reflejan la luz en la región visible, (j) Imagen de TEM de la sección transversal de una de sus púas. (k) Imagen de SEM de la sección transversal de la concha de abulón tomada por nuestro grupo. (l)-(n) Insecto que presenta una estructura fotónica tridimensional (tipo diamante). (o) Imagen de TEM donde se muestra alguna dirección cristalina. Algunas de las Figuras fueron tomadas de [28, 31] y otras adaptadas de la tesis de maestría [32].

Para determinadas combinaciones de los materiales y determinadas geometrías,

Micro estructura óptica	Mecanismos ópticos	→	Efecto óptico	Materiales biomiméticos
Cristales fotónicos	Cristales fotónicos 2D en alas de pájaros	Frecuencias prohibidas via bordes de la banda	Iridiscencia	Fibra de cristal-fotónico
	Cristales fotónicos 2D en alas de mariposas	Luz guiada via bordes de la banda	Extracción de la luz	Superficie de cristal-fotónico en LED
	Cristales fotónicos 3D	Diferente orientación de los dominios en cristales fotónicos 3D	Bandas prohibidas fotónicas acumuladas	Color estructural omnidireccional

Tabla 1.1: Microestructuras en la naturaleza que exhiben efectos ópticos a través de mecanismos electromagnéticos y sus correspondientes materiales ópticos biomiméticos. Adaptado de la referencia[27]

es posible obtener regiones de frecuencia prohibida para la propagación de las ondas electromagnéticas en una, dos y tres dimensiones, correspondientes a la periodicidad del CF (ver figura (1.2)). Muchas de las propiedades de los CFs se deducen a partir de su estructura de bandas, de la misma forma que en los semiconductores se deduce para los electrones [33, 34, 35]. En los CFs, la variación periódica de la constante dieléctrica, debido a la repetición periódica de los materiales, es la que juega el papel equivalente al potencial periódico de los semiconductores. En el caso de los cristales fotónicos bidimensionales, la forma compleja de su estructura de bandas da origen a nuevos e interesantes fenómenos abriendo un campo conocido como óptica cristalina fotónica. Esto ha permitido la fabricación de superprismas y supercolimadores [36, 37]. Un prisma fabricado con un CF es muy sensible a la variación tanto de la dirección de incidencia como de la longitud de onda de la radiación electromagnética, obteniéndose en algunos casos y al aplicar directamente la ley de *Snell*, índices de refracción negativos [38, 39]. La propiedad más importante de los cristales fotónicos es su banda prohibida fotónica, ya que ésta impone fuertes condiciones sobre la propagación de la radiación electromagnética dentro de la estructura. Este tipo de estructuras presentan una alta reflectividad sobre un rango ancho de longitudes de onda, si tanto los índices de refracción como los grosores de las capas constituyentes se seleccionan adecuadamente.

Otras propiedades que presenta los cristales fotónicos son: el aumento local del

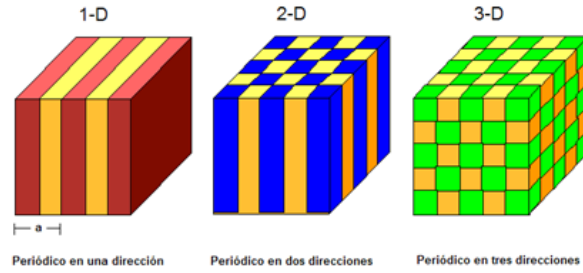


Figura 1.2: Esquema de CFs en una, dos y tres dimensiones. Los colores diferentes representan materiales con diferente constante dieléctrica. Una de las propiedades de un CF es la periodicidad del material a lo largo de uno o más ejes. Figuras tomadas de [40]

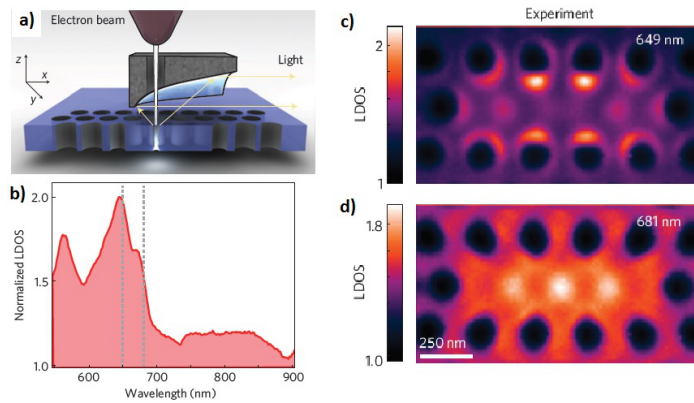


Figura 1.3: (a) Esquema del arreglo experimental para medir la DLDE: un haz de electrones excita localmente el cristal fotónico 2D y la luz emitida es colectada por un espejo parabólico colocado por arriba de la muestra la cual es enviada a un espectrómetro o a un cámara CCD (charge-coupled device). El escaneo del haz de electrones permite un mapeo espacial por debajo de longitudes de ondas más profundas de la DLDE. (b) Medición del espectro de resonancia de la cavidad medido en el centro de la cavidad normalizado con el espectro de una membrana estructurada. Los modos de la cavidad exhiben un incremento de la DLDE de un factor de 2 a la resonancia localizada. (c)-(d) Mapas medidos de la de una cavidad de cristal fotónico L3 (periodo de la red $a=330$ nm, diámetro de los agujeros $d=230$ nm) a la frecuencia de los dos modos de la cavidad, 649 y 681 nm, respectivamente. Figuras adaptadas de [30]

campo, la dispersión anómala de la velocidad de grupo, y la dispersión anómala en el índice de refracción. Se puede construir una amplia variedad de CFs con diferentes materiales dieléctricos [40]. De todos los materiales considerados en la fabricación de este tipo de estructuras, el silicio es el que recientemente ha llamado la atención de los investigadores debido a su potencialidad para utilizarlo en diferentes aplicaciones [18]. Una variación periódica en los índices de refracción se consigue mediante la variación periódica de capas de silicio con diferente porosidad [41, 42, 43]. La porosidad del silicio es una cantidad que puede controlarse con bastante precisión durante el proceso de fabricación por ataque electroquímico [15, 44] permitiendo obtener un amplio rango de índices de refracción (aproximadamente de 1.2 a 2.8). Seleccionando apropiadamente los parámetros, es posible fabricar estructuras fotónicas basadas en SP para formar CFs con periodicidad dieléctrica en una dimensión (1D), dos dimensiones (2D), y tres dimensiones (3D) (ver figuras (1.4)-(1.6)), donde los grosores finales de las estructuras y la localización de las bandas prohibidas fotónicas, pueden ser sintonizadas en diferentes regiones del espectro electromagnético.

1.2 Cristales fotónicos fabricados con SP

Cristales fotónicos 1D: Las superredes fotónicas 1D basadas en SP han permitido la demostración de interesantes fenómenos ópticos análogos al caso electrónico tales como, oscilaciones de Bloch, tunelamiento Zener, localización de Anderson y switch ópticos, etc [3, 5, 21, 22, 45, 46]. Por otra parte, se han fabricado sistemas periódicos [47]-[68], cuasiperiódicos, y aperiódicos [69, 70, 71]. Efectos interesantes tales como refracción negativa han sido reportados cuando se considera luz que se propaga cerca de los bordes de la banda prohibida en multicapas de SP [72, 73].

Cristales fotónicos 2D: Por otro lado, la fabricación de estructuras basadas en SP con una banda prohibida fotónica en 2D requieren de una pre-estructuración de la superficie de silicio antes de realizar el crecimiento por anodización electroquímica. Por ejemplo, se debe de usar litografía por interferometría para definir las redes periódicas (cuadradas o triangulares) donde ocurrirá la formación de los poros sobre

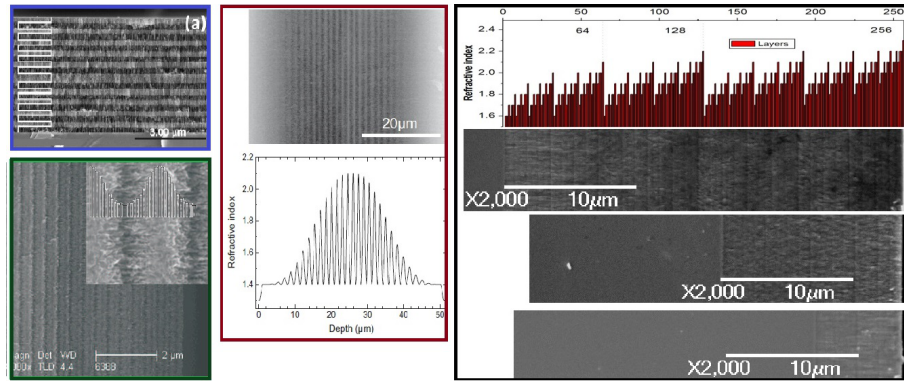


Figura 1.4: Estructuras 1D basadas en SP: Espejos reflejantes (recuadro azul). Espejos omnidireccionales con perfil Gaussiano (recuadro en verde). Filtros rugate (recuadro en rojo). Estructura determinista-aperiódica secuencia 1-s (recuadro en negro). Adaptado de la referencias [17, 61, 71].

la superficie del silicio dopado moderadamente. Las estructuras 2D también pueden ser obtenidas usando una variación del potencial sobre el lado opuesto de la muestra durante la formación de las multicapas. Esta técnica permite una fabricación de filtros distribuidos espacialmente sobre escalas de tamaño milimétrico [74]-[87].

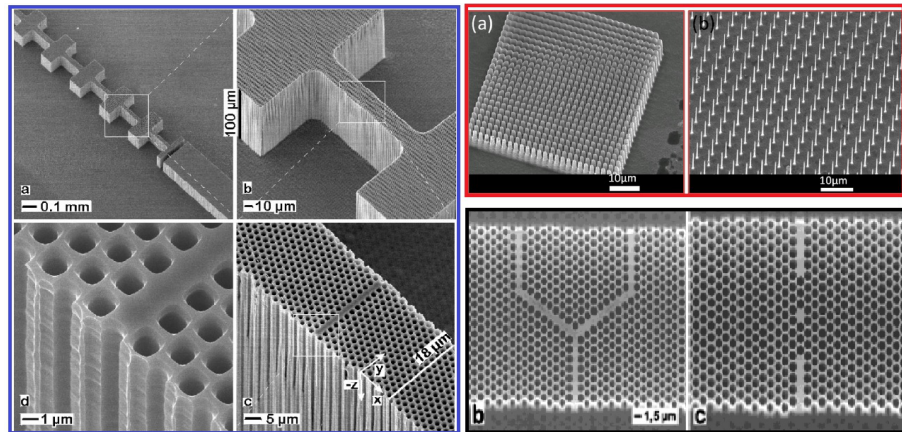


Figura 1.5: Estructuras 2D basadas en SP: Guía de onda que opera en la región del IR (recuadro en azul), adaptado de referencia [83]. Arreglo periódico de agujas (recuadro rojo), adaptado de referencia [78]. guías de onda con defecto puntual (recuadro en negro). Adaptado de la referencia [87].

Cristales fotónicos 3D: Por último, para fabricar estructuras con una banda

prohibida completa en 3D son necesarios materiales con constantes dieléctricas altas en la región visible. Los CFs en 3D son más complicados de fabricar, aunque ya han sido fabricadas diferentes estructuras usando una combinación de diferentes técnicas. También, diferentes sistemas 3D con defectos han sido realizados para la incorporación de materiales con funcionalidades avanzadas [88]-[95].

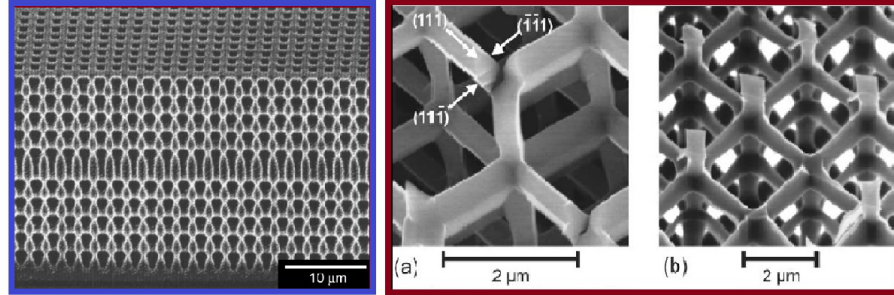


Figura 1.6: Estructuras 3D basadas en SP: Guía de onda (recuadro azul), adaptado de referencia [93]. Estructura con banda prohibida en las tres direcciones (recuadro en rojo), adaptado de referencia [94].

En resumen, los CFs 1D, 2D y 3D presentan varias propiedades ópticas no disponibles en el silicio cristalino y que ya han encontrado muchas aplicaciones tales como espejos de Bragg, microcavidades ópticas de Fabry-Perot, filtros rugate, multicapas corrugadas, y muchos otros dispositivos que son usados particularmente en varios tipos de procesamiento óptico y biosensado. Diferentes aplicaciones muy prometedoras tales como espejos altamente reflejantes para sistemas de concentración solar, reflectores dieléctricos para detectores de imagen en IR, dispositivos de generación del segundo y tercer armónico, birrefringencia alta, composites basados en cristales fotónicos de silicio, dispositivos fotónicos para producir frecuencias moduladas en los terahertz, switches ópticos basados en la condensación capilar, y estructuras con defectos en sistemas 1D, 2D y 3D para la incorporación de materiales con funcionalidades avanzadas que ya han sido realizadas, ampliando el rango de aplicaciones para la tecnología basada en silicio.

1.3 Estructuras con banda prohibida fotónica a base de silicio poroso

En el sentido estricto, un CF-1D es un sistema periódico a lo largo de una cierta dirección e infinitamente extenso en las dos direcciones perpendiculares. Así por ejemplo un CF-1D puede ser un arreglo periódico de capas de cuarto de onda ($\lambda/4$), conocidos durante muchas décadas como espejos dieléctricos o reflectores de Bragg. Su generalización, es decir, arreglos que no son completamente periódicos “*chirped mirrors*” [96], son espejos comercialmente disponibles para aplicaciones en cavidades laser [97]. Un defecto en el arreglo de cuarto de onda conduce al filtro óptico de Fabry-Perot, el cual es también un producto comercial fácilmente disponible. Los espejos de Bragg (en los extremos de la capa activa), en la microcavidad actúan como un confinador de fotones 1D de la luz emitida espontáneamente de la capa activa central. Es en esta capa donde el acoplamiento de las transiciones excitónicas con los modos fotónicos deberían ser modificados (inhibidos o mejorados). El espectro de reflectancia de una microcavidad con un espesor óptico de la capa activa de media longitud de onda es caracterizado por una caída resonante en el ancho de banda. La longitud de onda de resonancia es determinada por $\lambda_c = mn_c d$, donde m es el orden de la resonancia, n_c el índice de refracción de la capa activa y d el espesor. El factor de calidad Q en una microcavidad, definido por $Q = \lambda_0/\Delta\lambda$, donde λ_0 es la longitud de onda del pico resonante y $\Delta\lambda$ el ancho de la resonancia a la mitad del punto máximo (FWHM por sus siglas en inglés), se usa para evaluar la eficiencia de la luz confinada dentro de una estructura de este tipo. El factor Q se incrementa cuando el número de periodos en los espejos de Bragg se incrementa y también cuando el contraste de índices de refracción entre las capas aumenta.

Como ya se ha mencionado anteriormente, un sistema con defecto de capa es ampliamente usado para aplicaciones como biosensor. Además de esto, se puede generar un sistema de microcavidades acopladas, el cual consiste de múltiples microcavidades que son superpuestas periódicamente, dando como resultado la aparición de múltiples minibandas permitidas dentro de una banda prohibida extensa. Cuando en una estructura de microcavidades acopladas se rompe la simetría traslacional,

fenómenos tales como oscilaciones de Bloch y tunelamiento Zener pueden ser observados [3].

1.3.1 Monocapas y multicapas 1D basadas en SP

La posibilidad de formar estructuras con monocapas o multicapas a base de silicio poroso mediante el método de anodización electroquímica es relativamente simple. Para la formación de diferentes capas la influencia de los parámetros de ataque son cruciales, ya que si requerimos de una capa porosa con un determinado tamaño promedio del poro debemos usar una determinada resistividad y un determinado tipo de obleas, así como también una concentración específica de ácido fluorhídrico (HF). Existen básicamente dos tipos de multicapas de SP [98]. En el primer tipo de multicapas, la densidad de corriente se cambia durante la anodización; mientras que en el segundo tipo, el cambio en la porosidad es determinado cambiando el nivel de dopaje de la oblea. El segundo tipo produce interfases afiladas [99]; por esta razón, el primer tipo de multicapas es el más común. Al cambiar la densidad de corriente en el proceso de anodización es posible variar la porosidad y por consiguiente el índice de refracción. La figura (1.7) muestra una representación de estructuras de monocapa y multicapas de SP obtenidas al modificar las densidades de corriente y los tiempos de ataque en el proceso electroquímico.

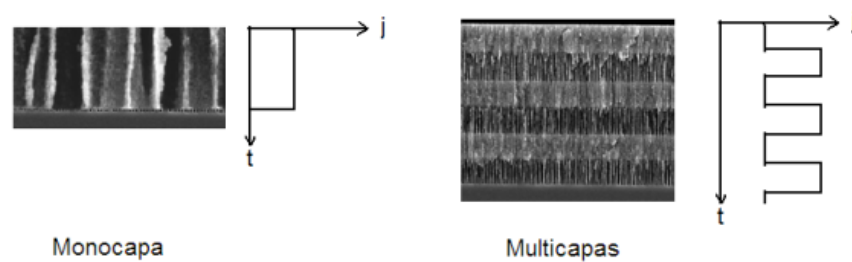


Figura 1.7: Imágenes de microscopía electrónica de barrido (SEM) de la sección transversal de estructuras de monocapa y multicapas de SP. Los tiempos de anodización (t_1, t_2) y las magnitudes de las densidades de corriente (j_1, j_2) aplicadas en el proceso electroquímico corresponden directamente a los espesores y porosidades de las capas de SP que se crecen [98].

En la figura (1.4) se muestra un ejemplo de los diferentes sistemas que pueden ser fabricados con un número variado de capas en una dimensión. En particular se observa la imagen de HRSEM (recuadro en verde) de un sistema que presenta un perfil gaussiano en los índices de refracción y que presentan un rango de omnidireccionalidad en el IR [17]. Además de esto, una secuencia que siguen los índices de refracción de acuerdo a una regla matemática que denominamos secuencia determinista-aperiódica "secuencia 1-s" (recuadro en negro) presenta una respuesta óptica autosimilar [71]. Ambas estructuras han sido fabricadas en nuestro laboratorio.

1.4 Aplicaciones de estructuras 1D basadas en SP

Como ya se ha resaltado, debido a la versatilidad natural que presenta el SP con propiedades únicas e interesantes, hacen de éste un material con un gran potencial en diferentes áreas de aplicación. Por ejemplo, las aplicaciones en optoelectrónica y óptica se basan en la adaptación y manipulación de las propiedades ópticas del SP tales como el índice de refracción. En el caso de las microcavidades, como ya se mencionó anteriormente, es posible infiltrar materiales tales como cristales líquidos para aplicaciones en interconectores ópticos. También se pueden aprovechar los fenómenos de fotoluminiscencia y electroluminiscencia asociados al SP en la fabricación de LEDs, celdas solares, entre otros. Además, como el SP presenta una gran área superficial específica de la capa porosa, se permiten aplicaciones en el sensado químico y biológico (debido a que el SP es compatible biológicamente). También puede ser explotado en un futuro para catálisis química. En la tabla 1.2 se muestran de forma simplificada algunas de las diversas áreas de investigación y de aplicación del SP.

1.4.1 Heteroestructuras híbridas

Las multicapas de SP para aplicaciones como biosensores han llamado mucho la atención principalmente a que el área superficial específica de las capas de SP es muy alta dependiendo de las condiciones de crecimiento y cuando se combina esto a las propiedades ópticas que surgen cuando se diseña una determinada multicapa, resulta en una alta sensibilidad para detectar moléculas. Recientemente, nuestro grupo, desarrolló una heteroestructura híbrida (HH), la cual se forma al acoplar una estructura cuasiperiódica (en este caso un arreglo de multicapas que sigue una secuencia tipo Fibonacci) entre dos estructuras periódicas (espejos de Bragg) (ver figura (1.8))[100]. La secuencia es $(DBR)^N - (FN)^M - (DBR)^N$. Los espejos de Bragg se forman al alternar dos capas (A y B) de diferente índice de refracción y repetirlas periódicamente. La secuencia de Fibonacci se genera a partir de la regla de recursión $F_M = F_{M-1} + F_{M-2}$, donde M representa el orden de la secuencia

($M = 2, 3, 4, \dots$). Las estructuras dieléctricas multicapas que siguen una secuencia matemática de Fibonacci de cualquier orden se pueden generar definiendo $F_0 = C$ y $F_1 = CD$, donde C y D son dos capas diferentes. Por ejemplo $F_2 = CDC$, $F_3 = CDCCD$, $F_4 = CDCDCDC$, etc. Las HHs presentan modos de transmisión fuertemente localizados en función de los parámetros de diseño y pueden ser localizados sobre un amplio rango de frecuencias. El fuerte confinamiento de los campos electromagnéticos dentro de la HHs es una ventaja que presentan este tipo de cristales fotónicos debido a que son altamente dependientes del índice de refracción y el espesor de cada capa que los constituye. Cualquier cambio en estos parámetros se refleja como un cambio en la respuesta óptica. De esta forma es posible lograr un desplazamiento de los modos localizados cuando se induce un ligero cambio en el índice de refracción de alguna capa o de la estructura completa el cual puede ser provocado por la oxidación de la estructura o al introducir alguna sustancia dentro de los poros. Esta característica puede ser explotada especialmente para aplicaciones en el área de biosensado.

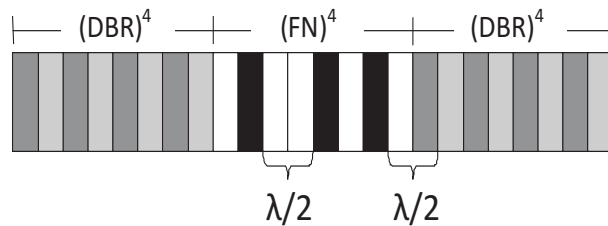


Figura 1.8: Esquema de la Heteroestructura. Los colores de las capas representan índices de refracción diferentes.

Para llevar a cabo este trabajo se diseñó una HH en la región infrarroja del espectro electromagnético. Las HHs se fabricaron usando una solución electrolítica de HF (40%) y etanol (99.98%) en razón volumétrica 1:1. Los parámetros que se consideraron para los espejos de Bragg los cuales están conformados por 4 periodos de capas A y B fueron: $d_A = 178.5$ nm, y $d_B = 100$ nm, con índices de refracción de 1.4 y 2.5 respectivamente. Cabe mencionar que tanto para la estructura periódica como para la cuasiperiódica, el espesor óptico (nd), es igual a $\lambda/4$. Para las capas C y D que forman la subestructura de Fibonacci los espesores fueron $d_C = 156.25$

nm y $d_D = 113.64$ nm con índices de refracción de 1.6 y 2.2 respectivamente. Considerando la condición de $\lambda/4$, los parámetros anteriormente citados corresponden a estructuras diseñadas en una longitud de onda de $1\mu m$. Para determinar la sensibilidad de las HHS como biosensores se usó la molécula 5-6 Carboxyfluorescein N-hydroxysuccinimide ester (*FSE*), la cual es una molécula fluorescente comunmente utilizada como marcador biológico. Para inmovilizar esta molécula es necesaria la previa infiltración de un silano, en este caso 3-aminopropyltriethoxysilane (*APTES*), la cual es una molécula ligante que permite formar enlaces covalentes con moléculas que contengan grupos funcionales tipo amino. Previo a la infiltración de *APTES* se llevó a cabo un tratamiento térmico a $800^\circ C$ durante 3 min bajo un flujo de oxígeno, el cual permite estabilizar la muestra para evitar cambios de la respuesta óptica debido al contacto con el ambiente, a demás de que las terminaciones $Si - O_x$ proveen el carácter necesario para la adhesión del *APTES* a la superficie porosa. La silanización con *APTES* se llevó a cabo incubando las HHS durante 1.5 horas en una solución al 5% de *APTES* en tolueno, posteriormente se lavaron con el solvente y se secaron bajo un flujo de N_2 . Finalmente las muestras se sometieron a un tratamiento térmico a $110^\circ C$ durante 15 min. La inmovilización de *FSE* se realizó incubando las HHs en una solución $10mM$ de *FSE* en solución buffer (*PO₄buffer*) durante 2 horas; transcurrido este tiempo las muestras se lavaron con solución buffer y finalmente se secaron bajo un flujo de N_2 .

La figura (1.9) muestra los espectros de reflectancia después de cada paso de la inmovilización de las moléculas. Como se puede observar, la HH fabricada con los parámetros anteriormente mencionados presenta dos resonancias localizadas en 1021.1 y 1132.6 nm respectivamente. El proceso de oxidación induce un desplazamiento de las resonancias a longitudes de onda menores debido a que el índice de refracción efectivo disminuye al oxidarse la muestra localizándose ahora las resonancias en 893.2 y 987.2 nm respectivamente. La infiltración de moléculas como el *APTES* y la *FSE* provocan desplazamientos hacia longitudes de onda mayores ya que el índice de refracción de estas moléculas es mayor al del aire, y por tanto desplazan parte de éste al ser inmovilizadas dentro de la HH. Las posiciones espectrales de ambas resonancias fueron 950.1 y 1051.9 nm y 965.8 y 1073.4 nm

respectivamente.

La sensibilidad de las muestras se evaluó a partir del parámetro $\Delta\lambda/\Delta n$; considerando la resonancia de mayor energía. El cambio de índice de refracción se estimó por una simulación teórica usando el formalismo de la matriz de transferencia del cual se obtuvo el cambio de índice para cada capa porosa y se evaluó en su conjunto siendo éste igual a 0.036. Por lo tanto la sensibilidad de la HH ante la inmovilización de *FSE* se estimó en 597 nm.

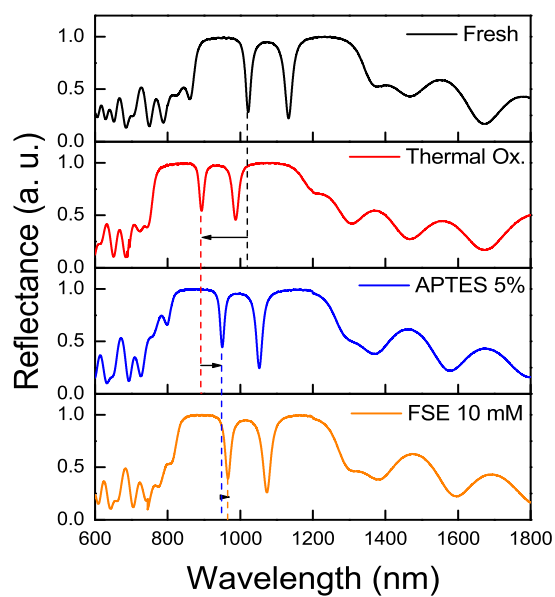


Figura 1.9: Espectros de reflectancia medidos de la estructura HH para las diferentes etapas.

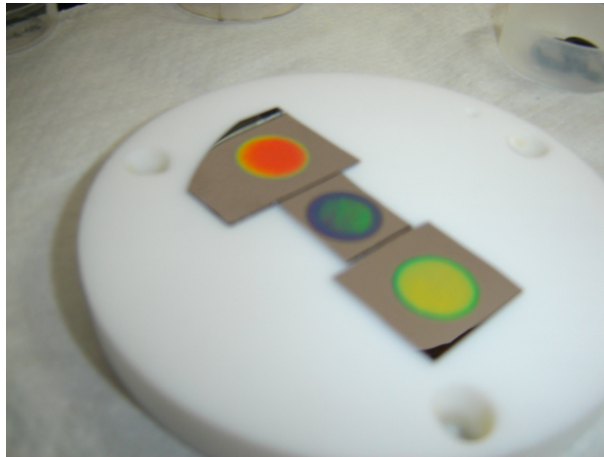


Figura 1.10: Estructuras de multicapas de SP fabricadas en nuestro laboratorio.

Propiedad	Aplicaciones principales
Luminiscencia	Optoelectrónica (LEDs, marcadores)
Dependencia porosidad-índice de refracción	Fotónica (guías de onda, filtros, espejos, microcavidades, procesamiento óptico)
Cargado de compuestos y enlaces/adsorción de moléculas dentro de los poros; área y volumen extensos de los poros	Interruptor óptico y sensado; liberación de drogas; explosivos
Propiedades ópticas no lineales, anisotropía	Interruptor óptico; birrefringencia; generación de armónicos
Conductividad térmica extremadamente baja	Sonido/emisión ultrasónica; actuadores; sensado de presión; transmisión digital
Biocompatibilidad	Liberación de drogas, dispositivos implantables

Tabla 1.2: Aplicaciones potenciales del SP.

Capítulo 2

Obtención del silicio poroso

2.1 Silicio cristalino

El silicio es uno de los elementos más abundantes en la corteza terrestre con 27 % en peso después del oxígeno. Este elemento se presenta en forma amorfa y cristalina. El silicio es empleado ampliamente en dispositivos electrónicos y en la fabricación de celdas solares. Sin embargo este elemento no tiene buenas propiedades ópticas, ya que posee una banda de energía prohibida indirecta de aproximadamente 1.1 eV. Motivo por el cual hace que este material no emita eficientemente luz en el espectro visible incluso a baja temperatura. El movimiento de un electrón hacia la banda de conducción y su regreso a la banda de valencia (recombinación par electrón y hueco), requiere de los fonones, para que el momento se conserve, este tipo de transición radiativa es generalmente muy ineficiente [101].

2.2 Proceso de formación del silicio poroso

El SP es obtenido por el ataque oxidativo electroquímico al silicio cristalino. Una de las principales ventajas de trabajar con silicio poroso es que es muy fácil y rápido de obtener. Para su fabricación no se requiere de un equipo muy sofisticado y caro. Sin embargo, las aplicaciones de este material en el ámbito tecnológico y científico son

muy diversas. Para su fabricación existen varias técnicas tales como “*stain etching*” y “*spark erosion*”. *Stain etching* es útil para producir SP sobre sustratos que no tienen una buena conductividad (baja concentración de dopaje) [102], mientras que *spark erosion* tiene la única ventaja de que es un proceso totalmente en seco. Sin embargo, la técnica más común para la fabricación de SP consiste de un proceso electroquímico denominado anodización electroquímica. Este proceso fue utilizado por primera vez por A. Uhler en 1956 [103], y con el se pueden obtener capas gruesas y muy homogéneas. Además, la anodización electroquímica permite controlar la velocidad de ataque electroquímico, con lo cual se puede tener un control preciso de las propiedades de las películas tales como el espesor y la porosidad. La formación de SP mediante anodización consiste en la disolución electroquímica de silicio cristalino en una solución acuosa o etanólica de ácido fluorhídrico (HF). El proceso de anodización puede realizarse en modo de voltaje controlado o modo de corriente controlada. Sin embargo, el último es el que se usa normalmente ya que proporciona un control mucho mejor en la porosidad y en el espesor de las capas, así como también proporciona una buena reproducción entre muestras. En la fabricación del SP todos los factores experimentales son importantes tales como: el tipo de conductividad de las obleas (n o p), su nivel de dopaje (p+, p++, p-, n++, n-), composición del electrolito (pH, concentración), construcción de la celda electrolítica, el régimen de anodización, la preparación previa de la muestra, etc. Muy recientemente una nueva técnica para la obtención de SP a partir de obleas de c-Si tipo-n por efecto Hall ha sido realizada [104], En esta técnica se sustituye el efecto de la luz UV del método tradicional por un campo magnético. Un gradiente lateral puede ser logrado usando campo magnético, además de alterar la nanoestructura del SP.

La naturaleza porosa de las películas fueron reportadas primeramente en 1971 por Watanabe y Sakai [105]. El enfoque principal del descubrimiento surgió hasta los años 90´s cuando se comenzó a usar el SP oxidado como un aislante dieléctrico [105, 106, 107]. Sin embargo, un amplio interés surgió cuando apareció un artículo publicado por Canham en 1990 reportando la fotoluminiscencia (FL) eficiente en el SP a temperatura ambiente [108].

2.3 Celda usada para la anodización electroquímica

Se han propuesto diversos tipos de celda para realizar el proceso de anodización [109]. La celda más usada para fabricar SP, conocida como celda de tanque, usa un contacto (una lamina de un material conductor) en la parte posterior de la oblea (figura (2.1)). En este tipo de celda se requiere que haya un buen contacto entre la oblea de Si y la lámina de metal. Por lo tanto, un contacto metálico (por lo general de Al) es depositado sobre la parte posterior de la oblea de silicio y sellado a fin de que sólo la parte frontal de la muestra (lado pulido de la oblea) sea expuesta al electrolito de anodización. En una oblea de silicio con una baja resistividad (típicamente menor que $1 \text{ m}\Omega\cdot\text{cm}$) se obtiene una buena uniformidad sin la necesidad de depositar un contacto metálico. Sin embargo, para obleas de silicio de alta resistividad (típicamente mayor que $1 \Omega\cdot\text{cm}$), se requiere la implantación de una alta dosis de boro (tipo p) o fósforo (tipo n) sobre el lado no pulido de la oblea para una buena uniformidad. Con este tipo de celda se obtienen capas de SP con una buena uniformidad, simplificándose la interpretación de las características de corriente-voltaje (i - V), y ofreciendo un buen control del espesor y la porosidad, que son claves en la fabricación de CFs con muy buena calidad óptica.

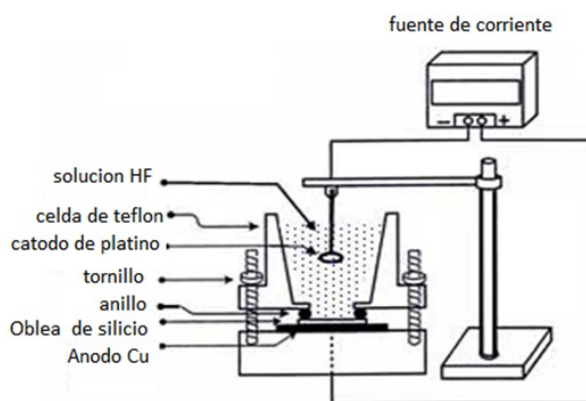


Figura 2.1: Celda de anodización electroquímica más común para la fabricación de SP.

2.4 Mecanismos de anodización electroquímica

Las características típicas de corriente-voltaje (i - V) en el proceso de anodización para silicio tipo n y tipo p en solución acuosa de HF se muestran en la figura (2.2) [110]. Se debe poner énfasis en que la cantidad física que se mide es la densidad de corriente J (en la interfase silicio/electrolito), en lugar de la corriente absoluta i . Para formar el SP la corriente en el lado del silicio de la interfase silicio/electrolito debe ser generada por los huecos inyectados desde el sustrato (bulto de silicio) hacia la interfase, ver figura (2.3). La corriente debe estar entre cero y el umbral de electropulido, el cual se identifica como el valor del primer máximo del régimen anódico en la curva (i - V). Los regímenes útiles son incluidos en la región marcada con un rectángulo en la figura (2.2), donde el voltaje en el umbral de electropulido (para la curva marcada con círculos vacíos) es $V \simeq 1.3V$. Los valores cuantitativos de las curvas i - V , así como los valores correspondientes al pico de electropulido dependen de los parámetros de ataque y del nivel de impurezas de la oblea. En el caso de silicio tipo n se requiere de iluminación externa para lograr una corriente significativa de huecos dependiendo del nivel de dopaje. Si la corriente excede el umbral de electropulido la anodización resulta en un removimiento progresivo y completo del silicio, esto es, la oblea tiene entonces una apariencia como la de un espejo.

Las curvas i - V muestran algunas similitudes al comportamiento normal del diodo Schottky, tal como se espera para una interfase electrolito/semiconductor. Existen algunas diferencias cuando el tipo de portadores mayoritarios cambia entre los tipos p y n . La única reacción catódica importante en ambos tipos de silicio (n y p) es la reducción de agua en la interfase Si-HF con la formación de gas hidrógeno. Esta reacción solo ocurre con potenciales de catodización muy altos, es decir, después de la ruptura de polarización inversa. La disolución del silicio ocurre solamente bajo polarización anódica. Por el contrario, a potenciales bajos de anodización la morfología superficial es dominada por un arreglo denso de canales penetrando profundamente dentro del volumen del silicio [111].

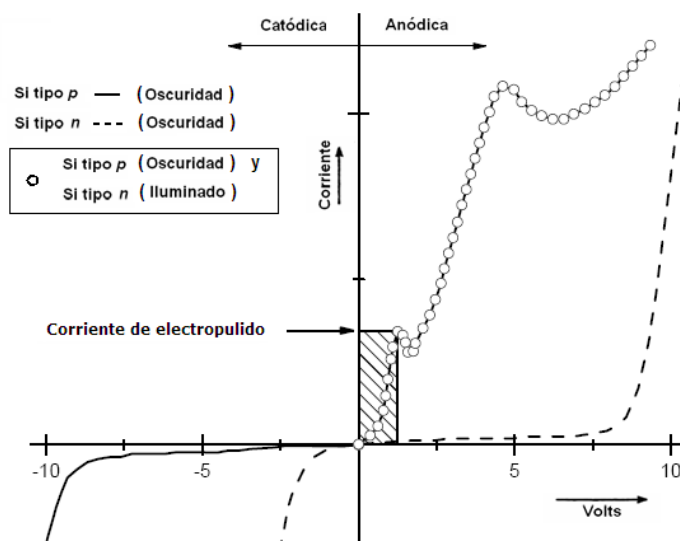


Figura 2.2: Curvas típicas del comportamiento i - V de una celda electroquímica para la fabricación de SP. La región dentro del rectángulo corresponde al régimen útil donde se puede lograr el SP, asumiendo la curva característica i - V marcada con círculos vacíos. En el régimen anódico, las características de una celda electroquímica con silicio tipo n estarán en la región delimitada por las características en oscuridad (línea punteada) y con iluminación (círculos vacíos) [110].

2.5 Química de formación del SP

El mecanismo de la disolución química de Si es aún un tema en discusión y se han propuesto diferentes modelos para tratar de explicarlo. Sin embargo, generalmente se acepta que es necesaria la presencia de los huecos para la formación de los poros y para el proceso de electropulido [110, 112]. Cuando se lleva a cabo la formación del poro, dos átomos de hidrógeno se desprenden por cada átomo de Si disuelto [113]. El desprendimiento de hidrógeno disminuye cuando el proceso se aproxima al régimen de electropulido y desaparece durante el electropulido. La eficiencia de la corriente es de alrededor de dos electrones por cada átomo de Si disuelto durante la formación del poro y de alrededor de cuatro electrones en el régimen de electropulido [112]. La figura (2.4) ilustra el mecanismo de la disolución química que fue sugerido por Lehmann y Gösele en 1991, el cual está basado en un esquema de oxidación

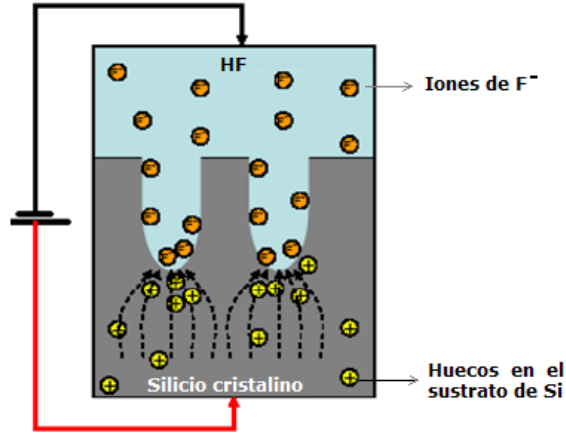
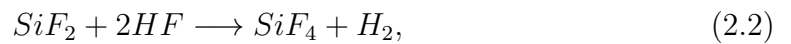
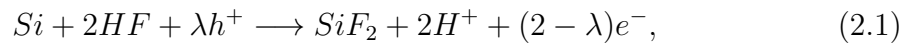


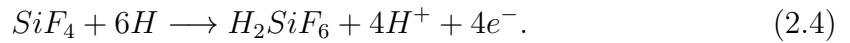
Figura 2.3: Esquema simplificado del proceso electroquímico de anodización del Si cristalino utilizando un proceso por corriente controlada. Los iones F^- (contenidos en la solución electrolítica) y los huecos (presentes en la oblea de Si) son las principales especies electroactivas que intervienen en el proceso de anodización, esto es, el ataque ocurre solo en las puntas del poro donde los huecos (h^+) son enfocados por el campo eléctrico [114].

de los enlaces superficiales con captura de huecos y una subsiguiente inyección de electrones, los cuales inducen estados de oxidación divalentes. El proceso de disolución de Si en HF se describe brevemente en los pasos (1 al 5) del esquema de la figura (2.4).

Por otra parte, en los trabajos realizados por Eddowes [115], Turner [116] y Memming [117] propusieron los siguientes mecanismos de reacción para la disolución de silicio:



y durante el electropulido:



El producto final estable para la disolución de Si en HF es en cualquier caso H_2SiF_6 o alguna de sus formas ionizadas. Esto significa que durante la formación del poro sólo dos de los cuatro electrones disponibles del silicio participan en la transferencia de carga interfacial, mientras que los dos restantes experimentan una corrosión liberando hidrógeno. Contrariamente, en el electropulido, los cuatro electrones del silicio son eléctricamente activos [99].

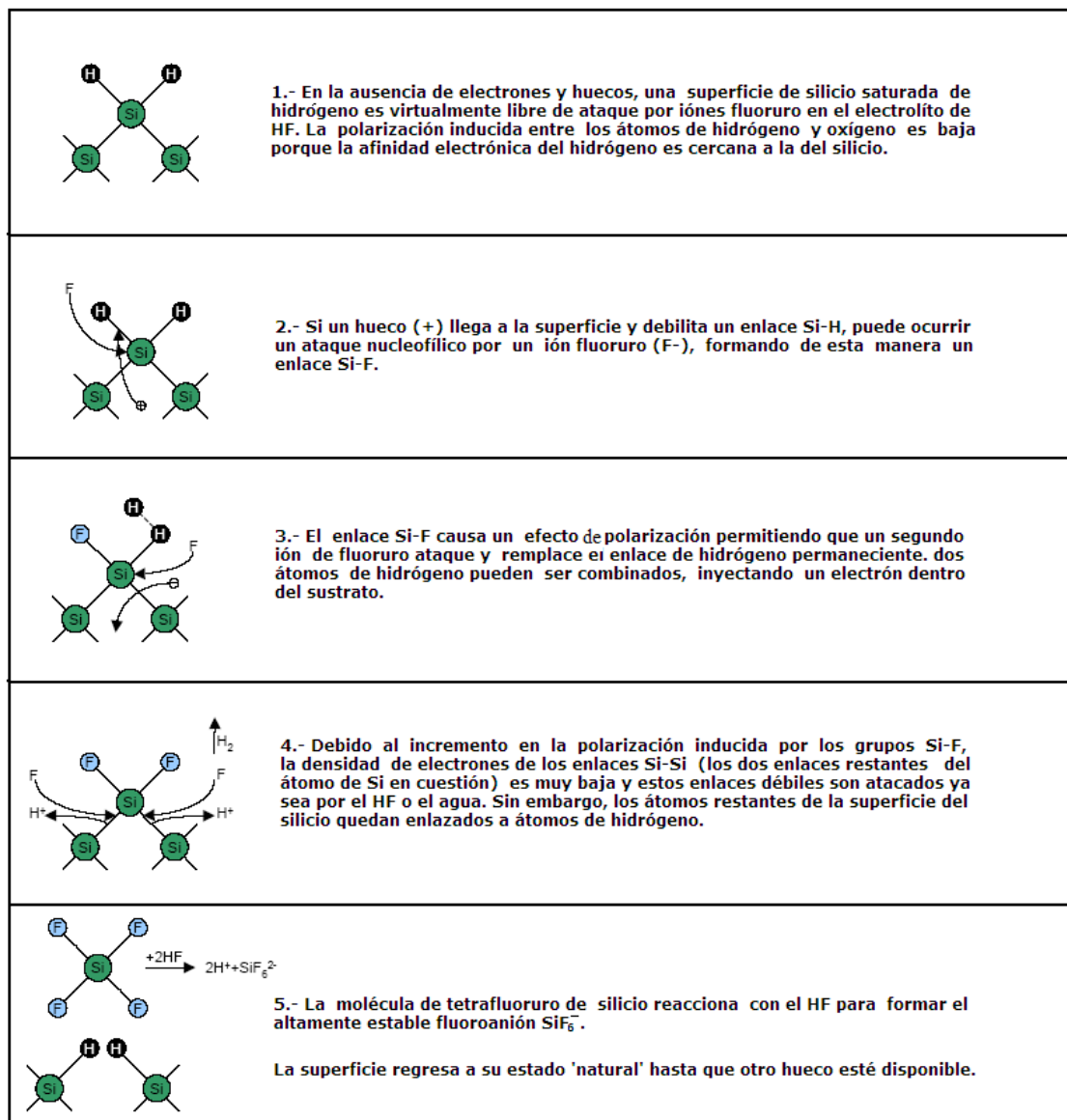


Figura 2.4: Mecanismo para la disolución electroquímica de silicio sugerido por Lehmann en 1991 [112].

2.6 Formación del poro

Las etapas iniciales del crecimiento son importantes para determinar la morfología final del poro. La iniciación del poro ocurre en los defectos o irregularidades super-

ficiales del silicio. Por consiguiente, algunos requerimientos básicos que tienen que ser realizados para que pueda ocurrir la formación electroquímica del poro son: i) La oblea de silicio necesita ser parcialmente anódica a fin de que los huecos sean proporcionados por el volumen (oblea) de Si y estén disponibles en la superficie. ii) Mientras las paredes del poro han sido pasivadas, las puntas de los poros quedan activas en la reacción de disolución. Consecuentemente, una superficie en la cual se agotan los huecos es pasivada por el ataque electroquímico, lo que significa que (a) el ataque electroquímico es autolimitante y (b) la reducción de huecos ocurre solo cuando cada hueco que alcanza la superficie reacciona inmediatamente. La densidad de corriente debe de ser más baja que la del valor crítico del electropulido [99].

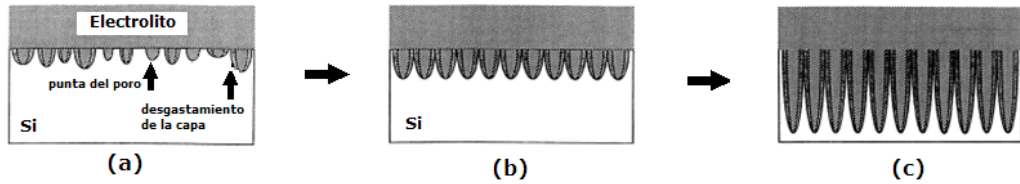


Figura 2.5: Mecanismo para la formación del poro en estructuras de SP. (a) Inicialización aleatoria del poro, (b) formación de las capas desgastadas y crecimiento direccional de los poros, y (c) el avance de la disolución solo en las puntas de los poros donde los huecos (h+) son enfocados por el campo eléctrico [99].

2.7 Características principales del SP

Un poro puede ser definido, en el sentido más general, como un espacio hueco dentro de un material cuya profundidad d excede su ancho w , ver figura (2.6)(A)-(a). Normalmente las capas de SP son de unos pocos micrómetros (μm) de profundidad y los poros individuales son generalmente cerrados al final del mismo (figura (2.6)(A)-(b)) e interconectados en algún grado (figura (2.6)(A)-(c)). Otra posibilidad es la “porosidad cerrada”, la cual puede ser creada por una reconstrucción inducida térmicamente de la red de poros (figura (2.6)(A)-(d)). También existen otro tipo de poros, los cuales son abiertos a ambos lados de la capa tal como la estructura

de una membrana (figura (2.6)(A)-(e)). Estos últimos se pueden obtener mediante la anodización prolongada de la oblea de Si. La forma del poro más común es la cilíndrica (figura (2.6)(B)-(a)) con grado de variación de aguja (figura 2.6(B)-(b)) o forma de frasco (figura (2.6)(B)-(b)) [118]. El uso de electrolitos químicamente muy agresivos, tiempos de anodización muy largos o crecimientos asistidos por luz, actúan para generar una forma de embudo (figura (2.6)(B)-(c)) [119].

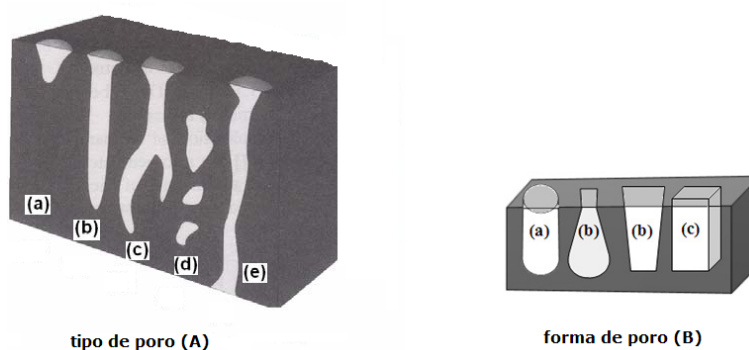


Figura 2.6: Esquema que ilustra la geometría de los poros : tipos (A) y formas (B) [119].

Por otro lado, el tamaño de poro del SP determina muchas de las propiedades de absorción del material. La Unión Internacional de Química Pura y Aplicada (IUPAC, por sus siglas en inglés) define intervalos de tamaño de poro los cuales exhiben propiedades de absorción características como se muestra en la tabla 2.1.

Tipo de poro	Ancho de poro (nm)	Área superficial (m^2/cm^3)
microporo	≤ 2	300-800
mesoporo	2-50	100-300
macroporo	> 50	10 a 100

Tabla 2.1: Clasificación del tamaño de poro de la IUPAC [120].

El tamaño de poro solo tiene un significado preciso cuando la forma y tipo son bien conocidos. Tal es el caso de los macroporos y algunas veces para mesoporos de SP, ver figura (2.7). Por otro lado, los microporos actualmente no están bien

definidos. En el caso de la fotoluminiscencia del SP, esta clasificación no es muy útil porque la luminiscencia está relacionada al tamaño de los cristales de Si y no directamente al tamaño de los poros [120].

El área superficial de las películas de silicio poroso, comúnmente llamada “área superficial específica”, se define como el área accesible de la superficie sólida por unidad de masa de material [121]. La medición por absorción de gases es la técnica más usada para determinar el área superficial del SP.

El análisis de la distribución y tamaño de los poros se realiza normalmente por microscopía electrónica de barrido (SEM) y de transmisión (TEM) [122]; y muy recientemente por microscopía electrónica de alta resolución (HRSEM) [123]. Sin embargo, aunque tales técnicas proporcionan información muy valiosa sobre la morfología del poro, éstas no permiten determinar la variación del tamaño de poro promedio en el área observada, ya que las mediciones son muy localizadas.

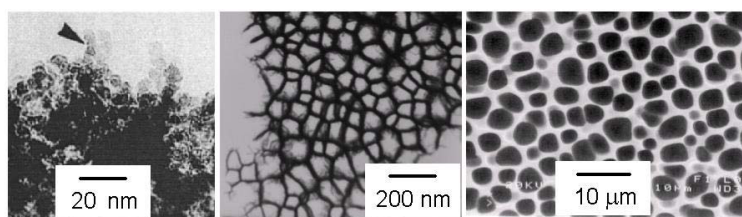


Figura 2.7: Ejemplo de estructuras de SP: microporos (izquierda), mesoporos (centro) y macroporoso (derecha) [114].

2.8 Parámetros de anodización

El proceso de formación de SP por medio de anodización electroquímica ha sido ampliamente desarrollado por muchos autores. Los principales parámetros que influyen en este proceso se listan a continuación.

2.8.1 Dopaje del sustrato

La concentración de dopaje y el tipo de oblea son parámetros cruciales para la formación del SP. La morfología obtenida y rangos de porosidad son dependientes de la resistividad de la oblea. Obleas de alta resistividad tienden a dar SP macroporoso el cual es muy quebradizo, con rango de porosidad controlable muy estrecho (ver figura (2.7) derecha). Con obleas de baja resistividad, la interfase rugosa (microscópica) decrece, aunque la rugosidad macroscópica tiende a incrementarse debido a la estriación. En este tipo de muestras se producen mesoporos (ver figura (2.7) centro). El rango de porosidad de obleas altamente dopadas es bastante grande.

2.8.2 Resistividad

La densidad de corriente es un factor importante en el crecimiento de SP. La resistividad local de la muestra tendrá un impacto sobre la estructura porosa resultante. La resistividad de la muestra es controlada por el dopaje y como usualmente la distribución del dopante es ligeramente inhomogéneo la velocidad de ataque local y porosidad serán localmente inhomogéneos. Para muchas aplicaciones esto es aceptable, pero en el caso de elementos ópticos, una inhomogeneidad en el índice de refracción y rugosidad de las interfases de las capas serán perjudiciales para la calidad óptica.

La porosidad, morfología y velocidad de ataque electroquímico, durante el proceso de anodización del silicio, dependen fuertemente de la resistividad de la oblea, por lo que es muy importante tener en cuenta este factor dependiendo de la aplicación que se desee.

2.8.3 Densidad de corriente

La densidad de corriente usada en la disolución electroquímica del silicio es el parámetro principal que fija la porosidad de la capa de silicio poroso cuando las otras variables son mantenidas constantes. Los átomos de Si son disueltos como

complejos de SiF_6^{2-} , los cuales requieren la presencia de iones F^- proporcionados por el electrolito, y los huecos cargados positivamente desde la oblea de silicio. La densidad de corriente determina si los iones F^- o los huecos (h^+) son las especies limitantes de la corriente. En el caso de densidades de corriente muy grandes, la difusión de los iones F^- a la interfase es más lenta que el transporte de huecos. En esta situación, la superficie de la oblea de Si está saturada con huecos, y por cada ión que migra a la interfase Si/HF, éste encuentra disponible un hueco para disolver el silicio con lo cual se da el proceso de electropulido, un caso extremo de la disolución del silicio. Sin embargo, cuando la densidad de corriente es muy baja, suficientes iones de F^- están presentes en la interfase mientras que los huecos disponibles son muy pocos. Debido a la distribución del campo eléctrico característico en las irregularidades de la superficie, la posibilidad de que los huecos lleguen a la superficie es muy pequeña, por lo tanto, el crecimiento del poro ocurre hacia dentro del sustrato.

2.8.4 Tiempo de ataque electroquímico

En general, el tiempo de ataque electroquímico nos permite tener un buen control del espesor de la capa de SP. Éste sigue una relación lineal, donde el espesor se incrementa con el tiempo de anodización [109]. Sin embargo, al incrementar el espesor, el tiempo de exposición del silicio poroso al electrolito es más amplio, por lo que la porosidad superficial se incrementa ligeramente debido a la disolución química adicional de la capa en HF, generando con ésto un gradiente de porosidad a lo largo de toda la capa porosa, por lo que es recomendable usar tiempos cortos para la caracterización por gravimetría.

2.8.5 Electrolito

Los constituyentes del electrolito usado para la fabricación del SP puede variar sustancialmente, pero en general, para la formación del silicio poroso se usa una solución de HF y agua. La desventaja de esta solución, es que se liberan burbujas de hidrógeno que se adhieren a la superficie induciendo inhomogeneidades. Para

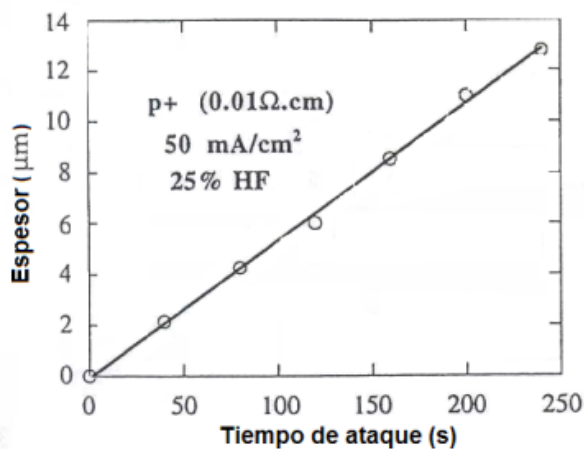


Figura 2.8: Variación del espesor como una función del tiempo de anodización [109].

mejorar la uniformidad de la superficie en el silicio poroso las burbujas de hidrógeno necesitan ser removidas. Una de las formas más apropiadas para eliminar este problema consiste en adicionar un agente químico a la solución de HF, tal como el ácido acético, el cual permite la remoción de las burbujas. Sin embargo, la forma más común para minimizar la formación de burbujas de gas hidrógeno consiste en adicionar etanol (alrededor del 15% en volumen) al electrolito de HF. Para todos los experimentos realizados en este trabajo, una solución de HF(40%) y etanol (99.98%) ha sido usada en proporción volumétrica 1:1. Además, se ha demostrado previamente que una solución etanólica de HF se infiltra completamente en los poros, mientras que una solución acuosa pura no, mejorándose con esto la homogeneidad de la capa porosa debido a la mojabilidad de la superficie y al fenómeno de capilaridad [109]. Otro punto importante a considerar es la concentración de HF presente en el electrolito. Cuando se tienen concentraciones muy bajas, el número de iones fluoruro en el proceso de ataque es muy reducido. Consecuentemente, la porosidad del SP aumenta. En este caso, se deberá disminuir la densidad de corriente aplicada o de lo contrario ocurrirá el electropulido del SP. Sin embargo, una baja concentración de HF tiene la ventaja de disminuir la velocidad de ataque electroquímico. Contrariamente, cuando la concentración de HF aumenta, la porosidad disminuye (ver tabla 2.2).

Se pueden hacer diferentes sustituciones o adiciones para cambiar las propiedades del electrolito, por ejemplo, para incrementar la viscosidad, la cual se piensa que tiene influencia en la rugosidad de las interfases del sustrato de SP, se puede agregar glicerol [16, 124].

Un incremento de	Porosidad	Velocidad de ataque	Corriente crítica
Concentración de HF	Decrece	Decrece	Incrementa
Densidad de corriente	Incrementa	Incrementa	-
Tiempo de anodización	Incrementa	Casi constante	-
Temperatura	-	-	Incrementa
Dopaje de la oblea (tipo p)	Decrece	Incrementa	Incrementa
Dopaje de la oblea (tipo n)	Incrementa	Incrementa	-

Tabla 2.2: Efecto de los parámetros de anodización sobre la formación del SP [101].

2.9 Propiedades del SP

2.9.1 Propiedades químicas

La composición química de la superficie del SP es analizada con espectroscopía infrarroja por transformada de Fourier (FTIR). Las señales en FTIR son mucho más intensas y fáciles de medir que en el Si debido a que el área superficial específica es más grande. Los enlaces químicos y sus posiciones de resonancia infrarroja son por consiguiente fáciles de determinar. Dependiendo del área superficial específica del SP (más de $500 \text{ m}^2/\text{cm}^3$ y del nivel de dopaje y del sustrato), ésta contiene una gran cantidad de impurezas las cuales provienen del electrolito usado para el ataque electroquímico, del método de preparación (limpieza y secado de las muestras) [99], del medio ambiente y de la oblea misma. Por tal motivo es importante conocer la composición química del SP, ya que las propiedades ópticas y eléctricas dependen del contenido de impurezas y de la pasivación de la superficie del SP. La impureza

original, que siempre se encuentra en las capas de SP, es el hidrógeno. Los espectros de absorción infrarroja (IR) han mostrado la presencia de grupos Si-H_x (x=1,2,3) sobre la superficie interna del SP durante el proceso de ataque. Después de la formación y el secado, los grupos Si-H_x están todavía presentes en la superficie interna por mucho tiempo (algunas semanas o incluso meses) [125].

Otra impureza encontrada en el silicio poroso es el flúor [126]. La forma en la cual el flúor está presente en el SP es todavía una interrogante. Los resultados indican que el flúor está presente en las muestras debido a los residuos del electrolito dentro de los poros.

Adicionalmente se encuentra oxígeno [127] que es normalmente absorbido a los pocos minutos después de secar las muestras al aire del ambiente. La cantidad de oxígeno puede ser tan alta como del 1 %, después de que las muestras son expuestas al aire (alrededor de 15 min.), y se incrementa a valores muy altos con la degradación de las mismas.

2.9.2 Propiedades eléctricas

La resistividad eléctrica en el SP es cinco órdenes de magnitud más alta que la del silicio cristalino intrínseco debido a que en el SP hay una disminución de los portadores de carga libre. La reducción puede ocurrir ya sea por la ampliación de la brecha de energía debida al confinamiento cuántico, el cual reduce la generación térmica de los portadores de carga libres, o debido al atrapamiento de los portadores. El atrapamiento puede ocurrir durante la preparación del SP debido a que la energía de enlace de las impurezas (dopante) se incrementa o por la formación de los estados de superficie. Se ha demostrado que los dopantes están aún presentes esencialmente en concentraciones sin cambios después del ataque electroquímico, pero están en un estado neutral. El transporte eléctrico es principalmente afectado por la estructura desordenada de la red de Si, la cual restringe los caminos de conducción a una geometría altamente forzada. Varios modelos se han propuestos para explicar las propiedades del transporte eléctrico. Éstos difieren en los tipos de camino eléctrico y en los mecanismos de transporte.

Por otro lado, dada una gran área específica por unidad de volumen, el transporte eléctrico también es fuertemente influenciado por factores externos tales como el electrolito residual dentro de los poros y las impurezas del medio ambiente. La propiedad anterior es muy interesante para aplicaciones en sensores químicos. Ciertos gases, como el NO_2 , tienen la capacidad de modificar la población de portadores de carga [15].

2.9.3 Propiedades ópticas

Las dimensiones l de las estructuras de SP (esto es, el tamaño de poro y espesor de la capa porosa) pueden variar comparadas con la longitud de onda (λ). Desde $l \ll \lambda$ hasta $l \approx \lambda$. En consecuencia existen dos diferentes regímenes de la propagación de la luz e interacción con el SP.

El primer régimen, cuando las dimensiones son muy pequeñas comparado con λ ($l \ll \lambda$). El campo de radiación no puede resolver las estructuras de SP y la interacción puede ser descrita convencionalmente por una teoría de aproximación del medio efectivo, donde una constante dieléctrica macroscópica (o índice de refracción) es evaluada como una combinación apropiada de constantes dieléctricas de silicio y aire. Este método se discute con detalle en un apartado más adelante.

El segundo régimen, se define cuando $l \approx \lambda$. Este tipo de estructura es llamado mesoscópico: el tamaño de la estructura es mucho más pequeño comparado con la longitud de onda. La geometría de la estructura porosa influye fuertemente en la interacción y transporte de la luz.

En el SP, en contraste con el Si cristalino, existe una amplia extensión de las brechas de energía, demostrada por una gran e inhomogénea ampliación de su banda luminiscente en el visible. Diferentes técnicas pueden usarse para obtener los valores experimentales de la brecha de energía del SP [15]. Sin embargo, la técnica de luminiscencia es la más usual y consiste en la medición de la energía de recombinación de los portadores excitados a través de la brecha. Los máximos de fotoluminiscencia son usados para comparación midiendo el ancho de la amplitud máxima media

(FWHM) de los picos de fotoluminiscencia, los cuales muestran directamente la variación de la brecha de energía en la muestra.

La luminiscencia eficiente a temperatura ambiente fue atribuida a los efectos de confinamiento cuántico en el silicio cristalino [15]. Las estructuras basadas en SP fueron reportadas con una luminiscencia eficiente en el rojo. Poco después la fotoluminiscencia en el naranja, amarillo y también fue observada en el verde. Una característica única del SP es su amplio espectro de fotoluminiscencia que se extiende desde el infrarrojo cercano hasta el UV cercano.

Rango espectral	Longitud de onda del pico (nm)	Nivel de la banda luminiscente	FL	EL
UV	~ 350	Banda UV	Sí	No
Azul-verde	~ 470	Banda F	Sí	No
Azul-rojo	400-800	Banda S	Sí	Sí
Cercano infrarrojo	1100-1500	Banda infrarroja	Sí	No

Tabla 2.3: Bandas de luminiscencia del SP. Fotoluminiscencia(FL) y Electroluminiscencia(EL) [128].

2.10 Preparación de las muestras

Antes del crecimiento, la lámina de cobre debe de estar libre de óxido para asegurar un buen contacto con la oblea. Esto es crucial para una distribución homogénea de la densidad de corriente sobre el área atacada. Después de cortar la muestra, inmediatamente se debe limpiar en un baño ultrasónico en agua desionizada y etanol, posteriormente es secada con etanol. Este proceso es muy importante ya que garantiza la homogeneidad de las muestras. Si las muestras no están bien limpias, los espectros característicos de los filtros ópticos muestran algunos picos inesperados y a simple vista, las muestras de SP no son homogéneas. Cuando la oblea de Si se coloca en la celda electroquímica, se deja unos minutos en el electrolito antes de

pasar la corriente al sistema con el propósito de remover el poco óxido que tiene la superficie de la oblea.

2.10.1 Secado de las muestras

Para obtener capas de SP de alta calidad, es importante tener en cuenta el método de secado que se realiza inmediatamente después de que las muestras han sido anodizadas. Dependiendo del tamaño de la estructura (porosidad) y la tensión superficial del líquido, puede ocurrir agrietamiento de la capa de SP. Después de la formación de una muestra altamente porosa (mayor a 70 %) o muy gruesa (del orden de micras) se observa un agrietamiento de la superficie del SP después de que el solvente (agua o etanol) utilizado para enjuagar el electrolito residual sobre la muestra se evapora dentro de los poros [129, 130]. El origen del agrietamiento es debido a los grandes esfuerzos de capilaridad asociados con el tamaño nanométrico de los poros y a la evaporación del solvente [129]. Una vez que las muestras han sido enjuagadas dentro de la celda son puestas en etanol puro, el cual tiene una tensión superficial más baja que la del agua (22mJ/m^2 comparada con 72mJ/m^2). Una alternativa de secado es usar pentano (con una tensión superficial de 14mJ/m^2). Sin embargo, el pentano no es soluble en agua, por lo tanto la muestra es primeramente secada con etanol y posteriormente con pentano. Usando este método de secado con pentano, se pueden obtener capas de SP con valores de porosidad por arriba del 90 % y espesores mayores a $5\ \mu\text{m}$.

Se debe tener cuidado que la superficie de la muestra siempre esté húmeda cuando se desmonta el sistema para evitar que las capas porosas se agrieten. Posteriormente la muestra es expuesta al aire para secarse.

Los mejores resultados de secado han sido obtenidos por secado supercrítico [129] en CO_2 para valores de porosidad muy altos (mayor que 95%). En esta técnica la remoción de HF dentro de los poros ocurre a alta presión por medio de un líquido (punto supercrítico del líquido), usualmente CO_2 . Con esta técnica se puede obtener un amplio rango de porosidades, por lo tanto es muy útil para generar multicapas con un contraste amplio de índices de refracción así como también una mejor uniformidad

óptica y homogeneidad de la superficie. Sin embargo, el secado supercrítico es costoso y difícil de implementar, así que por lo general se emplean otros métodos de secado.

2.10.2 Estabilización del SP

Cuando la muestra es secada, se oxida rápidamente debido a su alta área superficial específica, aunque depende también de las condiciones de almacenamiento de las mismas. La superficie nativa del SP presenta átomos de hidrógeno (Si-H_x , $x=1,2,3$) y se ha encontrado que es propensa al agua y oxígeno del ambiente [131]. Este cambio químico afecta muchas de sus propiedades, tales como la fotoluminiscencia y la conductividad eléctrica. Este último efecto representa un problema particular para aplicaciones que requieren estabilidad acuosa. Éste es el caso de aplicaciones para sensores donde la señal del SP depende de la pasivación de la superficie. Si la superficie de SP no es estabilizada, la señal del sensor puede ser ocultada por la desviación incurrida por la oxidación natural del SP [132]. Para combatir este problema, se han desarrollado estrategias de protección que incluyen: oxidación anódica en un electrolito sin fluoruro [99], oxidación química con bromuro o peróxido de hidrógeno

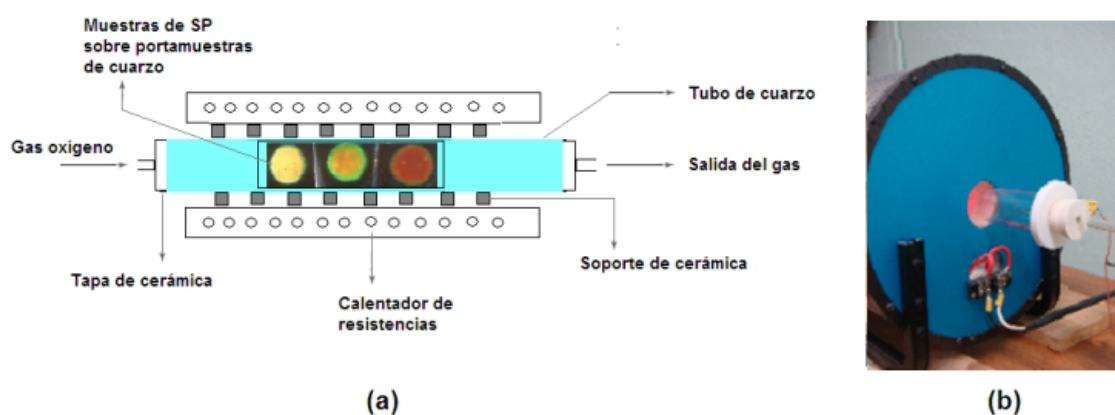


Figura 2.9: (a) Esquema de la sección transversal de un horno de oxidación térmica a través de resistencias eléctricas y (b) horno usado para oxidar las muestras.

[133, 134], oxidación por ozono [132] y oxidación térmica [135]. Todos esos métodos producen una estabilidad razonable de la superficie del SP. Para mejorar la fotoestabilidad de la luminiscencia de las capas de SP se emplean tratamientos tales como la oxidación química mediante vapor de agua, entre otros. Sin embargo, la técnica más usada es la oxidación térmica, la cual vuelve al SP un material muy estable [119]. Esta aplicación se basa en la transformación de SP en películas homogéneas de dióxido de silicio (SiO_2). El material es expuesto para que se oxide totalmente en todo su volumen debido al tipo de poro abierto y la fácil penetración del gas oxígeno dentro del poro. Esta oxidación ocurre en un tiempo relativamente corto.

2.11 Caracterización del SP

2.11.1 Porosidad

La porosidad es el parámetro más importante cuando caracterizamos un material poroso, la cual se define como la razón del volumen ocupado por el poro con respecto al volumen total. La porosidad de una muestra de SP puede ser calculada por gravimetría usando la siguiente ecuación [136]:

$$P = \left(\frac{m_1 - m_2}{m_1 - m_3} \right) \quad (2.5)$$

donde m_1 es la masa en gramos de la oblea de silicio inicial, m_2 es la masa de la oblea de silicio después de la anodización, en gramos, m_3 es la masa del silicio después de la disolución de la capa porosa, en gramos, y P es la porosidad en porcentaje. La figura (2.10) muestra un esquema simplificado de estas masas que intervienen en el método gravimétrico. Es importante señalar que para remover la capa porosa en m_2 (ver figura (2.10)), se usa una solución de hidróxido de sodio (1 molar) o se realiza un electropulido sobre la capa porosa. El método gravimétrico es aplicable en los casos donde la capa de SP es suficientemente gruesa ($> 5 \mu\text{m}$). La diferencia en masa es más grande que la cantidad de error inducido en las mediciones. Sin embargo, cuando la capa de SP es delgada ($< 200 \text{ nm}$), la diferencia en masa es del mismo orden de magnitud que el error en las mediciones y el valor de la porosidad

obtenida es poco confiable.



Figura 2.10: Esquema de las masas que intervienen en el cálculo de la porosidad.

2.11.2 Espesor

El espesor de una capa de silicio poroso puede ser obtenido usando un perfilómetro. Las películas con espesores de la capa del orden de micras pueden ser medidas muy fácilmente, sin embargo, cuando las capas son muy delgadas (por ejemplo 80 nm) los espesores medidos no son muy confiables. Un método alternativo consiste en obtener el espesor de una forma indirecta utilizando mediciones gravimétricas, mediante la siguiente relación [137]:

$$d = \left(\frac{m_1 - m_3}{\rho_{Si} S} \right) \quad (2.6)$$

donde ρ es la densidad del silicio y S es la superficie atacada. Sin embargo, para obtener valores mas precisos del espesor de las capas, se puede recurrir a la medición del espesor de la capa directamente desde una imagen de sección transversal de SEM. Mediante ésta técnica se puede obtener información muy útil acerca del perfil y del tipo de rugosidad presente en la interfase SP/Si, con lo cual se puede tener un valor cuantitativo sobre la homogeneidad de la capa de SP.

2.11.3 Índice de refracción

Para las aplicaciones ópticas de los materiales multicapas (espejos de Bragg, espejos omnidireccionales y microcavidades), es necesario conocer el índice de refracción de cada capa del material constituyente. Un método muy simple para evaluar el índice de refracción de un material tipo película (monocapa), consiste en la medición de las franjas de interferencia de las reflexiones múltiples de un haz de luz al propagarse a través de la película a diferentes longitudes de onda (ver figura (2.11)(a)), a fin de obtener el espesor óptico del haz de luz [138]. La posición de la franja de interferencia máxima satisface:

$$2nd \left(\frac{1}{\lambda_r} - \frac{1}{\lambda_{r+1}} \right) = 1 \quad (2.7)$$

donde n es el índice de refracción, d es el espesor de la capa y λ_r es la longitud de onda correspondiente al r -ésimo máximo de reflectancia. Si el espesor de la capa es conocido independientemente (por SEM o gravimetría), el índice de refracción se obtiene fácilmente de la ecuación (2.7) mediante la razón entre el camino óptico nd y el espesor de la capa. Este método puede utilizarse solamente si las franjas de interferencia son visibles y si la capa es delgada. Si el material presenta una gran dispersión, otros métodos deberán de ser empleados. Común mente, se emplea la técnica de elipsometría para obtener los valores de n y k , para un amplio rango de frecuencias (ver figura (2.11)(b)). Los índices de refracción correspondientes a las diferentes capas porosas con las que fabricamos nuestras estructuras son obtenidos usando un método de aproximación del medio efectivo, que discutiremos en el siguiente capítulo.

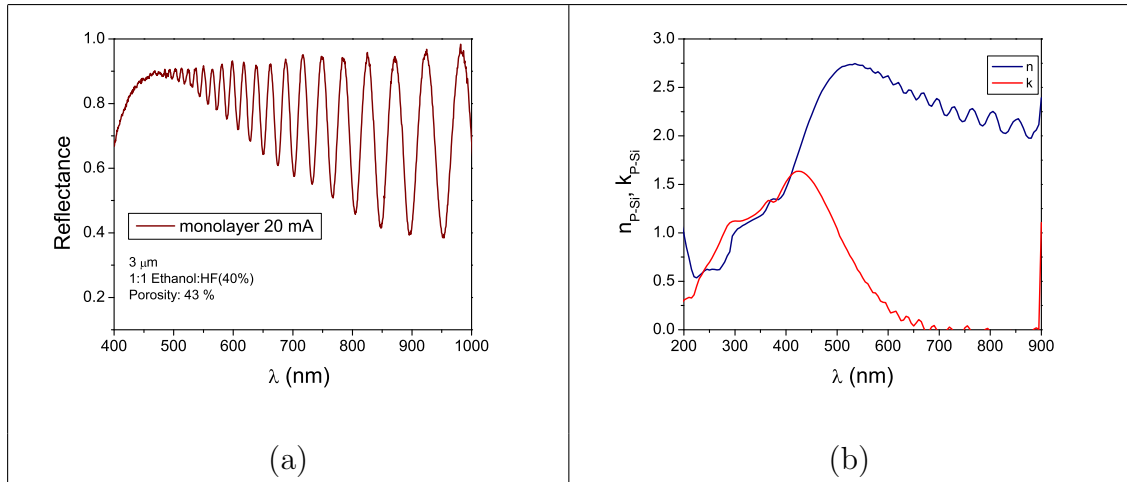


Figura 2.11: (a) Espectro de reflectancia de una monocapa de silicio poroso. (b) n y k obtenidos por elipsometría.

2.12 Detalles experimentales

2.12.1 Celda electroquímica

Como se describió previamente en el Capítulo 1, la formación del silicio poroso consiste en disolver los átomos de Si mediante una solución de ácido fluorhídrico. Al proceso electroquímico se le denomina anodización y hay diferentes tipos de celdas para llevarla a cabo. Cada tipo de celda tiene ciertas características y limitantes, y la utilización ya sea de una u otra depende de las condiciones en las cuales se desea llevar a cabo la anodización y del tipo de aplicación específica para la cual vaya a ser utilizado el dispositivo a base de SP.

2.12.2 Características de la celda utilizada

El diseño del cuerpo de la celda usada cumple los siguientes requerimientos: i) El área de la oblea de silicio expuesta al electrolito es de 1.18 cm^2 (esta es la superficie atacada en el proceso). Aunque lo conveniente es que el área atacada sea de 1 cm^2 , esto con el fin de que la corriente i que circule por la celda sea igual a la

densidad de corriente J y por lo tanto tener un mejor control en la fabricación del SP. Para nuestro caso, un área de 1.18 cm^2 es suficiente para realizar una buena caracterización de las muestras. ii) Que el contacto metálico sobre la oblea de Si este aislado de la solución de HF y también libre de óxido, además que el contacto metálico tenga unido un material que absorba las vibraciones del medio. iii) Que el ensamblado de la celda sea muy fácil y rápido. iv) Que permita un cierre hermético de todas las partes de la celda para que no se derrame la solución y además sea muy fácil de desmontar la muestra y evitar que ésta se ensucie.

La celda electroquímica está construida con un material muy resistente al electrolito usado. Para este diseño se utilizó teflón, ya que es el único material comercial que resiste al ácido fluorhídrico y porque las condiciones para realizar la anodización del silicio no requieren de un material transparente para la asistencia de luz. Las partes que componen el cuerpo de la celda se muestran en la figura (2.12). Para evitar la fuga del electrolito se utilizaron dos empaques en forma de anillo (o-ring) colocado entre la oblea y la parte (a) en la figura (2.12). Las dos piezas denotadas por (a) y (b) en la figura (2.12) fueron ensambladas por medio de 3 tornillos dispuestos en la pieza (a) y sujetadas mediante 3 tuercas tipo mariposa, las cuales proporcionan la presión necesaria para que las diferentes piezas de la celda queden unidas herméticamente, ver figura (2.12) (c). La parte posterior del electrodo que hace contacto con la oblea de silicio esta unida con un material que absorbe las vibraciones. El ensamble completo (incluyendo la oblea de silicio) de la celda se muestra en la figura (2.12) (derecha).

2.12.3 Electrodo

La celda utilizada solo requiere de dos electrodos, el cátodo y el ánodo. El cátodo esta constituido de un alambre de platino que fue arreglado en forma de espiral abarcando un área de 1 cm^2 , que es aproximadamente el diámetro del área atacada, ya que esta mostró la mejor uniformidad en las muestras comparada con una malla de platino rectangular que también fue usada. El ánodo, como se mencionó previamente, es por si mismo la oblea de Si. Se utilizaron diferentes tipos de oblea de Si cristalino

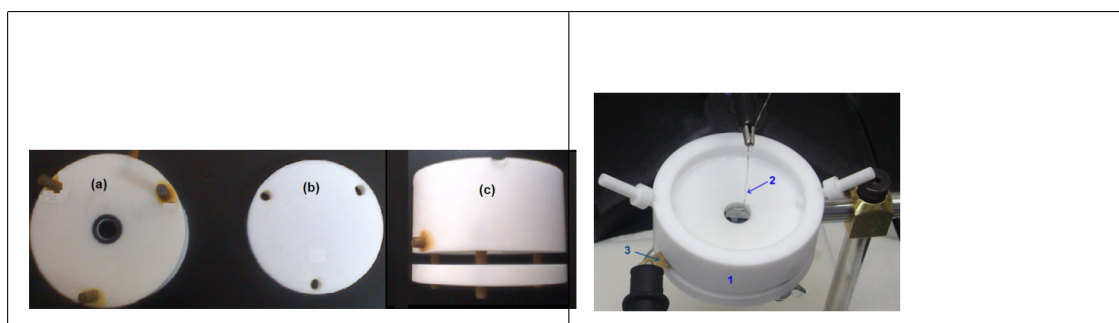


Figura 2.12: Partes que integran el cuerpo de la celda electroquímica de anodización de SP. La parte (a) expone la muestra al electrolito y se coloca sobre el o-ring, mientras que la parte (b) es para sujetar la oblea y el contacto de cobre. (c) muestra el ensamble de las dos partes (a) y (b), donde la oblea de Si y el contacto de cobre quedan entre las dos partes. Montaje completo (derecha) de la celda electroquímica usada para fabricar SP. 1) Cuerpo de la celda, 2) cátodo de platino y 3) ánodo de cobre.

tipo p, con características similares (ver tabla 2.4). Además, se empleó una lámina rectangular delgada de cobre sobre la parte posterior de la oblea (lado no pulido) como contacto para tener una mejor distribución de la corriente en la oblea de Si.

Espesor	500-550 μm	500 \pm 25 μm
Resistividad	0.01-0-0.02 $\Omega\text{-cm}$	0.007-0.013 $\Omega\text{-cm}$
Orientación	(100)	(100)
Dopante	p-boro	p-boro

Tabla 2.4: Características de las obleas utilizadas.

2.12.4 Fuente de corriente programable

Debido a que el rango de porosidad está determinado por la densidad de corriente aplicada, es necesario contar con una fuente de corriente que provea un rango de densidad de corriente muy amplio tanto para muy bajas corrientes como para muy altas corrientes. La fuente de corriente usada para el proceso de anodización en este trabajo es de la marca KEYTHLEY (Serie 2400) con las siguientes características: fuente de voltaje de $5\mu\text{V}$ a 210V; voltaje medido de 1μ hasta 211V. Fuente de co-

rriente de 50pA hasta 1.05A; corriente medida de 10pA hasta 1.055A. Resistencia medida de $100\mu\Omega$ ($<100\mu\Omega$ en resistencia manual) hasta $211M\Omega$. La máxima potencia de la fuente es de 22W. La fuente de corriente es controlada por un programa hecho en LABVIEW, desde el cual se importa un archivo de datos con perfiles de corrientes y tiempos (ver figura (2.13)).

2.12.5 Composición del electrolito

Como ya se mencionó en este capítulo, un punto importante para la anodización y consecuentemente para determinar el rango de porosidad de las muestras es la composición del electrolito, el cual se compone principalmente de ácido fluorhídrico y etanol en relación volumétrica de 1:1. La concentración de cada reactivo está determinada con base en un estudio realizado previamente, con el cual se puede obtener un mayor intervalo de porosidad y por consiguiente un mayor contraste en el índice de refracción, que es lo que nos interesa para obtener un mayor rango de omnidireccionalidad, como se explica en el siguiente capítulo. El etanol se utiliza para facilitar la remoción de las burbujas de H_2 dentro de los poros y sobre la superficie del SP, así como para incrementar el número de iones F^- disponibles en la solución mediante un incremento en la disociación iónica del HF.

2.12.6 Caracterización por gravimetría

En el apartado 2.11.1 y 2.11.2, se explica como determinar la porosidad y el espesor de las capas de SP por medio de análisis gravimétricos, esto es, conociendo las masas m_1 , m_2 y m_3 de las monocapas. Una vez conocido el espesor de las monocapas y el tiempo de ataque aplicado a las mismas, se calculó la velocidad de ataque de acuerdo a la fórmula $v = d/t$, para una determinada densidad de corriente. Cada punto en las gráficas de la figura (2.15)(a) representa una muestra con diferente densidad de corriente J aplicada en el proceso de anodización y todas las muestras para un mismo tiempo (20 minutos) de ataque. Posteriormente se ajustó una función a los puntos en ambas gráficas para obtener los valores de porosidad y velocidad de ataque para

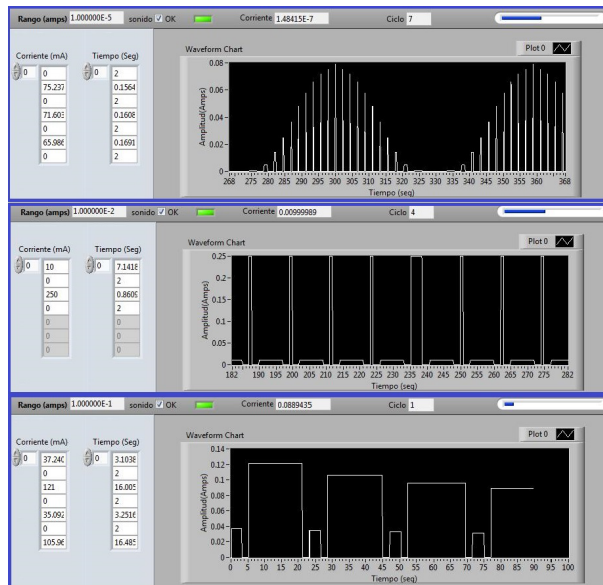


Figura 2.13: Programa en la Labview para generar diferentes perfiles de corrientes-tiempos para obtener perfiles de porosidades o índices de refracción de SP.

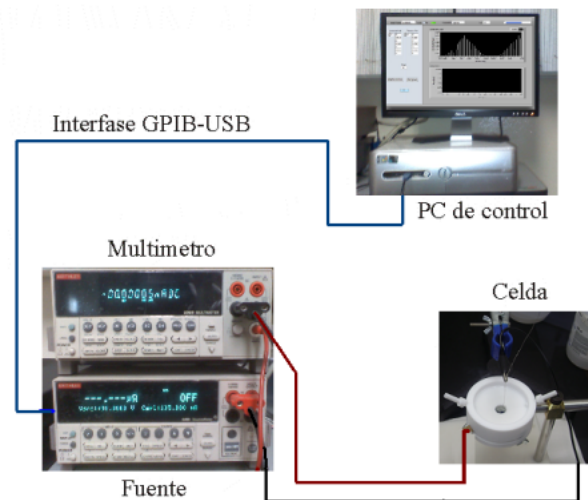


Figura 2.14: Esquema del montaje experimental para la anodización electroquímica.

las diferentes densidades de corriente permitidas por las condiciones de anodización (tipo de oblea y concentración de la solución electrolítica).

En resumen, para una densidad de corriente J dada, se recurre a ambas gráficas y se determina la porosidad P y la velocidad de ataque v respectivamente. Para un espesor d deseado, se calcula el tiempo de ataque t ($t=v/d$). Por lo tanto, si se desea fabricar una monocapa de SP de cierta porosidad con un determinado espesor, basta con recurrir a las gráficas de la figura (2.15) para determinar la densidad de corriente que le corresponde, velocidad de ataque y consecuentemente el tiempo, obteniendo para esa monocapa los datos (J,t) .

Una vez que se conoce la porosidad de la monocapa, es posible obtener su índice de refracción usando los métodos mencionados anteriormente. Comúnmente se usa el método de aproximación de medio efectivo de Bruggeman, donde para cada valor de porosidad P de la monocapa de SP, se calcula el índice de refracción n_{P-Si} de acuerdo a la ecuación 3.36 como se describe en el siguiente capítulo. En la mayoría de nuestros cálculos se usaron los datos de absorción del silicio cristalino, que son significantes en la región visible del espectro. Con esto se obtiene una gráfica de índices de refracción n_{P-Si} de las capas porosas en función de la longitud de onda como se muestra en la figura (2.15)(c).

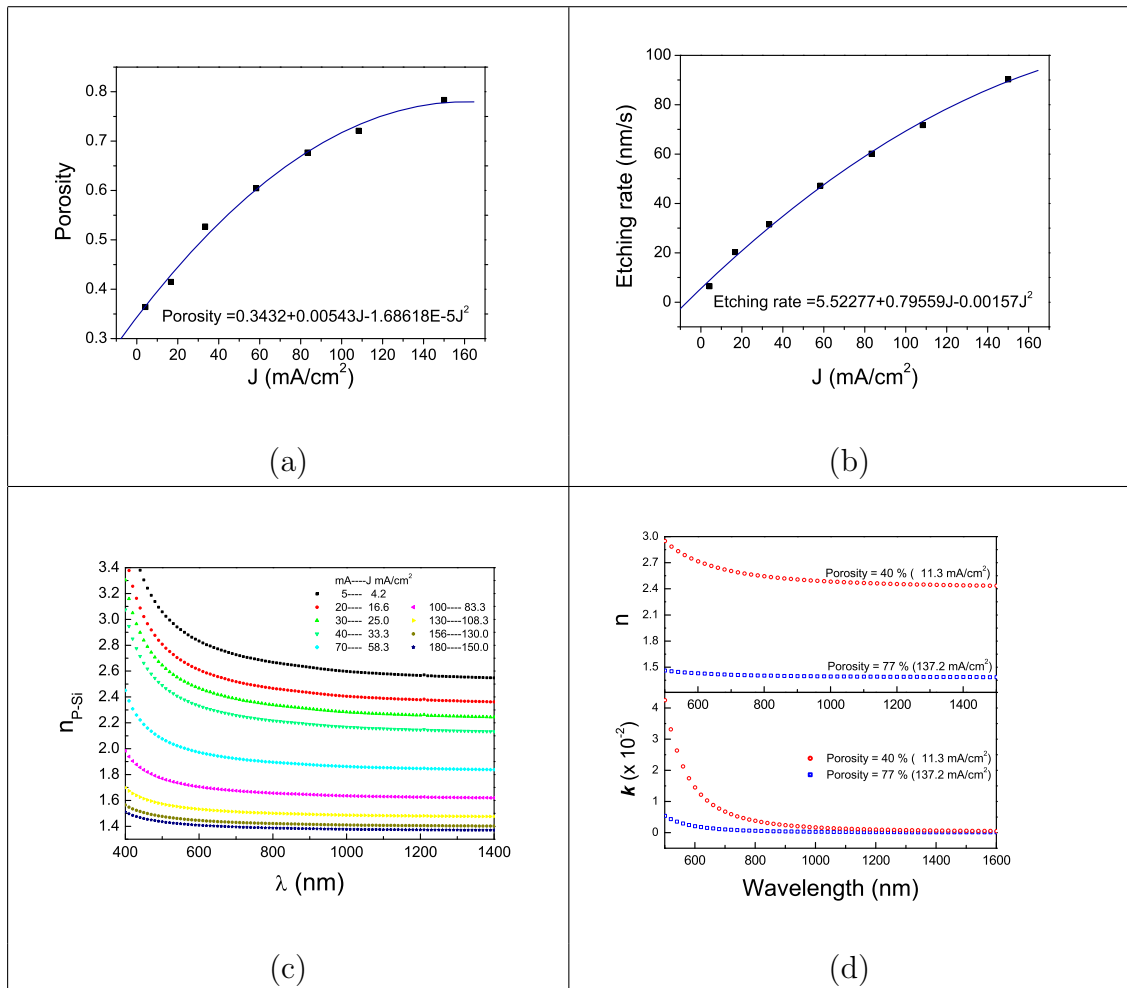


Figura 2.15: (a) Gráficas de porosidad y (b) velocidad de ataque como función de la densidad de corriente, determinadas por análisis gravimétricos; (c) Gráfica de índice de refracción del SP en función de la longitud de onda para distintas densidades de corriente (J). Nota: el índice de refracción del Silicio varía con la longitud de onda y n_{poroso} es calculado a partir de la gráfica de porosidad usando el método de aproximación de medio efectivo de Bruggeman. (d) índice de refracción n y coeficiente de extinción k en función de la longitud de onda para diferentes porosidades.

Capítulo 3

Sistemas ordenados

3.1 Propagación de la luz en sistemas de multicapas

Las propiedades ópticas de un cristal fotónico están directamente relacionadas a su relación de dispersión. En este sentido, las relaciones de dispersión o estructura de bandas fotónica (PBG) se han usado como herramientas para predecir sistemas con propiedades ópticas específicas y como un medio para interpretar la respuesta óptica de las estructuras fabricadas. Para la derivación de las relaciones de dispersión de un cristal fotónico se han usado diferentes conceptos de la física del estado sólido (tales como Zona de Brillouin, red recíproca, bandas prohibidas y permitidas, etc.) debido a la similaridad del problema de fotones en un sistema de índices refractivos que se repiten periódicamente y los electrones en un potencial periódico [139]-[142].

El punto de partida para determinar la estructura de bandas fotónica de un cristal fotónico son las ecuaciones de Maxwell, las cuales en ausencia de cargas o corrientes, y haciendo las combinaciones adecuadas de las mismas, se obtiene la siguiente ecuación de onda para sistemas ordenados:

$$\left[\nabla \times \nabla \times \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \varepsilon \right] \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = 0. \quad (3.1)$$

Para la amplitud del campo:

$$E(\mathbf{r}, t) = A \epsilon e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} e^{-i\omega t}, \quad (3.2)$$

donde ϵ es la polarización del campo, ε el tensor dieléctrico y c la velocidad de la luz en el vacío:

$$c = \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_0 \mu_0}}, \quad (3.3)$$

un medio óptico periódico se compone de materiales dieléctricos (y permeabilidades) cuyos tensores son una función periódica de \mathbf{x} , esto es:

$$\varepsilon(\mathbf{x}) = \varepsilon(\mathbf{x} + a), \quad (3.4)$$

la cual refleja la simetría traslacional del cristal.

La teoría de la propagación electromagnética en medios periódicos tiene una fuerte analogía con la teoría de los electrones en cristales y por lo tanto se adoptan los conceptos tales como ondas de Bloch, bandas prohibidas, ondas evanescentes, oscilaciones de Bloch, tunelamiento Zener, etc. En ambos casos (electrónico y óptico) la física de fondo es la misma, es decir, interferencia constructiva que surge debido a las reflexiones de Bragg en ciertas direcciones bien definidas. Por tal razón a los arreglos regulares de materiales con diferentes índices de refracción se les llaman cristales fotónicos.

En medios periódicos 3D, la Ec. (3.4) se satisface para cualquier vector \vec{a} que es combinación lineal de los vectores de la red \mathbf{a}_i , $\mathbf{a} = \sum_i m_i \mathbf{a}_i$, $\forall m \in Z$. Una diferencia ordinaria entre los cristales normales y los cristales fotónicos es la escala de la constante de red, la cual es de angstroms (\AA) para el primero y de micrómetros (μm) para el segundo. La simetría traslacional del medio permite tomar modos (normales) para el campo, tales como:

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_{\mathbf{K}}(\mathbf{x})e^{-i\mathbf{K}\cdot\mathbf{x}}, \quad (3.5)$$

donde

$$\mathbf{E}_{\mathbf{K}}(\mathbf{x}) = \mathbf{E}_{\mathbf{K}}(\mathbf{x} + a), \quad (3.6)$$

esta es la condición de Bloch, la cual nos lleva a la aplicación de un modelo de onda plana para un medio periódico siempre y cuando se use una nueva relación de dispersión:

$$\omega = \omega(\mathbf{K}). \quad (3.7)$$

El campo eléctrico en un cristal, obedece la ecuación de Helmholtz, la cual es derivada de la ecuación de onda en (3.1) después de una transformación de Fourier con respecto al tiempo:

$$\left[\nabla \times \nabla \times - \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon(\mathbf{x}) \right] \mathbf{E}(\mathbf{r}) = 0. \quad (3.8)$$

Esta ecuación usualmente se resuelve en el espacio de la red recíproca, donde ambos, campo y función dieléctrica pueden ser expandidos en series de Fourier:

$$\varepsilon(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{G}} \varepsilon_{\mathbf{G}} e^{-i\mathbf{G}\cdot\mathbf{x}}, \quad (3.9)$$

donde

$$\mathbf{G} = p_x \frac{2\pi}{a_x} \hat{\mathbf{x}} + p_y \frac{2\pi}{a_y} \hat{\mathbf{y}} + p_z \frac{2\pi}{a_z} \hat{\mathbf{z}}, p_i = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \quad (3.10)$$

los cuales son los vectores de la red recíproca. Por lo tanto el campo eléctrico puede ser expresado como ondas de Bloch:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = e^{-i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}} E_{\mathbf{K}}(\mathbf{r}), \quad (3.11)$$

esto es, ondas planas moduladas por $\mathbf{E}_{\mathbf{K}}(\mathbf{r})$ la cual es una función periódica de \mathbf{r} con la misma periodicidad como el potencial $\mathbf{E}_{\mathbf{K}}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}_{\mathbf{K}}(\mathbf{r} + a)$. Si el medio es homogéneo en la dirección x y y , y tienen una modulación periódica en z , entonces el resultado es de la forma:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = e^{-i(\mathbf{K}_x \cdot x + \mathbf{K}_y \cdot y)} e^{-i\mathbf{K}_z z} \mathbf{E}_{\mathbf{K}}(z), \quad (3.12)$$

donde $\mathbf{E}_{\mathbf{K}}(z)$ es una función periódica de z .

Las soluciones a las ondas de Bloch de la ecuación de onda periódica son delocalizadas, y se extienden sobre todo el cristal; la diferencia del campo en un punto de la red a otro es sólo un factor de fase (Ec. (3.11)). La probabilidad de encontrar un fotón en una posición dada es la misma en cualquier punto de la red. Este es el principal resultado de de la teoría de Bloch, para el caso de electrones y fotones.

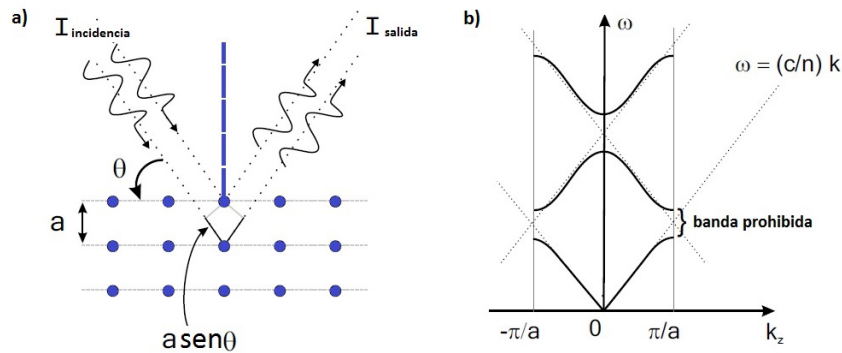


Figura 3.1: (a) Condición de Bragg para interferencia constructiva en reflexión y (b) relación de dispersión.

3.1.1 Estructura de bandas fotónica

Los valores absolutos de tales ondas de Bloch permanecen finitos para todos los valores de z propiciando que el número de onda \mathbf{K}_z sea real, esto a su vez es posible sólo si \mathbf{K}_z cae dentro de un intervalo cerrado sobre el eje real, el cual está separado por zonas prohibidas dentro de las que pueden existir regiones de frecuencias donde

\mathbf{K}_z llegue a ser un número complejo con parte imaginaria diferente cero por lo que las ondas de Bloch son evanescentes. Esas son las bandas prohibidas del medio periódico, en general, la luz que incide dentro de esta banda se reflejará totalmente. Intuitivamente, esto se refiere al caso donde cierto \mathbf{K}_z no satisface la condición de Bragg para interferencia constructiva, $m\lambda = 2a\sin\theta$, siendo m un entero y θ el ángulo de incidencia (ver figura (3.1)(a)).

La interferencia entre la onda incidente dispersada a primer orden con todos los siguientes ordenes dispersados es destructiva, después de una distancia de propagación del orden de la longitud de onda, el haz transmitido es completamente reducido lo que significa que ocurre una reflexión muy eficiente. Esta técnica es ampliamente usada para producir espejos de alta calidad. Por otro lado, cuando la interferencia es constructiva, la luz incidente se propaga en el medio casi sin atenuarse, como si éste fuera transparente; estas son las bandas permitidas (o pasa bandas) del sistema fotónico. La interferencia juega un papel central en la propagación de la luz en sistemas fuertemente correlacionados (tales como estructuras ordenadas).

Una completa periodicidad de $\lambda/2$ en el índice de refracción en 3D puede resultar en un gap prohibido en el espectro electromagnético cerca de la longitud de onda λ , a pesar de la dirección de propagación (banda fotónica prohibida en 3D). La banda prohibida fotónica es evidente en la relación de dispersión mostrada en la figura 3.1(b). Habitualmente en física del estado sólido el espectro mostrado se reduce a la zona de Brillouin fundamental en un intervalo de $\mathbf{K}_z = -\pi/a$ a $\mathbf{K}_z = \pi/a$, esta zona coincide con el intervalo de periodicidad de las relaciones de dispersión. La banda dispersiva de abajo puede ser aproximada con una función coseno simple de acuerdo a:

$$\omega(\mathbf{K}_z) \propto -\cos(\mathbf{K}_z a), \quad (3.13)$$

la cual es característica para modelos de "tight-binding" con interacciones solamente entre los vecinos más cercanos de la red. Asociando una relación de dispersión la cual se desvía de su valor en el espacio libre, esto es, $\omega(k) = c/nk$, que es una

modificación de la velocidad de grupo y de la densidad de estados, la velocidad de grupo es:

$$v_g(\mathbf{K}_z) = \frac{\partial \omega(\mathbf{K}_z)}{\partial \mathbf{K}_z}, \quad (3.14)$$

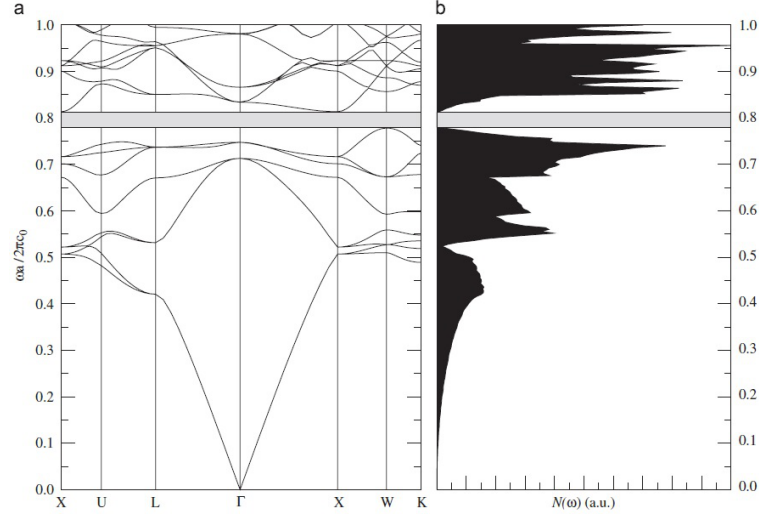


Figura 3.2: Estructura de bandas calculada para un cristal fotónico 3D (opal inverso de silicio) y la densidad local de estados (DLDE) [143].

la cual es fuertemente reducida en la vecindad de los bordes de las bandas hasta detener el transporte de energía para vectores- k iguales a $\pm m\pi/a$ cuando $v_g(\pm m\pi/a)=0$. En el modelo de "tight-binding" esto es evidente en la expresión explícita para la v_g obtenida relacionando las ecuaciones (6.14) y (6.15):

$$v_g(\mathbf{K}_z) \propto \sin(\mathbf{K}_z a), \quad (3.15)$$

la cual es cero si $\mathbf{K}_z = \pm m\pi/a$, en este caso se forma una onda estacionaria y el transporte no puede ocurrir.

La densidad de estados $\rho(\omega)$ se puede calcular de:

$$\rho(\omega) = \frac{1}{v_g(\omega)}, \quad (3.16)$$

la cual diverge en la proximidad de los bordes de la banda donde la velocidad de grupo tiende a cero. Dentro de la banda prohibida fotónica la velocidad de grupo ya no se define, en general, no ocurre transporte de energía y la densidad de estados tiende a cero.

3.2 Propagación de la luz en estructuras simples

3.2.1 Espejos omnidireccionales

Consideremos un material con capas alternantes de índices de refracción alto y bajo, con espesor óptico de las capas $\lambda/4$. Para ondas que se propagan a lo largo de la dirección de periodicidad del material puede existir una banda prohibida fotónica. Para la propagación de la luz dentro de la estructura bajo un cierto ángulo de incidencia con respecto a la normal, la posición del ancho de banda se recorre hacia el azul.

La propiedad de reflejar luz a un ángulo de incidencia arbitrario para algunas estructuras dieléctricas se asocia con la existencia de una banda prohibida fotónica completa [40], la cual puede existir únicamente en un sistema con una función dieléctrica que es periódica a lo largo de tres direcciones ortogonales. Sin embargo, un estudio teórico más reciente predijo que una condición para lograr la reflexión en un sistema periódico en una dimensión es la existencia de un traslape en el régimen de la banda prohibida en el espacio fase por arriba del cono de luz del medio desde donde es lanzada la onda electromagnética (medio homogéneo) [144].

Para entender mejor el comportamiento de un CF-1D consideremos un sistema periódico donde la luz incide desde un medio homogéneo caracterizado por un índice de refracción n_0 (tal como el aire con $n_0=1$). El sistema genérico es descrito por el perfil de índices de refracción (perfil cuadrado) como se muestra en la figura 3.3(a) donde n_1 y n_2 son los índices de refracción de las capas con espesores d_1 y d_2 respectivamente. La constante de red $a=d_1+d_2$ es el grosor de la celda unitaria.

La onda incidente tiene vector de onda $K=k_x\hat{e}_x+k_y\hat{e}_y$ y una frecuencia $\omega =c|k|/n_0$,

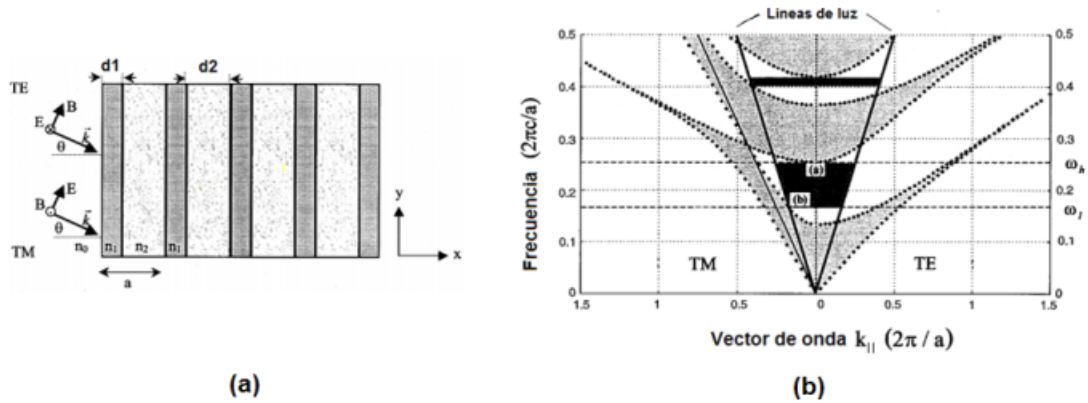


Figura 3.3: (a) Esquema de un sistema de multicapas. Donde n_1 , d_1 y n_2 , d_2 son los índices de refracción y espesores de la bicapa a , respectivamente, \mathbf{K} es el vector de onda incidente y la convención de modos electromagnéticos TE y TM. E y B son los campos eléctrico y magnético respectivamente. (b) Estructura de bandas proyectada de un estructura de multicapas junto con la línea de luz y la línea de Brewster, mostrando un rango de reflectancia omnidireccional en el primero y segundo armónico. Las áreas grises son estados que se propagan; las áreas blancas son estados evanescentes; y las zonas oscuras son el rango de reflectividad omnidireccional. Los parámetros del sistema son: $n_1=4.6$ y $n_2=1.6$, con una razón de espesores $d_2/d_1= 1.6/0.8$ [40].

donde \hat{e}_x y \hat{e}_y son los vectores unitarios en la dirección x y y respectivamente y c es la velocidad de la luz en el vacío. El vector de onda junto con la normal a la estructura periódica definen el plano de incidencia que permite distinguir entre dos modos electromagnéticos independientes: modo transversal eléctrico (TE) o polarización s y modo transversal magnético (TM) o polarización p . Para el modo TE, el campo eléctrico es perpendicular al plano, así como el campo magnético lo es para el modo TM (ver figura (3.3)(a)).

La dirección del campo eléctrico para el modo TE (o el campo magnético para el modo TM) en una capa particular dentro de la estructura puede ser escrita como una suma de dos ondas planas viajando en direcciones opuestas. Las amplitudes de las dos ondas planas en una capa particular de una celda están relacionadas con las amplitudes en la misma capa de una celda adyacente por una matriz unitaria de traslación $U^{(\alpha)}$ de 2×2 . Este método se describe brevemente en la siguiente sección.

En una estructura con un número infinito de capas, la simetría traslacional a

lo largo de la dirección perpendicular a las capas produce soluciones con ondas de Bloch de la forma:

$$E_K(x, y) = E_K(x) \exp(iKx) \exp(ik_y y), \quad (3.17)$$

donde $E_K(x, y)$ es una componente de campo, $E_K(x)$ es una función periódica con un periodo a y K es el número de onda de Bloch dado por [40],

$$K = \frac{i}{a} \ln\left(\frac{1}{2} \text{Tr}(U^{(\alpha)}) \pm \left\{ \frac{1}{4} [\text{Tr}(U^{(\alpha)})]^2 - 1 \right\}^{\frac{1}{2}}\right). \quad (3.18)$$

Las soluciones del sistema infinito pueden ser ondas propagándose o evanescentes, correspondientes a valores de onda de Bloch reales o imaginarios respectivamente. La solución de la ecuación (3.18) define la estructura de bandas para el sistema infinito $\omega(K, k_y)$. Es conveniente mostrar las soluciones de la estructura infinita proyectando la función $\omega(K, k_y)$ sobre el plano $\omega-k_y$. Un ejemplo de tal proyección se muestra en la figura 3.3(b), donde el vector de onda k_y (o vector de onda k_{\parallel}) es el vector de onda paralelo a la superficie de las capas. Las áreas grises son estados que se propagan en la estructura y corresponden a valores de K estrictamente reales, mientras que las áreas blancas representan regiones que contienen estados evanescentes. La forma proyectada de la estructura de bandas para la película multicapas puede ser entendida intuitivamente. En $k_y=0$, la banda prohibida para ondas propagándose a incidencia normal es recuperada. Para $k_y>0$, las bandas se curvan hacia arriba en frecuencia. Para $k_y \rightarrow \infty$, los modos llegan a estar fuertemente confinados en las capas con índice de refracción alto y no se acoplan entre las capas (y son por consiguiente independientes de k_x).

Para una estructura finita la simetría traslacional en la dirección paralela a las capas se preserva, mientras que en la dirección perpendicular a las capas ésta se rompe; en regiones donde K es imaginario el campo electromagnético se atenúa fuertemente. Conforme el número de capas se incrementa el coeficiente de transmisión para esta región decrece exponencialmente, mientras que la reflectividad se aproxima a la unidad.

Debido a que estamos interesados en ondas que se originan desde medios homogéneos externos a la estructura periódica sólo nos enfocaremos a la porción del espacio fase que está por arriba de la línea de luz. Las ondas que se originan desde medios homogéneos satisfacen la condición $\omega \geq ck_y/n_0$, donde n_0 es el índice de refracción del medio homogéneo y por consiguiente éstas deben de residir por arriba de la línea de luz ($\omega = ck_y/n_0$). Estados del medio homogéneo con $k_y=0$ corresponden a incidencia normal y aquellos que caen sobre la línea $\omega = ck_y/n_0$ con $k_x=0$ son incidentes con un ángulo de 90° .

El criterio necesario y suficiente para la reflectividad omnidireccional a una frecuencia dada, es que no existan estados que se transmitan en la estructura dentro del cono de luz, este criterio se cumple para el rango de frecuencias marcado en negro en la figura (3.3)(b). De hecho, el sistema mostrado descrito en la figura (3.3)(b) expone dos rangos de reflectividad omnidireccional. El rango omnidireccional es definido arriba por el borde de la banda a incidencia normal $\omega_{max}(k_x=\pi/a, k_y=0, \text{ punto } a \text{ en la figura } 3.3(b))$ y por abajo, por la intersección de la parte superior del modo TM permitido del borde de la banda con la línea de luz $\omega_{min}(k_x=\pi/a, k_y=\omega_{min}/c, \text{ punto } b \text{ en la figura } (3.3)(b))$ [40].

3.3 Método de la matriz de transferencia

Para el análisis teórico de los CFs se considera una estructura 1D que consiste de capas alternantes de SP de diferentes índices de refracción acopladas a un medio homogéneo en la interfase caracterizado por un índice de refracción n_0 . En la figura (3.4) se muestra el esquema de la estructura, donde n_1 y n_2 son los índices de refracción de las capas, h_1 y h_2 son los espesores de las capas respectivas y Λ es el periodo de la estructura ($\Lambda = h_1 + h_2$). La banda prohibida fotónica omnidireccional y el espectro de reflectividad de la estructura de multicapas se estudian por el método de la matriz de transferencia [145, 146].

La estructura dieléctrica esta definida por:

$$n(z) = \begin{cases} n_0, & z < z_0 \\ n_1, & z_0 < z < z_1 \text{ con } z_1 = z_0 + h_1 \\ n_2, & z_1 < z < z_2 \text{ con } z_2 = z_0 + \Lambda = z_1 + h_2 \\ \vdots & \\ n_s & z_{2N} < z \text{ con } z_{2N} = z_0 + N\Lambda = z_{2N-1} + h_2 \end{cases} \quad (3.19)$$

con $n_z = n(z + \Lambda)$. n_s es el índice de refracción del sustrato y n_0 el índice de refracción del medio incidente. Los espesores de las capas están relacionados en z_m por $h_m = z_m - z_{m-1}$ ($m=1\dots 2N$).

El campo eléctrico puede definirse como $E = E(z)e^{i(\omega t - \beta x)}$, donde su distribución se puede escribir:

$$E(z) = \begin{cases} A_0 e^{-ik_0 z(z-z_0)} + B_0 e^{ik_0 z(z-z_0)}, & z < z_0 \\ A_m e^{-ik_m z(z-z_m)} + B_m e^{ik_m z(z-z_m)}, & z_{m-1} < z < z_m \\ A'_s e^{-ik_s z(z-z_{2N})} + B'_s e^{ik_s z(z-z_{2N})}, & z_{2N} < z \end{cases} \quad (3.20)$$

donde k_{mz} es la componente z del vector de onda $k_{mz} = \omega n_m \cos \theta_m / c$ y θ_m es el ángulo entre la dirección de propagación y el eje z . A_m y B_m representan las amplitudes de las ondas en la interfase $z = z_m$, ver figura (3.4).

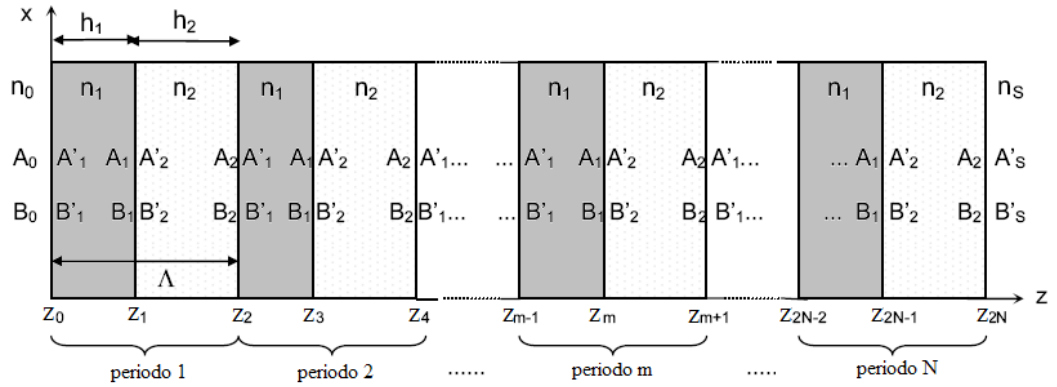


Figura 3.4: Esquema de un sistema de multicapas. $A(z)$ representa la amplitud de una onda viajando hacia la derecha y $B(z)$ la amplitud de una onda viajando a la izquierda. El espesor de cada capa es h_m , n_m es el índice de refracción y Λ el periodo. La estructura está acoplada a un medio homogéneo con índice de refracción n_0 (medio inicial) y n_s (medio final).

Las amplitudes de las ondas en las diferentes capas pueden relacionarse por:

$$\begin{pmatrix} A_{m-1} \\ B_{m-1} \end{pmatrix} = D_{m-1}^{-1} D_m \begin{pmatrix} A'_m \\ B'_m \end{pmatrix} = D_{m-1}^{-1} D_m P_m \begin{pmatrix} A_m \\ B_m \end{pmatrix}, \quad (3.21)$$

$m=1,2,\dots,2N+1$; donde la matriz D (matriz dinámica) y P (matriz de propagación) se pueden escribir como:

$$D_m = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ n_m \cos \theta_m & n_m \cos \theta_m \end{pmatrix} \quad (3.22)$$

para la onda TE;

$$D_m = \begin{pmatrix} \cos \theta_m & \cos \theta_m \\ n_m & -n_m \end{pmatrix} \quad (3.23)$$

para la onda TM y

$$P_m = \begin{pmatrix} e^{ik_m z h_m} & 0 \\ 0 & e^{-ik_m z h_m} \end{pmatrix}. \quad (3.24)$$

La relación entre A_0, B_0 y A'_s, B'_s se puede escribir como:

$$\begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix} = D_0^{-1} [D_1 P_1 D_1^{-1} D_2 P_2 D_2^{-1}]^N D_s = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A'_s \\ B'_s \end{pmatrix}, \quad (3.25)$$

donde N es el número de periodos en la estructura. La reflectividad de la película de multicapas se calcula de los elementos de la matriz de la siguiente manera:

$$R = \left| \frac{M_{21}}{M_{11}} \right|^2. \quad (3.26)$$

Podemos obtener la relación de dispersión, para cada ángulo de incidencia para las polarizaciones TE y TM, de la matriz característica de un periodo de la estructura:

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix}_{n-1} = D_1^{-1} D_2 P_2 D_2^{-1} D_1 P_1 \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix}_n = \begin{pmatrix} S & T \\ U & V \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix}_n. \quad (3.27)$$

La ecuación (3.27) muestra la matriz característica de un periodo (dos capas) de la estructura con índices de refracción n_1 y n_2 . Las amplitudes se relacionan en el periodo $n - 1$ con el periodo n .

De acuerdo con el teorema de Floquet, las soluciones de las ecuaciones de onda para un medio periódico [146] son de la forma $E(z, x) = E_K(z)e^{-i\beta x}e^{-iKz}$, donde E_K es periódico $E_K(z + \Lambda) = E_K(z)$.

La constante K es el número de onda de Bloch. Tomando en cuenta la forma de las matrices D y P es posible obtener la estructura de bandas a partir de los elementos de la matriz característica de la ecuación (3.27), la cual se escribe como:

$$\cos K\Lambda = \frac{1}{2}(S + V) = \cos k_1d_1 \cos k_2d_2 - \frac{1}{2}\phi \sin k_1d_1 \sin k_2d_2, \quad (3.28)$$

donde $\phi = \frac{k_{2z}}{k_{1z}} + \frac{k_{1z}}{k_{2z}}$ para ondas TE y $\phi = \frac{n_2^2 k_{1z}}{n_1^2 k_{2z}} + \frac{n_1^2 k_{2z}}{n_2^2 k_{1z}}$ para ondas TM.

La ecuación (3.28) nos da la relación de dispersión entre ω , β y K , donde $\beta = \omega n_m \sin \theta / c$.

Para observar la banda prohibida fotónica de las multicapas se calcula la relación de dispersión para todos los ángulos de incidencia, obteniendo la estructura de bandas proyectada.

Usando los cálculos de la matriz de transferencia es posible simular la distribución de campo eléctrico dentro de la estructura. El campo eléctrico a lo largo de la dirección z para determinada frecuencia se puede expresar como:

$$E(z, \omega) = \{1 + r(\omega)\}\mathcal{M}_{11}^k + \gamma_0\{1 - r(\omega)\}\mathcal{M}_{12}^k, \quad (3.29)$$

donde $M_{\alpha\beta}$ son los elementos de la matriz de transferencia de la primera a la k -ésima interfase y $r(\omega)$ es el coeficiente de reflexión de la estructura. Como se puede ver a partir de la ecuación (3.29), el coeficiente de reflectividad de la estructura completa debe ser calculado antes de evaluar la amplitud del campo dentro de la estructura. Por lo tanto la intensidad es simplemente el cuadrado del campo eléctrico $|E|^2$ el cual es normalizado a la amplitud de la señal incidente.

3.3.1 Respuesta resuelta en el tiempo

Una vez que se han calculado las amplitudes $r(\omega)$, $t(\omega)$ y $E(z, \omega)$ para cada onda monocromática a una cierta frecuencia ω , también es posible obtener la respuesta óptica de un haz de luz coherente que incide desde la izquierda sobre la estructura fotónica. Es posible describir el haz de luz por medio de su perfil de frecuencias con $g(\omega)$, que usualmente es un pulso Gaussiano. Para calcular la amplitud de la luz reflejada con fase $R(\omega)$, sólo multiplicamos $g(\omega)$ por la función de transferencia en el dominio de las frecuencias de acuerdo a:

$$R(\omega) = r(\omega)g(\omega). \quad (3.30)$$

La amplitud de la reflectancia resuelta en el tiempo se puede calcular usando la siguiente expresión [5, 7]:

$$r(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} g(\omega)r(\omega)e^{-i\omega t}d\omega. \quad (3.31)$$

Mediante este formalismo se pueden obtener la intensidad de campo eléctrico dependiente del tiempo y de las coordenadas dentro de la estructura como sigue:

$$E(z, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} E(\omega, z)g(\omega)e^{-i\omega t}d\omega, \quad (3.32)$$

siendo $E(\omega, z)$ los estados de dispersión del sistema y $g(\omega)$ un pulso incidente con una función espectral Gaussiana en el dominio de frecuencias:

$$g(\omega) = \frac{\hbar}{\sqrt{\pi}\delta} \exp \left[- \left(\frac{\hbar\omega - E_0}{\delta} \right)^2 \right], \quad (3.33)$$

donde E_0 es la energía del fotón del pulso y δ es el ancho del pulso. El parámetro δ controla la duración del pulso el cual debe tener un valor cercano al periodo de las Oscilaciones de Bloch. La expresión (3.31) es válida sólo para tiempos no mayores a la duración del pulso incidente [5].

3.4 Métodos de aproximación del medio efectivo

Generalmente los materiales de silicio poroso son descritos como una mezcla de aire, silicio y en algunos casos dióxido de silicio. Desde el punto de vista de la óptica, en el rango visible y el infrarrojo cercano del espectro electromagnético, el SP puede ser especificado como un medio efectivo cuyas propiedades ópticas dependen de los volúmenes relativos del silicio, del medio que llena el poro y en algunos casos óxido de silicio.

El índice de refracción esperado para el silicio poroso es menor que el del volumen de Si (oblea) y disminuye con el incremento en la porosidad. Las propiedades generales del índice de refracción del silicio poroso son: i) cuando la densidad de corriente se incrementa, el índice de refracción n del SP tiende al del aire; ii) capas con la misma porosidad, tienen el mismo n ; iii) una variación grande de n es producida al variar la densidad de corriente; iv) el SP formado sobre sustratos altamente dopados muestran variaciones mayores de n que el SP formado por sustratos poco dopados [147].

Existen diferentes teorías de aproximación del medio efectivo tales como Maxwell-Garnett, Looyenga y Bruggeman [119, 148, 149], las cuales permiten determinar el índice de refracción del SP. Por ejemplo, la fórmula ampliamente usada de Bruggeman [150, 151] consiste de la siguiente ecuación simétrica:

$$f \frac{\epsilon_1 - \epsilon_{eff}}{\epsilon_1 + 2\epsilon_{eff}} + (1 - f) \frac{\epsilon_2 - \epsilon_{eff}}{\epsilon_2 + 2\epsilon_{eff}} = 0, \quad (3.34)$$

donde f es la fracción de volumen de uno de los componentes, ϵ_1 y ϵ_2 son las funciones dieléctricas de los componentes y ϵ_{eff} es la función dieléctrica efectiva de los materiales mezclados. La permitividad dieléctrica es $\epsilon = n^2 - k^2$, donde k es el coeficiente de extinción. Para un medio transparente o un medio ligeramente absorbente, $k \ll n$, así se obtiene que $n = \sqrt{\epsilon}$. En consecuencia, el índice de refracción efectivo es descrito por:

$$P \frac{n_{poro}^2 - n_{SP}^2}{n_{poro}^2 + n_{SP}^2} + (1 - P) \frac{n_{Si}^2 - n_{SP}^2}{n_{Si}^2 + n_{SP}^2} = 0. \quad (3.35)$$

Debido a que la fracción de volumen de los espacios vacíos es igual a la porosidad de la muestra, $f=P$, por lo que, para la mezcla de aire y silicio se obtiene:

$$n_{SP} = 0.5[3P(1 - n_{Si}^2) + (2n_{Si}^2 - 1) + ((3P(1 - n_{Si}^2) + (2n_{Si}^2 - 1))^2 + 8n_{Si}^2)^{0.5}]^{0.5}. \quad (3.36)$$

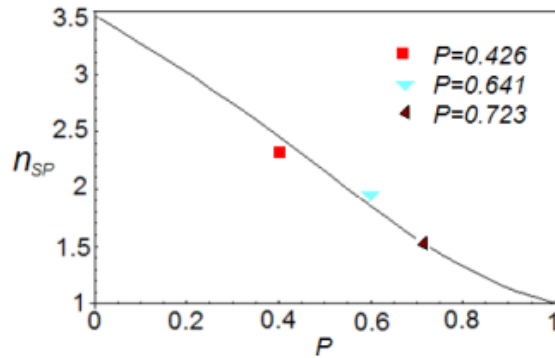


Figura 3.5: Gráfica de índice de refracción contra valor de la porosidad. Para un $\lambda=1250$ nm correspondiente a $n_{Si}=3.51$. Los símbolos corresponden a valores distintos de porosidad P .

La dependencia del índice de refracción del silicio poroso n_{SP} con la porosidad P , definida por la ecuación (3.36), se ilustra en la figura (3.5). El valor elegido para el índice de refracción del silicio es igual a 3.5. Se observa que cuando la porosidad P vale cero, el índice de refracción del silicio poroso n_{SP} es igual al índice de refracción del silicio n_{Si} .

El índice de refracción $n(\lambda)$ y el coeficiente de extinción $k(\lambda)$ se pueden obtener usando el modelo de Cauchy, el cual es útil para materiales dieléctricos (con absorción exponencial), lejos de las bandas de absorción [59].

Capítulo 4

Escaleras de Wannier-Stark y oscilaciones de Bloch

4.1 Rompiendo la simetría traslacional

En esta sección pretendemos comprender la dinámica de los fotones cuando los cristales fotónicos se someten a un gradiente en alguno de sus parámetros de diseño, y para esto, comenzamos con el caso para electrones en un semiconductor. Cuando un paquete de ondas se encuentra en una cadena unidimensional de átomos sometida a un campo eléctrico se producen movimientos ondulatorios de dicho paquete que tienen lugar a causa de las reflexiones de Bragg en los extremos de las regiones de Brillouin del sistema. Esto es válido siempre que el campo eléctrico no sea demasiado intenso de forma que pueda existir cierta probabilidad de saltar a otra banda. Este fenómeno conocido como Oscilaciones de Bloch fue predicho teóricamente por Zener en 1934, sin embargo, la observación experimental del mismo fue posible hasta 1992 [152]. Los recientes avances tecnológicos han hecho posible el estudio experimental de las oscilaciones de Bloch, lo que ha renovado el interés por el tema tanto a nivel teórico como experimental. También se ha mostrado el fenómeno de las oscilaciones de Bloch en otros sistemas tales como nanotubos de carbono [153, 154].

4.1.1 Fundamento teórico

En el estudio del movimiento de los electrones en sólidos cristalinos bajo la acción de un campo eléctrico, el tratamiento semi-clásico del problema supone que el momento en la red cristalina del electrón, p , satisface la ecuación:

$$\hbar\dot{\vec{p}} = -e\vec{E}, \quad (4.1)$$

donde \vec{E} es el campo eléctrico aplicado. Dada la igualdad anterior el momento \vec{p} debe aumentar por efecto del campo eléctrico hasta que se cumpla la condición de Bragg para la difracción por la red. En este caso el electrón se refleja y cambia el sentido de su movimiento, efectuando un movimiento periódico denominado oscilación de Bloch, lo cual es válido siempre que el campo eléctrico no sea muy intenso tal que pudiera existir una probabilidad finita de realizar una transición a otra banda, como ya se ha mencionado. Los trabajos teóricos de Bloch y Zener [1] acerca del fenómeno anterior permiten predecir las oscilaciones espacio-temporales de electrones en potenciales periódicos sujetos a un campo eléctrico. Estas oscilaciones, que reciben el nombre de oscilaciones de Bloch, y sólo se producen si la coherencia electrónica no se rompe mediante procesos de colisión [23]. En el caso de un potencial periódico unidimensional sometido a un campo eléctrico E , el periodo y amplitud de dichas oscilaciones están dados por [155]:

$$\tau_B = h/eEd, \quad (4.2)$$

$$A_B = \Delta/eE, \quad (4.3)$$

donde d es el periodo de la red y Δ es la anchura de la banda en la que se mueve el electrón.

Esta dinámica está alejada del movimiento acelerado del electrón sometido a una fuerza eléctrica que se esperaría de acuerdo con la física clásica. Puesto que el electrón se encuentra dentro de una red cristalina, el vector de la red recíproca \vec{K} no puede tomar un valor indefinido, sino que se encuentra acotado por la anchura de banda correspondiente. Esta anchura viene dada por:

$$\Delta = 2\pi/d. \quad (4.4)$$

La fuerza que actúa sobre el electrón debido al campo eléctrico se puede obtener a partir del cuasimomento del electrón \vec{p} . En el sistema mencionado aquí, el campo eléctrico es constante y por tanto podemos escribir:

$$\vec{F} = \frac{\vec{p}(t) - \vec{p}(0)}{t}, \quad (4.5)$$

luego:

$$\vec{p}(t) = \vec{F}t + \vec{p}(0). \quad (4.6)$$

El cuasimomento \vec{p} se relaciona con el vector de la red recíproca \vec{K} mediante:

$$\vec{p}(t) = \hbar\vec{K}, \quad (4.7)$$

y de ahí es posible escribir la ecuación 4.6 como:

$$\vec{K}(t) = \frac{\vec{F}(t)}{\hbar} + \vec{K}(0). \quad (4.8)$$

Al encontrarnos en una red cristalina, los vectores $\vec{K}(t)$ y $\vec{K}(0)$ son equivalentes cuando la diferencia entre ambos es equivalente a la anchura de la banda en la que se encuentran. Esto sucede transcurrido un tiempo τ que podemos calcular mediante las ecuaciones (4.4) y (4.8), dando como resultado:

$$|\vec{K}(t) - \vec{K}(0)| = \Delta = 2\pi/d, \text{ y } |\vec{K}(t) - \vec{K}(0)| = |\vec{F}|t/\hbar \Rightarrow$$

$$|\vec{F}|t/\hbar = 2\pi/d. \quad (4.9)$$

Por tanto, transcurrido un tiempo τ que cumpla la relación anterior, el estado del electrón vuelve a la situación inicial, esto es, el electrón está describiendo un movimiento periódico en el tiempo con un periodo τ igual a:

$$\tau = \frac{2\pi\hbar}{dF} = \frac{h}{eEd}, \quad (4.10)$$

que es precisamente el que adelantamos en la ecuación (4.2). Existen otras aproximaciones más sofisticadas para obtener el periodo de oscilación que conducen al mismo resultado. Así, algunos trabajos se basan en la aplicación del teorema de la aceleración [156], y otros realizan una descripción del fenómeno basándose en los estados de resonancia de Wannier-Stark [157]. La evolución de un paquete de ondas a lo largo del tiempo en un sistema con potencial periódico sometido a un campo eléctrico muestra diferentes características en función de la situación inicial del mismo. Si el paquete de ondas está inicialmente localizado alrededor de un sitio determinado de la red, dicho paquete se dispersa en el espacio regresando a su forma original tras un tiempo dado por la expresión (4.2), sin embargo el centro del paquete de ondas permanece fijo lo que implica que no se expande uniformemente sino que permanece localizado en el espacio. Este fenómeno se conoce con el nombre de localización dinámica [158, 159]. Por el contrario, si se considera un paquete de ondas que no esté inicialmente localizado, el centro del paquete sí oscila en el espacio con un periodo y amplitud dados por las ecuaciones (4.2) y (4.3), respectivamente. La existencia de las oscilaciones de Bloch fue objeto de debate durante las décadas siguientes a su predicción teórica. El desarrollo de la tecnología láser de frecuencia ultracorta, así como los avances en técnicas de fabricación de semiconductores o la invención de superredes de semiconductores, facilitó su observación experimental [160]. Esto se debe a que dichas redes poseen capas de materiales semiconductores que se alternan de manera que se consiguen superestructuras con potenciales periódicos grandes. La probabilidad de que tengan lugar las oscilaciones en dicho material sin que se produzcan reflexiones en el mismo es mayor que en otro tipo de materiales. Previamente a la detección de las oscilaciones de Bloch se observó su equivalente en el espacio de frecuencias: la escalera de Wannier-Stark [161]. Las oscilaciones de Bloch también se han observado en ondas de materia, esto es, para átomos de Cesio ultra-fríos preparados en el estado fundamental de un potencial periódico inducido ópticamente en presencia de una excitación externa similar a un campo eléctrico constante [10]. Los átomos conducidos por una fuerza

inercial constante llevan a cabo oscilaciones de Bloch. También se han observado experimentalmente oscilaciones de Bloch para el caso de condensados de Bose-Einstein cargados dentro de una red óptica unidimensional fuera de resonancia y acelerada por un aumento gradual "chirping" de la frecuencia entre los dos haces de la red [12]. Así mismo se han observado fenómenos equivalentes a estas oscilaciones en sistemas de fibras ópticas [162]. Los avances experimentales han permitido desarrollar distintas técnicas para detectar estas oscilaciones en los últimos años [163].

El fenómeno se puede aproximar también a un esquema de bandas donde el potencial lineal inclina las bandas de energía; la conservación de la energía restringe el espacio permitido para el movimiento del electrón. En un cristal convencional, el electrón puede moverse libremente sin ser dispersado (invarianza traslacional), pero cuando las bandas son curvadas, éste encontrará un borde de la banda la cual lo reflejará como se muestra en la figura (4.1).

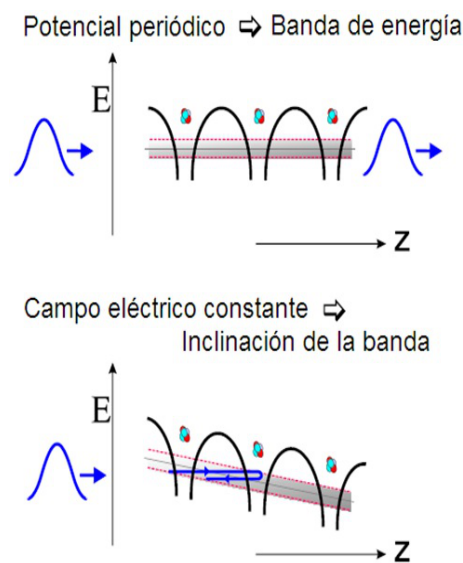


Figura 4.1: Esquema del movimiento de electrones en ausencia (arriba) y presencia (abajo) de un campo eléctrico externo DC. Esquema tomado de [164].

4.1.2 Oscilaciones de Bloch ópticas

En la introducción de este trabajo, ya se ha mencionado el concepto de oscilaciones de Bloch para fotones de manera breve. A continuación explicamos con detalle los conceptos que se relacionan con el fenómeno y que son tomados del caso electrónico.

Las oscilaciones de Bloch son un efecto íntimamente relacionado con la naturaleza ondulatoria de las partículas cuánticas. Esta es la base de la analogía electrón-fotón y puede ser sobreentendido fácilmente si uno piensa en la oscilación de Bloch como una reflexión de Bragg dependiente de la posición. Este punto de vista es análogo a la descripción previa, esto es, el análogo del espacio real en la representación del momento del cristal.

El electrón dentro del cristal y sujeto a un campo eléctrico comienza a moverse hacia regiones de energía potencial más baja y así conserva la energía total. Posteriormente, cuando el potencial decrece la conservación de la energía implica que el momento del cristal tiene que aumentar. Este proceso sube hasta el punto cuando la longitud de onda de De Broglie asociada al electrón iguala la longitud de onda de la red, $2d\sin\theta = n\lambda$, llevando así a una reflexión de Bragg del paquete de ondas [165]. El electrón es entonces empujado hacia regiones de energía potencial más alta, así el momento del cristal decrece, hasta alcanzar la siguiente resonancia de Bragg donde el electrón invertirá su dirección de propagación y así sucesivamente. Las órbitas que realiza el electrón son cerradas, y las oscilaciones en el espacio real son las oscilaciones de Bloch. Una simetría traslacional parcial implica que existe una pequeña familia de esas resonancias, las escaleras de Wannier-Stark, desplazadas por n -constantes de red y con una diferencia de energía igual a la caída de potencial por periodo eE_0d .

La descripción anterior es perfectamente aplicable para el caso de ondas de luz, en el cual la partícula es un fotón con su longitud de onda asociada, donde ahora el papel del campo eléctrico es reemplazado por un gradiente lineal o no-lineal en la constante dieléctrica (ver Fig. (4.2)).

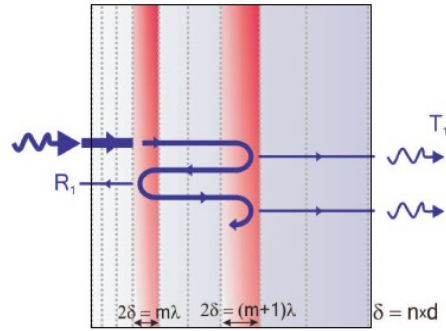


Figura 4.2: Oscilaciones de Bloch como reflexiones de Bragg dependientes de la posición. El paquete de ondas se propaga en la multicapa, hasta que una reflexión de Bragg ocurre. Entonces se propaga hacia atrás, hasta que una nueva reflexión de Bragg ocurre. Esta es una oscilación de Bloch. Esquema tomado de [164].

4.1.3 Sistemas 1D propuestos para observar OB ópticas

Existen diferentes métodos para inclinar la estructura de bandas y así poder observar oscilaciones de Bloch dependiendo del gradiente aplicado, esto es, del aumento gradual de alguna de las propiedades de la celda unitaria, que puede ser de forma lineal o no lineal como se muestra a continuación.

Por ejemplo la formación de Escaleras de Wannier-Stark y Oscilaciones de Bloch puede ocurrir en sistemas donde el índice de refracción varía exponencialmente [166]. En la Figura (4.3) se muestra el perfil de los potenciales para el caso electrónico (semiconductores en presencia de campo electrónico) y fotónico cuando no existe un potencial externo, cuando se le aplica un potencial externo y su correspondiente estructura de bandas. La dependencia de la posición en la estructura de bandas para el caso electrónico y fotónico se observa en la figura (4.4). La figura (4.4)(a) muestra los bordes de la banda de energía como una función de x en la superred de semiconductores. De forma similar, la figura (4.4)(b) muestra los bordes de la banda de energía del sistema de multicapas de Bragg que presenta un gradiente exponencial. Para ambos casos el periodo de las oscilaciones se mantiene constante.

Otro ejemplo interesante para observar oscilaciones de Bloch, donde puede ser

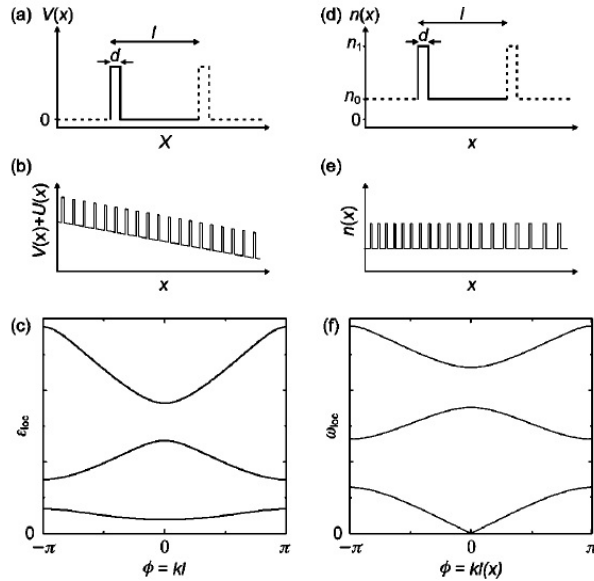


Figura 4.3: (a) Perfil de la energía potencial $V(x)$ de la celda unitaria de una superred uniforme de semiconductores. (b) Perfil de la energía potencial de la superred de semiconductor en presencia de un campo eléctrico uniforme. (c) Representación de la zona reducida de la estructura de bandas ϵ_{loc} con energía local de la superred en un campo eléctrico uniforme. (d) Perfil del índice de refracción $n(x)$ de la celda unitaria de una estructura de Bragg. (e) Perfil del índice de refracción de una estructura de Bragg con un gradiente de forma exponencial. (f) Representación de la zona reducida de la estructura de bandas en la frecuencia local ω_{loc} de la estructura con gradiente [166].

sintonizado el periodo de oscilación es un sistema donde se ha introducido un gradiente no-lineal a lo largo del crecimiento de la estructura 1D (ver figura (4.5)) [8]. El gráfico (izquierda, ver figura (4.5)) muestra la modificación lenta de la estructura de bandas local a través de la estructura, que surge de la modulación no-lineal del índice de refracción. Las áreas negras y grises corresponden a los gaps locales, donde no aparecen estados fotónicos (incidencia normal). Note que la pendiente de los bordes de la banda no es constante. En el gráfico del "centro" de la figura (4.5) se muestra el espectro de reflectancia que revela propiedades relacionadas con las OB y el efecto Zener. Finalmente en la "derecha" del gráfico (ver figura (4.5)) se muestra la intensidad del campo eléctrico dentro de la estructura (a lo largo de la dirección z). Las resonancias horizontales son los niveles de Wannier-Stark re-

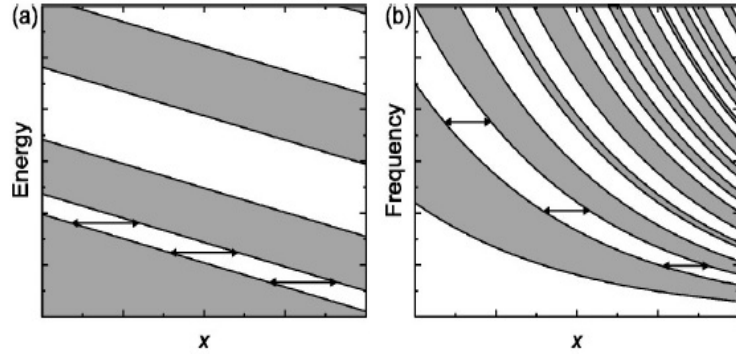


Figura 4.4: (a) bandas de energía (blanco) y bandas prohibidas (gris) de la estructura de multicapas mostrada en la figura (4.3)(b) como función de la posición. (b) bandas de frecuencia (blanco) y bandas prohibidas (gris) de la estructura de Bragg con incremento exponencial en los índices de refracción mostrada en la figura (4.3)(e). En ambos casos las líneas sólidas con flechas indican la extensión de las OB a energías particulares o frecuencias [166].

queridos para las oscilaciones de Bloch intrabanda. Las resonancias aparecen dentro de la banda confinadas dentro de las bandas prohibidas locales, definidas como en la figura de la (izquierda). Cuando consideramos energías del fotón decrecientes se observa un incremento gradual del espaciamiento entre los niveles, junto con un corrimiento espacial del centro de las oscilaciones de Bloch. Esto es debido a la curvatura introducida en la distribución del índice de refracción.

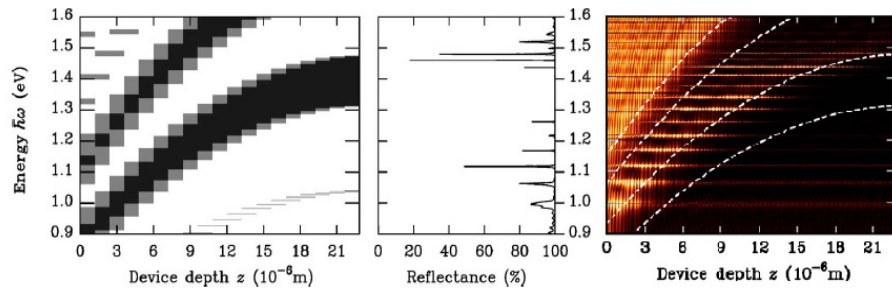


Figura 4.5: (izquierda) Modificación de la estructura de bandas, (centro) espectro de reflectancia y (derecha) distribución del campo eléctrico que muestra las resonancias de Wannier-Stark para la estructura con gradiente no-lineal en los índices de refracción. Adaptado de [8].

4.2 Estructuras simples

El fenómeno de las EWS apareció por primera vez en mecánica cuántica al estudiar una partícula cargada en presencia de un potencial unidimensional de la forma [6, 161]

$$V(x) = V_d(x) + Eex, \quad (4.11)$$

donde $V_d(x)$ es un potencial periódico de periodo d y Eex es el potencial de la partícula de carga e en la presencia de un campo eléctrico constante de intensidad $-E$. El potencial de la ecuación (4.11) tiene la siguiente propiedad:

$$V(x + nd) = V(x) + nEed, \quad (4.12)$$

siendo n un entero arbitrario.

El sistema teórico propuesto inicialmente para observar el fenómeno de las EWS para ondas electromagnéticas [6] es difícil de realizar experimentalmente, debido a que se necesita un alto contraste de las funciones dieléctricas que conforman la estructura. En este sistema se considera una ecuación similar a la ecuación (4.12) pero ahora para la función dieléctrica ε .

$$\varepsilon(z + nd) = \varepsilon(z) + ngd, \quad (4.13)$$

donde g es la pendiente, d el periodo, n un entero arbitrario y z la dirección de crecimiento de la estructura. En la primera capa la función dieléctrica cumple que $\varepsilon(z) = z_i g + 1 + h$, en el intervalo $[z_{i-1}, z_i]$ para i -impar, denotado como p_1 . En la siguiente capa la función dieléctrica tiene el valor $\varepsilon(z) = z_i g + 1$ en el intervalo $[z_{i-1}, z_i]$ para i -par, denotado como p_2 . Donde $d = p_1 + p_2$ es el periodo de espesor constante de la celda unitaria. Los puntos z_i son tales que $z_{i+2} = z_i + d$ (ver figura (4.6)).

El perfil que sigue la función dieléctrica en la ecuación (4.13) satisface una ecuación similar a la ecuación de Schrödinger. La propagación de las ondas elec-

tromagnéticas con polarización transversal y con frecuencia ω , son descritas por la siguiente ecuación:

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial z^2} + \varepsilon(z)k^2 \right] F(z) = Q^2 F(z), \quad (4.14)$$

siendo $F(z)$ cualquiera de las componentes del campo electromagnético, $Q^2 = k_x^2 + k_y^2$ y $k = \omega/c$. Las cantidades $\varepsilon(z)$ y Q^2 juegan el papel del potencial y de la energía respectivamente en la ecuación de Schrödinger. Si se reemplaza z por $z - nd$ en la ecuación (4.14), se obtiene:

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial z^2} + \varepsilon(z)k^2 \right] F'(z) = (Q^2 + ngdk^2)F'(z), \quad (4.15)$$

donde $F'(z) = F(z - nd)$. La ecuación (4.15) es similar a la ecuación (4.14) excepto por el término sumado a Q^2 . Por lo tanto, si para un valor dado de Q^2 , digamos Q_0^2 , existe una solución no trivial de (4.14), entonces debería existir una familia de soluciones (escaleras de Wannier-Stark) para otros valores de Q^2 dadas por $Q_0^2 + ngdk^2$. Por consiguiente, la distancia entre dos soluciones adyacentes de aquella familia (medida en unidades de k^2) es gd , esto es, podemos elegir el número de resonancias deseadas cambiando el valor de gd [6], por ejemplo, si deseamos observar veinte resonancias entonces $gd = 1/20$, etc.

4.2.1 Propagación de la luz en estructuras Simples

La propagación de la luz en cristales fotónicos comúnmente es fácil de investigar en estructuras de multicapas 1D debido a que son más fáciles de fabricar y permiten una descripción teórica exacta. El cristal fotónico más simple se genera al superponer periódicamente materiales con diferente función dieléctrica. Para el caso de nuestra estructura que denotamos como "simple", y para un valor de la pendiente $g=0$, obtenemos una estructura de bandas donde aparecen bandas prohibidas donde la luz no se puede propagar. En la figura (4.7) se muestra el cálculo de la intensidad del campo eléctrico dentro de la estructura como función de la energía del fotón. La gráfica muestra el mapa de estados dispersivos, para un sistema ordenado (cristal

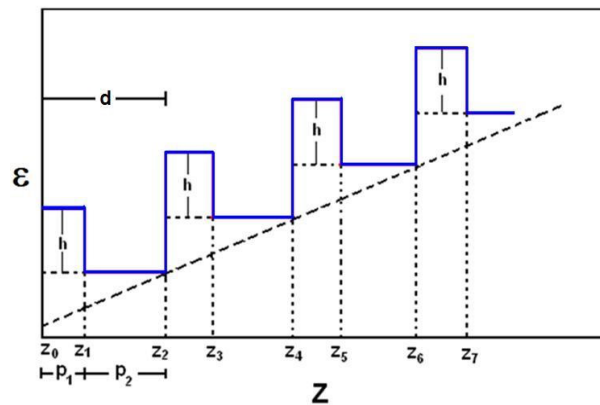


Figura 4.6: Dibujo esquemático de $\epsilon(z)$ (líneas sólidas).

fotónico), donde se ve claramente un rango donde no hay estados localizados. Por otra parte, también se observan algunas zonas donde existen estados localizados espacialmente que se extienden desde la primera capa hasta la última, y los cuales tienen un tiempo de vida largo y pueden almacenar mucha energía. En el lado derecho de la figura (4.7) se muestra el espectro de reflectividad, donde se confirma las zonas donde la reflectividad es del 100% (band gap), así como también las zonas de máxima transmisión, que en algunos casos, es de casi el 100 %.

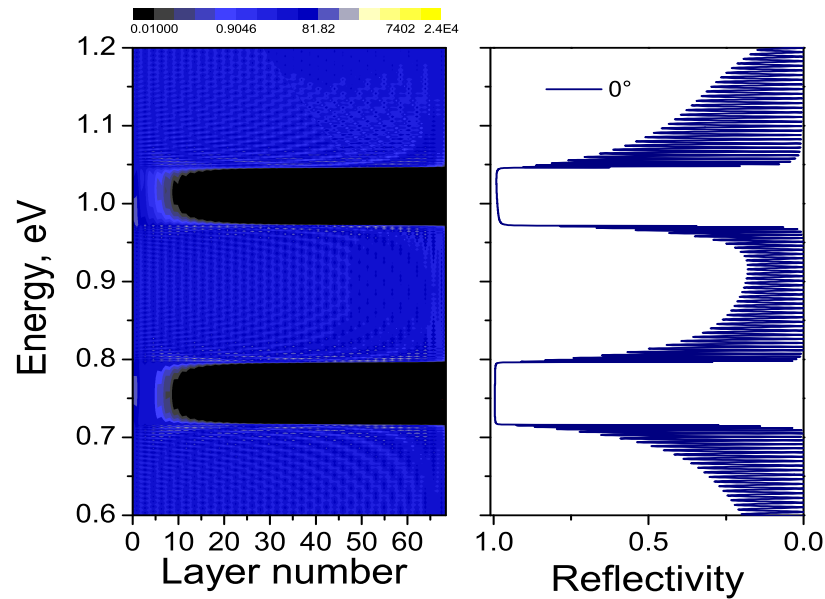


Figura 4.7: Distribución de la intensidad del campo eléctrico dentro de una estructura Simple como función de la energía del fotón. Los parámetros de la estructura son: ($n_A=2.08$, $d_A=180$ nm, y $n_B=1.28$, $d_B=1620$ nm), con una pendiente $g=0$.

4.3 Estructuras Doblemente-periódicas DP

La idea de las estructuras doblemente periódicas se ha analizado teóricamente y ha sido explorada experimentalmente en muchos sistemas diferentes [167, 168, 59]. Recientemente, las estructuras DP se han fabricado usando multicapas de SP [59]. En resumen, una estructura DP (ver figura (4.7)) está compuesta de dos subestructuras A y B , repetidas alternadamente para obtener la secuencia $A_n B_m A_n B_m \dots A_n B_m = (A_n B_m)^N$. Las subestructuras A_n y B_m están a su vez formadas por dos unidades periódicas diferentes, a y b respectivamente, donde los subíndices n y m son el número de periodos a y b en las subestructuras A y B . Ambas subestructuras (a y b) consisten de un par de capas con índices de refracción alto y bajo. El espesor de la capa a doble es $d_a = d_1 + d_2$, donde d_1 y d_2 son los espesores para las capas con índice de refracción alto (n_1) y bajo (n_2) respectivamente. De forma

4.3.1 Propagación de la luz en estructuras DP

Como ejemplo, en la figura (4.9) se muestra la distribución de la intensidad del campo eléctrico dentro de una estructura DP como función de la energía. La gráfica muestra el mapa de estados dispersivos, para una secuencia DP $(A_3B_6)^N$, donde $N=1,2,3,4$. El mapa de estados dispersivos se obtiene mediante un procedimiento basado en las matrices de transferencia, el cual se explica con detalle en el capítulo anterior. El mapa de estados dispersivos para una estructura $(A_3B_6)^N$ muestra $N - 1$ modos resonantes, los cuales se observan claramente localizados sobre toda la estructura, desde la primera capa hasta la última, y aparecen separados por bandas prohibidas (mini band-gaps, ver figura (4.9)).

Por ejemplo, para el caso de la estructura $(A_3B_6)^3$, el desdoblamiento de las frecuencias de resonancia de los dos "defectos de capa" acoplados son visibles en el mapa de estados dispersivos, donde también se observan ambas polarizaciones (s,p) para un ángulo de incidencia de la luz de 20° como se muestra en la figura (4.10)(a). También se puede ver que los estados resonantes aparecen separados por minigaps. La contraparte dinámica de la figura (4.10) es un tunelamiento resonante del fotón, el cual oscila entre los dos defectos de capa (microcavidades). Si un paquete de onda corto de luz incide por izquierda a la interfase, entonces, este se tunelará dentro de la estructura de multicapas, la intensidad en el primer defecto crecerá y comenzará a oscilar entre los dos sitios de los defectos por tunelamiento resonante (ver figura (4.10)(b)).

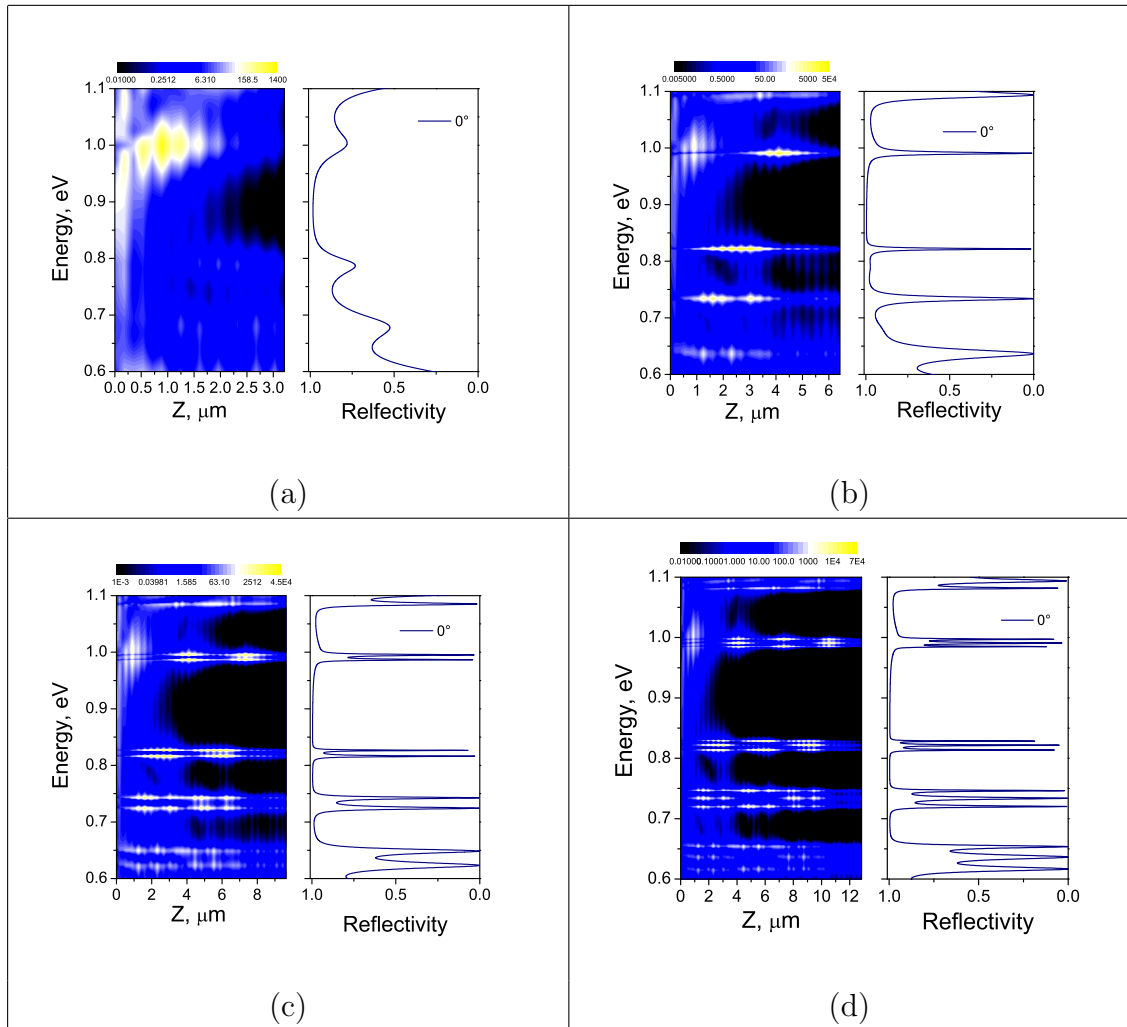


Figura 4.9: Distribución de la intensidad del campo eléctrico dentro de las estructuras para el caso cuando no hay gradiente aplicado, esto es, para $\Delta d = 0\%$ (situación de minibandas planas). (a) estructura $(A_3B_6)^1$. (b) $(A_3B_6)^2$, (c) $(A_3B_6)^3$ y (d) $(A_3B_6)^4$, respectivamente.

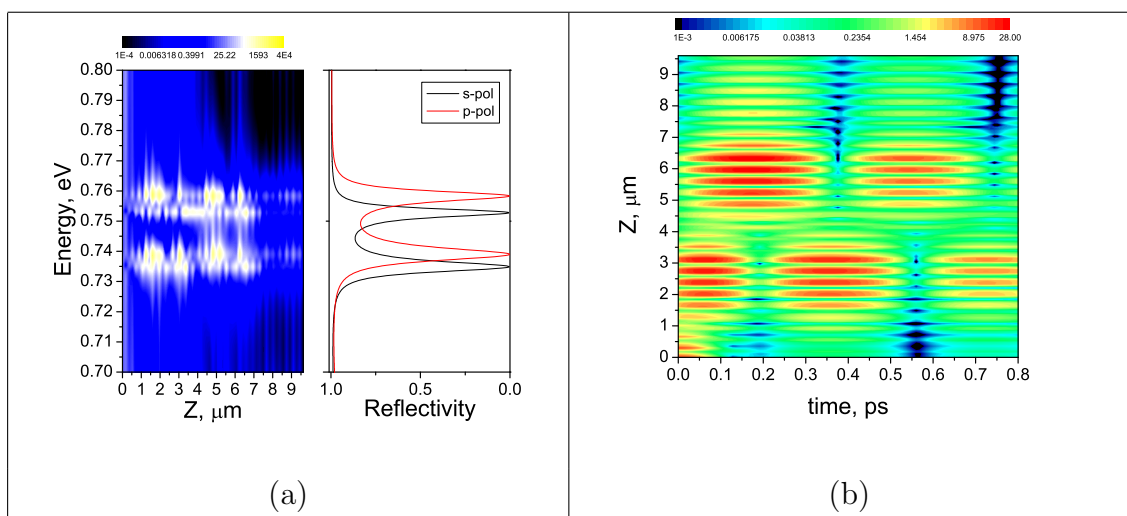


Figura 4.10: (a) Distribución de la intensidad del campo eléctrico dentro de la estructura $(A_3B_6)^3$ para $\Delta d = 0\%$ (situación de minibandas planas) a 20° de incidencia de la luz. (b) Simulación de la respuesta resuelta en el tiempo de un pulso gaussiano (de 30 nm de ancho de pulso) que incide sobre la estructura. El paquete de ondas entra desde la izquierda en el tiempo igual a cero y entonces oscila por tunelamiento resonante entre las dos cavidades.

Capítulo 5

EWS y OB en estructuras Simples

5.1 Variación no-lineal en los índices de refracción

Como ya mencionamos en el capítulo 4, existen diferentes maneras de romper la simetría traslacional. En particular una de las estructuras que se estudian en este trabajo es la estructura más simple como cristal fotónico que se compone de capas alternantes de constantes dieléctricas y que se repiten periódicamente, en las cuales se introduce un gradiente lineal en la función dieléctrica (gradiente no lineal en el índice de refracción). En este capítulo se presentan los resultados correspondientes a una estructura "simple" a la cual se le han introducido diferentes gradientes lineales en la función dieléctrica de sus componentes, pero no-lineales cuando se toman en cuenta los índices de refracción de la misma. En el capítulo 4 se describe a detalle como generar una estructura "simple" (ver figura 5.1(a)) y como se pueden observar escaleras de Wannier-Stark si los parámetros que generan la estructura se seleccionan adecuadamente. Se puede notar que el perfil de la estructura en la figura 5.1(b) es equivalente al de la figura 5.1(a) debido a que en las ecuaciones de Maxwell la permitividad dieléctrica es definida como $\epsilon = n^2 - k^2$, donde k es el coeficiente de extinción. Para un medio transparente o poco absorbente $k \ll n$, por lo que $n = \sqrt{\epsilon}$.

En el sistema de la figura 5.1(a) se describe un medio con una función dieléctrica $\epsilon(z)$, en la cual, para una frecuencia dada ω , depende sólo del parámetro z y puede

ser expresada como la suma de una función periódica de periodo d más un término lineal con pendiente g , donde, $\epsilon(z)$ satisface la siguiente ecuación (4.13): $\epsilon(z + nd) = \epsilon(z) + ngd$. La figura 5.2 muestra los espesores ópticos para la estructura con los parámetros dados en la figura (5.1), donde también se observa que el cambio es no-lineal.

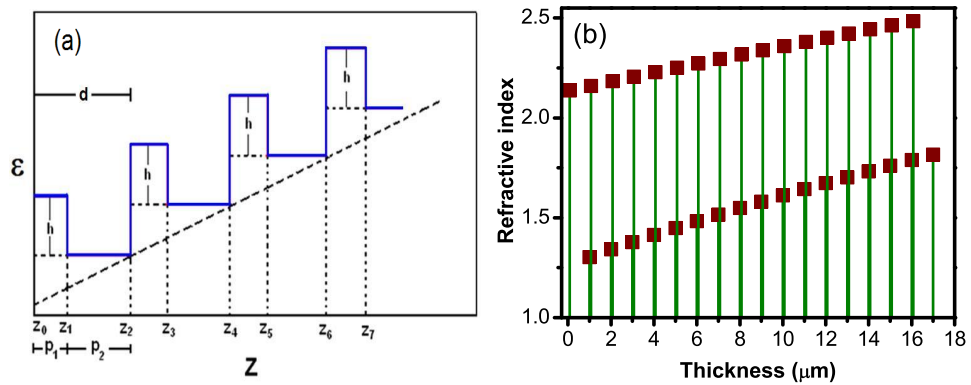


Figura 5.1: (a) Dibujo esquemático de $\epsilon(z)$ (líneas sólidas). (b) Perfil de los índices de refracción correspondiente a la estructura fotónica discutida en este capítulo. La estructura (denotada como E1) se compone de 34 bicapas. El espesor de cada capa ($d_A=0.07 \mu\text{m}$, $d_B=0.93 \mu\text{m}$) se mantiene constante, mientras el índice de refracción de las capas A y B se incrementan gradualmente de 2.13 a 2.48, y de 1.30 a 1.81 respectivamente.

A continuación se muestra el diseño cuidadoso de estructuras fotónicas 1D con un gradiente no-lineal en el índice de refracción como se muestra en la figura (5.1)(b). Las estructuras que se consideran aquí son equivalentes a las estructuras de la figura (5.1)(a), las cuales nos permiten la demostración de las escaleras de Wannier-Stark. El sistema consiste de N bi-capas, A and B, con diferentes porosidades de tal forma que el índice de refracción de tales capas se incrementa gradualmente a lo largo de la dirección de crecimiento de la estructura. El espesor $d_1(d_2)$ de la capa A(B) es constante; pero su índice de refracción varía de n_A^i (n_B^i) a n_A^f (n_B^f) de acuerdo a la ecuación (4.13). Para llevar a cabo este trabajo se analizaron cuatro estructuras con diferentes parámetros. La estructura denotada como E1, fue diseñada en la

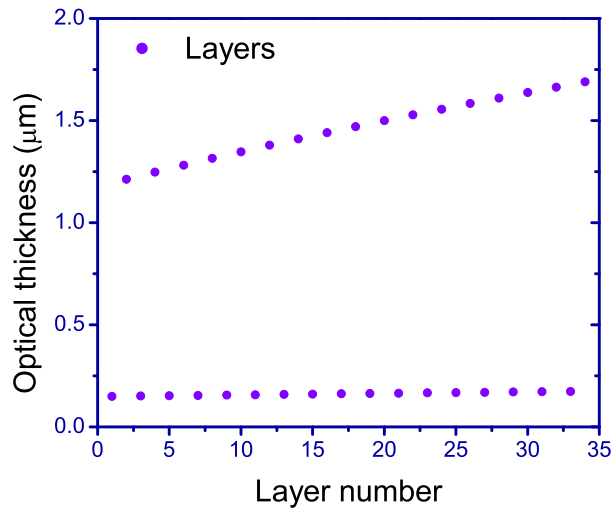


Figura 5.2: Dibujo esquemático donde se muestra el perfil de espesores ópticos para las capas que conforman la estructura anterior.

región visible del espectro electromagnético y está conformada por 34 bicapas, con espesores $d_A = 0.07\mu m$ y $d_B = 0.93\mu m$. Los índices refractivos para las capas A y B se incrementan gradualmente de 2.13 a 2.48 y de 1.30 a 1.81 respectivamente. La variación gradual entre los valores máximos y mínimos de los índices refractivos constituyentes, el número de capas y el número de resonancias deseadas depende de los parámetros, esto es: $h = 2.96$ y $gd = 0.1$ (≈ 10 EWS), ver figura (5.1)(a) y ecuación (4.13); dichos valores se grafican en la figura (5.1)(b) y corresponden a la variación mostrada en la figura (5.1)(a). Las estructuras denotadas como $E2$, $E3$ y $E4$ se diseñaron en la región del infrarrojo cercano. La estructura $E2$ consiste de 38 bicapas con espesores $d_A = 0.19\mu m$ y $d_B = 1.61\mu m$; para este caso, los índices de refracción para las capas A y B se incrementan gradualmente de 2.10 a 2.49 y de 1.30 a 1.87 respectivamente. Por supuesto, los diferentes parámetros en las estructuras corresponden a diferentes valores de los parámetros h y gd , que aparecen en la ecuación (4.13), los cuales pueden ser controlados durante el proceso de crecimiento con silicio poroso. Para el caso de la estructura denotada como $E3$, ésta se compone por 38 bicapas con espesores de las capas A y B igual a $d_A = 0.18\mu m$ y $d_B = 1.62\mu m$,

y los valores mínimo y máximo de los índices de refracción son 2.08 a 2.49 y 1.28 a 1.87 respectivamente. Se puede observar que los parámetros anteriores son muy similares a los de la estructura $E2$, con diferencia solamente en el número de bicapas de la estructura. Para dicha estructura, $h = 2.75$ y la pendiente $gd = 0.05$, los cuales generan un espectro en transmitancia con 20 picos resonantes. Finalmente, la estructura $E4$ se compone de 29 bicapas con espesores de las capas A y B de $d_A = 0.20\mu m$ y $d_B = 2.30\mu m$, con valores mínimo y máximo de índices de refracción de 2.19 a 2.49, y de 1.28 a 1.74 respectivamente, donde los parámetros de diseño son $h = 3.2$ y $gd = 0.05$, que también corresponde a un sistema donde aparecen 20 picos resonantes en el espectro de transmitancia. Las longitudes de onda donde fueron diseñadas todas las estructuras y sus principales parámetros son listados en la tabla 5.1.

Sample	λ (nm)	Number of bi-layers	Thickness (d_A), (d_B)	Total thickness	n_A , P(A)	n_B , P(B)
$E1$	561	17	0.07, 0.93 μm	17 μm	2.13-2.48 40-50%	1.3-1.81 40-80%
$E2$	1500	38	0.19, 1.61 μm	34.2 μm	2.1-2.49 40-50%	1.3-1.87 40-80%
$E3$	1250	38	0.18, 1.62 μm	68.4 μm	2.08-2.49 40-50%	1.28-1.87 40-80%
$E4$	1500	29	0.20, 2.30 μm	72.5 μm	2.19-2.49 39-50%	1.28-1.74 38-81%

Tabla 5.1: Principales parámetros de fabricación

La figura (5.3) muestra el espectro de transmitancia calculado para las diferentes estructuras como función del $\sin^2\theta$, cada estructura es diseñada a la longitud de onda de interés. Las estructuras $E1$, $E2$, $E3$ y $E4$ se diseñaron para manifestar EWS en el visible e infrarrojo cercano del espectro electromagnético, respectivamente. Las EWS se observan como picos resonantes igualmente espaciados en el espectro de transmitancia *vs* $\sin^2\theta$. Como se puede observar en las estructuras $E1$ y $E2$,

los espectros presentan 10 picos resonantes, los cuales son consistentes con el valor del parámetro $gd = 0.1$, para el cual las estructuras fueron diseñadas. De manera similar, para las estructuras $E3$ y $E4$, se observan 20 picos resonantes igualmente espaciados y que son obtenidos con los valores de $gd=0.05$. Debido a que existe una limitación en los índices refractivos, no es posible observar un alto factor de calidad de los picos resonantes.

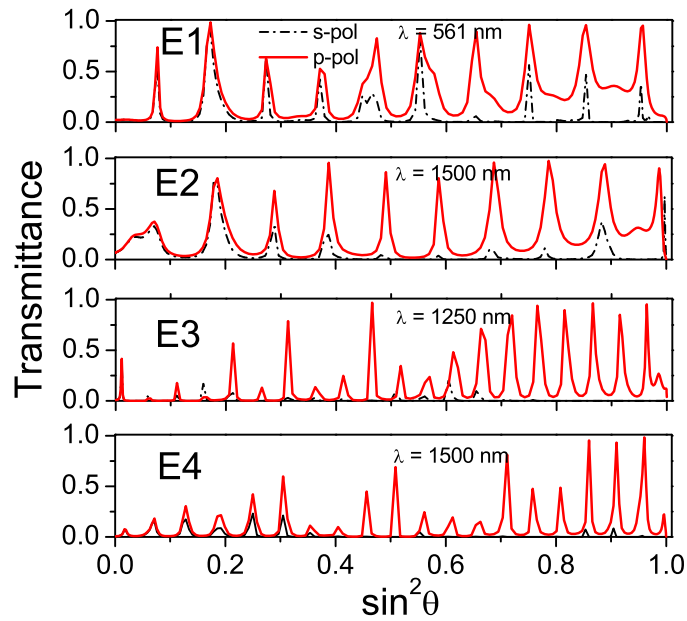


Figura 5.3: Gráficas de la transmitancia con función del $\sin^2\theta$, para diferentes estructuras etiquetadas como $E1$: $\lambda=561$ nm, donde $h = 2.96$, $gd=0.1$, $d=1\mu\text{m}$ y $N=34$. $E2$: $\lambda=1500$ nm, $h=2.8$, $gd=0.1$, $d=1.8\mu\text{m}$ y $N=38$. $E3$: diseñada para $\lambda=1250$ nm, $h=2.75$, $gd=0.05$, $d=1.8\mu\text{m}$ y $N=38$. $E4$: diseñada en $\lambda=1500$ nm, $h=3.2$, $gd=0.05$, $d=2.5 \mu\text{m}$ y $N=29$.

La figura (5.4) muestra el espectro de transmitancia en función del ángulo de incidencia (θ) para la estructura $E4$, así como también los ángulos en función de los picos resonantes consecutivos. Por consiguiente un sistema que presenta EWS debe comportarse de manera similar al gráfico de la figura (5.4) (derecha).

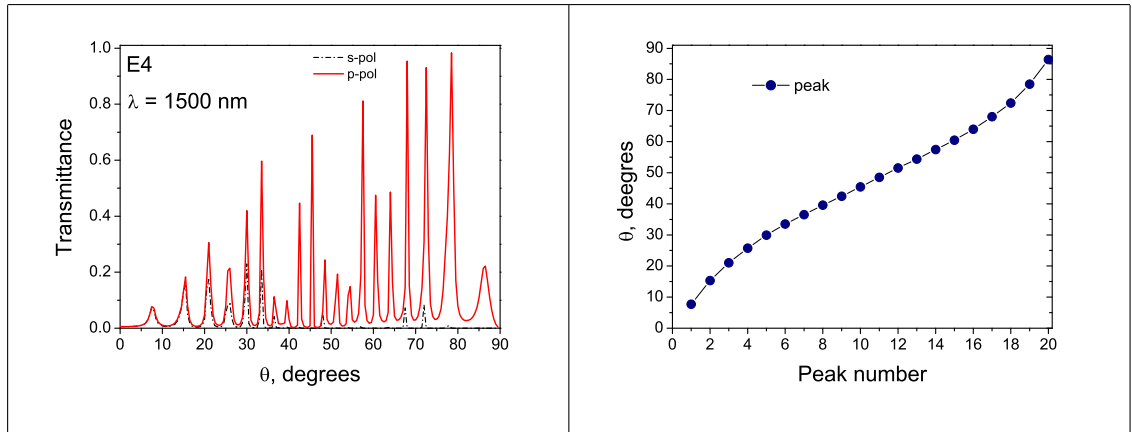


Figura 5.4: (izquierda) Espectro de transmitancia en función del ángulo de incidencia para la estructura $E4$. (derecha) Gráfico que muestra el comportamiento de la posición de los picos para un rango de ángulos

5.1.1 Filtros que dependen del ángulo de incidencia

Si ahora realizamos un análisis de las estructuras descritas anteriormente, esto es, las que presentan EWS en la transmitancia como función del $\sin^2\theta$, pero ahora dejamos fijo alguno de los ángulos de incidencia donde aparecen dichas resonancias y hacemos un barrido en las longitudes de onda, ¿será posible observar las EWS? o ¿cómo cambiarán los espectros de reflectancia o transmitancia en función de la energía para todos los ángulos donde anteriormente se observaron resonancias?, a continuación trataremos de dar respuesta a las preguntas y explicaremos el comportamiento de los espectros de reflectancia en función de la energía del fotón. En la figura (5.5) se muestra un esquema de como sería un filtro donde su espectro de reflectancia o transmitancia es el mismo para ciertos valores de ángulos de incidencia (por ejemplo, los valores de los ángulos que aparecen en el gráfico de la figura (5.4)).

Las figuras (5.6)-(5.8) muestran los espectros de reflectancia en función de la energía del fotón para las primeras tres estructuras $E1$, $E2$ y $E3$ respectivamente. Para el caso de la estructura $E1$ se consideraron cuatro diferentes ángulos de incidencia de la luz, esto es, $\theta=15.99^\circ$, correspondiente a la primera resonancia que aparece en el espectro de transmisión en función del $\sin^2\theta$, donde $\lambda=561$ nm ($E=2.2$

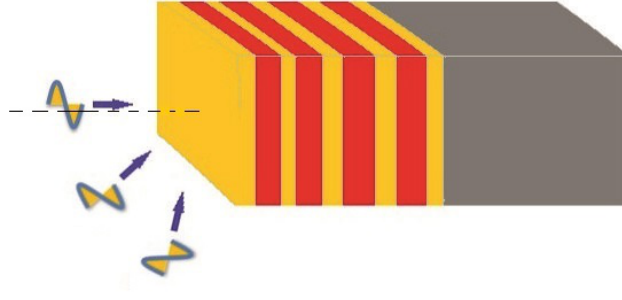


Figura 5.5: Esquema de un filtro basado en SP que depende del ángulo de incidencia.

eV), se puede ver que existen 16 picos resonantes de 1800 a 2500 meV . Para el siguiente ángulo $\theta=24.49^\circ$ el FWHM de los picos resonantes cambia pero la posición en energía de los picos coinciden en gran medida con los picos del espectro anterior (tomado a $\theta=15.99^\circ$). Se puede observar el mismo efecto para los ángulos siguientes ($\theta=31.49^\circ$ y $\theta=37.49^\circ$), correspondientes al tercero y cuarto pico resonante que aparece en el espectro de transmitancia *vs* $\sin^2\theta$ (ver figura (5.3)E1); la diferencia calculada entre resonancias consecutivas en el intervalo de 1800 a 2500 meV es de $\Delta E \approx 45.8 meV$. El espesor total de la estructura E1 es de 17 μm .

Debido a que tales estructuras se pueden fabricar con SP, es posible diseñarlas en regiones del espectro electromagnético, donde el material no presenta absorción, tal es el caso del IR cercano. El espectro de transmitancia de la estructura E2 se muestra en la figura (5.3)E2, donde también se observan 10 resonancias como en la figura (5.3)E1. Considerando el intervalo de energías cercano a donde fue diseñada la estructura que presenta resonancias en el espectro de transmitancia *vs* $\sin^2\theta$, y tomando sus ángulos correspondientes, que aparecen a 25.49° (segundo pico resonante en E2), donde $\lambda=1500 nm$ ($E=826.66 meV$), se observan 11 resonancias en un intervalo de 700 a 900 meV . En los siguientes ángulos, 32.49° , 38.49° y 44.49° los picos resonantes coinciden en posición de energía; la diferencia de energía medida en dos resonancias consecutivas es de aproximadamente $\Delta E \approx 20 meV$, en un rango de 700 a 900 meV para todos los espectros de reflectancia *vs* energía del fotón (ver figura (5.7)). El espesor total de la estructura es de 34.2 μm .

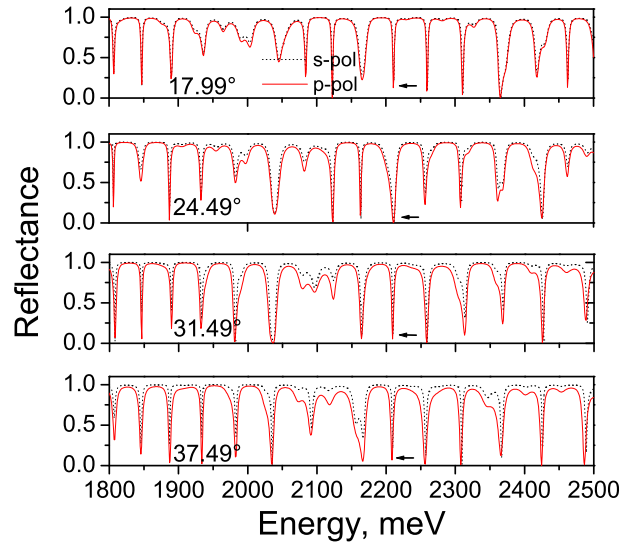


Figura 5.6: Espectro de reflectancia *vs* energía del fotón para los primeros cuatro ángulos que corresponden a los primeros cuatro picos resonantes (EWS) en la estructura $E1$ con $\lambda=561$ nm.

El espectro de reflectancia de la tercera estructura $E3$ se muestra en la figura (5.8). Para el ángulo de incidencia de 5.99° , correspondiente al primer pico resonante en la estructura $E3$ (ver figura (5.3) $E3$), donde $\lambda=1250$ nm ($E=992$ meV). Se observan 10 picos resonantes muy bien definidos en un intervalo de energías de 950 a 1050 meV. Para los siguientes ángulos en 14.49° , 19.49° , y 23.49° se mantiene un factor de calidad de los picos muy alto y los picos resonantes coinciden en gran medida en posición de energía; la diferencia de energía calculada para dos picos resonantes consecutivos ΔE es de aproximadamente de 11 meV, en un rango de 950 a 1050 meV. El espesor total de la estructura es de 68.4 μm . En conclusión, este tipo de filtros nos permiten seleccionar diferentes modos de transmisión los cuales pueden responder a la misma frecuencia para ángulos específicos, por lo que la utilización de tales filtros para sensores químicos o biológicos es muy prometedora. Además de esto, dicha estructura puede ser usada para la modulación de la radiación terahertz, como se explica a continuación en el siguiente apartado.

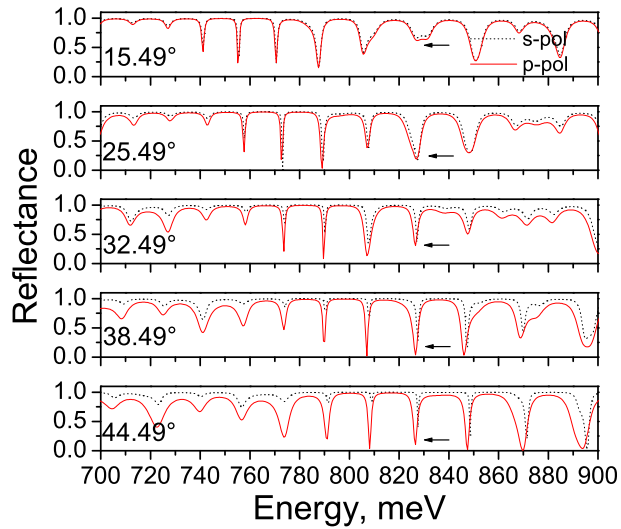


Figura 5.7: Espectros de reflectancia *vs* energía del fotón para la estructura $E2$. Esta figura muestra cuatro espectros con ángulos seriales (25.49° , 32.49° , 38.49° y 44.49°) correspondientes a los cuatro picos resonantes seriales (EWS) del espectro con $\lambda=1500$ nm (donde 25.49° corresponde a el segundo pico resonante en la figura (5.3) $E2$).

5.1.2 Escaleras de Wannier-Stark localizadas espacialmente dentro de la estructura

En el capítulo 4 se explicó la propagación de la luz en una estructura "simple", donde también se mostró la intensidad del campo eléctrico dentro de la estructura para diferentes energías del fotón para el caso de la estructura $E3$ cuando la pendiente $g=0$, esto es, cuando no hay gradiente en los índices de refracción. A continuación se presentan los resultados correspondientes a la estructura $E1$ y $E3$ cuando se aplica un gradiente no-lineal en los índices de refracción de las capas constituyentes, esto es, para cuando la pendiente $g \neq 0$.

En la figura (5.9) se muestra la distribución del campo eléctrico dentro de la estructura $E1$ como función de la energía del fotón. Se puede ver claramente que aparecen modos de luz localizados dentro de la estructura, es decir, modos que se

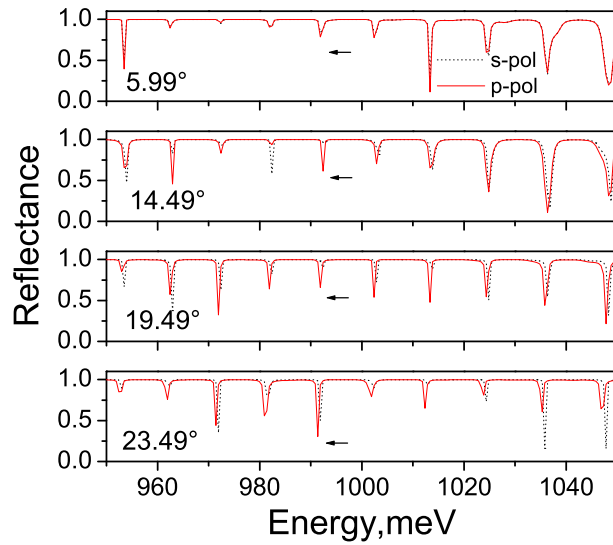


Figura 5.8: Espectro de reflectancia *vs* energía del fotón para la estructura $E3$. En esta gráfica se muestran cuatro espectros con ángulos consecutivos (5.99° , 14.49° , 19.49° y 23.49°) los cuales corresponden a cuatro picos resonantes (EWS) consecutivos de la estructura con $\lambda=1250$ nm (ver figura (5.3) $E3$.)

encuentran atrapados dentro de dos zonas prohibidas (mini-bangaps), con lo que aseguramos que se trata de las EWS, las cuales aparecen separadas casi a la misma distancia en energías.

Para asegurar que aparecen modos de luz atrapados dentro de dos zonas prohibidas y poder observar EWS y consecuentemente las oscilaciones de Bloch, es necesario investigar la estructura de bandas local de las multicapas. A manera de ejemplo, sólo nos enfocamos a estudiar una de la estructuras, la $E3$, en la cual, realizamos el estudio de estructura de bandas local, los mapas de estados dispersivos, la reflectividad y la respuesta en resolución temporal de un pulso gaussiano que se propaga dentro de la estructura. En la figura (5.10)(a) se muestra el gráfico de estructura de bandas locales acopladas a medida que el gradiente en los índices de refracción de las capas aumenta gradualmente a través de toda la estructura. En las figuras (5.10)(b)-(d) se muestran diferentes acercamientos en intervalos de

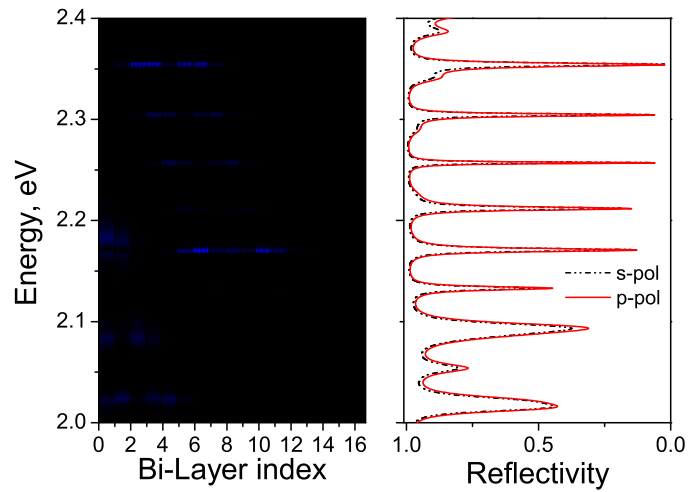


Figura 5.9: (izquierda) Distribución de la intensidad del campo eléctrico (modo TM) dentro de la estructura $E1$ para un ángulo de incidencia de 17.99° . Los parámetros de la estructura son $\lambda=561$ nm, donde $h=2.96$, $gd=0.1$, $d=1\mu\text{m}$ y $N=34$. Un cambio de color de oscuro a brillante corresponde a un incremento en la intensidad de la luz dentro de la estructura. (derecha) Espectro de reflectividad de la estructura, donde se observan las dos polarizaciones (s, p).

energía de la misma estructura. La estructura de bandas de cada una de las bicapa que componen toda la superred dieléctrica se calcularon por separado y posteriormente fueron acopladas en un sólo gráfico (ver figura (5.10)(a)). Se observa que existen regiones bien definidas donde la luz se propaga (zonas en verde) y zonas que son prohibidas para la luz (zonas en blanco). Por ejemplo, se puede ver en la figura (5.10)(a), que se pueden localizar modos de luz en un rango amplio de energías donde aparece una mini banda permitida (verde) separada por dos mini-gaps (blanco) las cuales se encuentran inclinadas debido a que el valor de la pendiente g es grande. Se puede observar que a medida que se sigue amplificando la zona es posible encontrar regiones donde sólo aparece una banda prohibida inclinada en medio de dos mini-bandas. En esa zona ocurre un fuerte tunelamiento Zener, el cual se observa en el espectro (ver figura (5.10)(d)) con casi 100% de transmitancia. En el lado derecho de cada figura se muestra el espectro de transmitancia donde se puede observar la localización fuerte en forma de picos resonantes muy angostos.

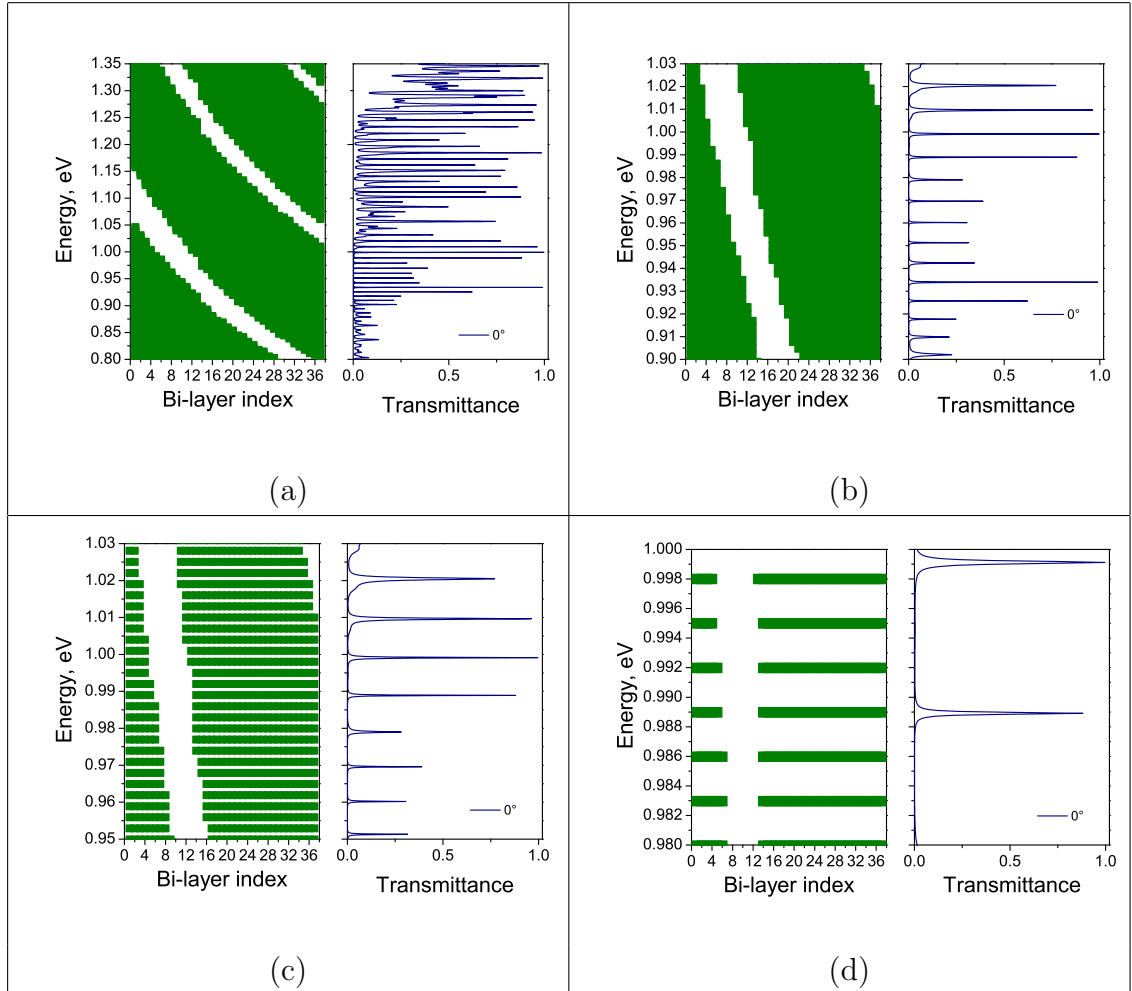


Figura 5.10: (a)-(c) Distribución de la intensidad del campo eléctrico (modo TM) dentro de la estructura $E3$ en función de la energía del fotón para diferentes acercamientos. Los parámetros de la estructura $E3$ son $\lambda=1250$ nm, $h=2.75$, $gd=0.05$, $d=1.8\mu\text{m}$ y $N=38$. Las zonas en color verde representan los estados que se propagan en la estructura y las zonas en blanco son los estados evanescentes (modos que no se propagan).

En la figura (5.11) se muestra la intensidad del campo eléctrico dentro de la estructura "simple" $E3$, en comparación con la figura (5.10), donde sólo se muestra la estructura de bandas. Como se observa, a medida que se va realizando una amplificación de alguna zona en particular, es posible observar regiones donde la luz se encuentra fuertemente localizada dentro de bandas permitidas (azul) separadas por dos bandas prohibidas (oscuro). Tales regiones de localización son las bien conocidas escaleras de Wannier-Stark. A medida que se sigue amplificando la zona, es posible observar las EWS y la forma de los picos resonantes tal como se muestra en el espectro de transmitancia de la figura (5.11)(d) (derecha).

Para mostrar la evidencia de que un filtro que muestre el mismo espectro de transmitancia (reflectancia) para ciertos ángulos de incidencia de la luz puede ser construido, en la figura (5.12) se observan los gráficos de la distribución de la intensidad del campo eléctrico dentro de la estructura $E3$ para tres ángulos de incidencia consecutivos donde aparecen las resonancias de Wannier-Stark en el gráfico de la figura (5.8). Notemos que para esos valores de ángulos de incidencia de la luz los mapas de estados dispersivos son muy similares en posición y ancho de las resonancias aunque existen diferencias en la intensidad del campo eléctrico.

La figura (5.13) muestra el cálculo de la reflectancia resuelta en el tiempo de la estructura $E3$ calculada usando la ecuación (3.31) para un pulso gaussiano centrado en $E_0 = 809$ meV y $E_0 = 1002$ meV con anchos $\delta = 10.5$ y $\delta = 11$ meV, respectivamente como se ilustra en la figura 3(b). Se pueden observar las oscilaciones de Bloch con un periodo de oscilación τ_B de 414 fs y 424 fs para ángulos de incidencia del pulso de 5.99° y 14.49° , respectivamente (ver figura (5.13)). Las oscilaciones de Bloch son observadas debido al tunelamiento de los fotones a través de la banda prohibida, donde posteriormente se encuentran con una zona permitida (mini-bandas, donde se propaga libremente hasta llegar a la siguiente banda prohibida, donde es reflejado hasta llegar a la primera banda prohibida donde es reflejado nuevamente, y así sucesivamente. Un resultado interesante en este tipo de estructuras es que no necesariamente se necesitan microcavidades para inducir los modos localizados para poder observar las EWS y consecuentemente las oscilaciones de Bloch, sino que es suficiente seleccionar de manera adecuada los parámetros de diseño de las estruc-

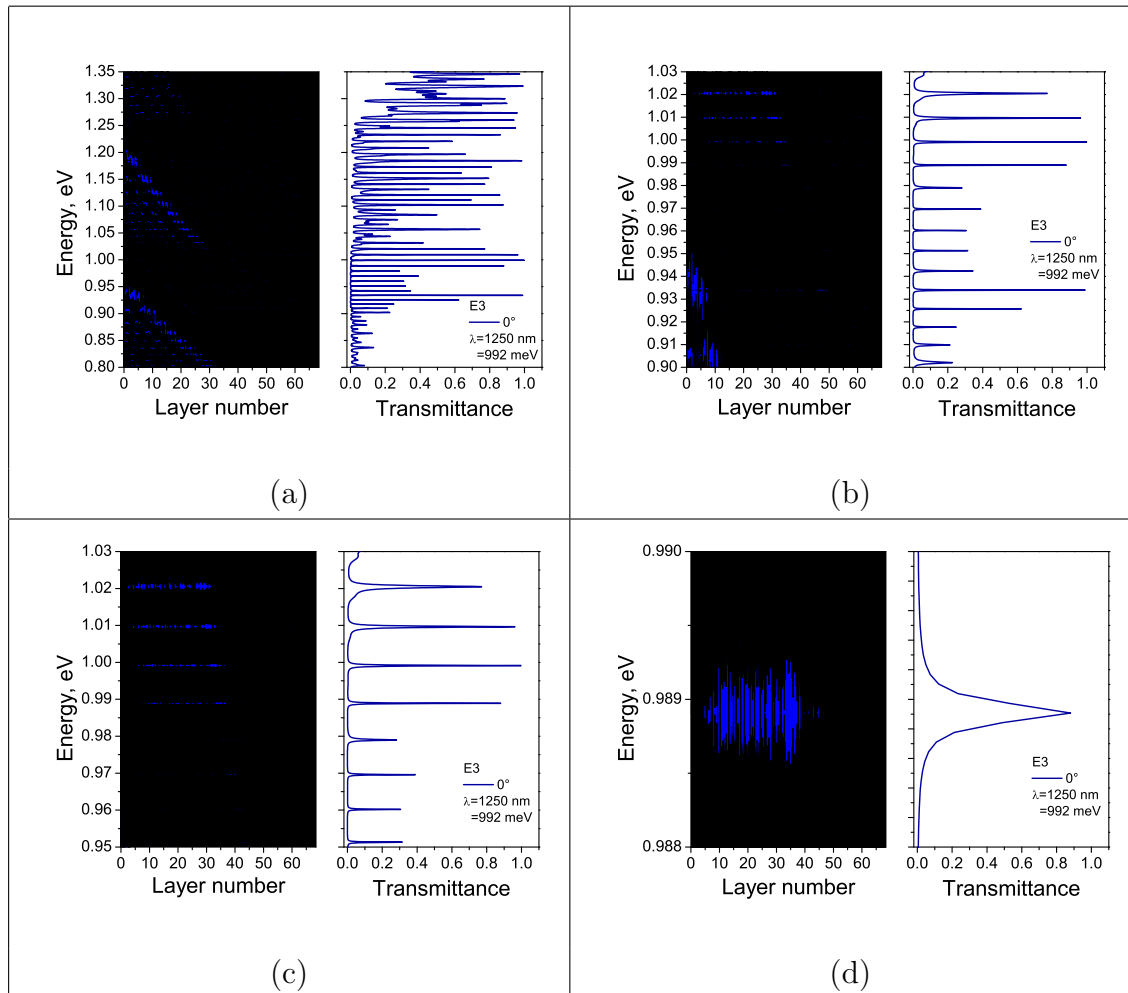


Figura 5.11: (a)-(d) Distribución de la intensidad del campo eléctrico (modo TM) dentro de la estructura E3 en función de la energía del fotón para diferentes acercamientos. Los parámetros de la estructura E3 son $\lambda=1250$ nm, $h=2.75$, $gd=0.05$, $d=1.8\mu\text{m}$ y $N=38$. Un cambio de color de oscuro a brillante corresponde a un incremento en la intensidad de la luz dentro de la estructura.

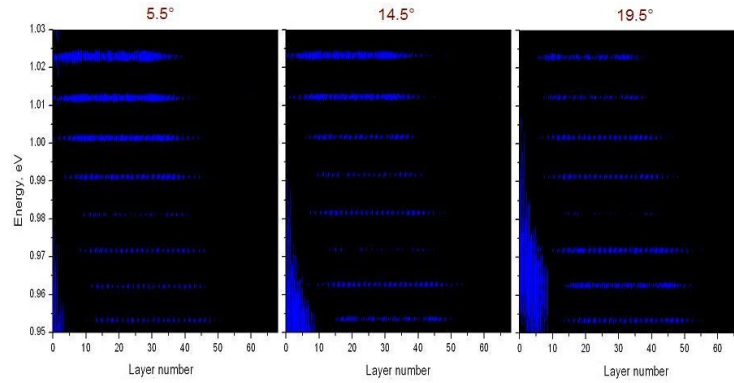


Figura 5.12: Distribución de la intensidad del campo eléctrico (modo TM) en la estructura $E3$ para tres ángulos consecutivos 5.99° , 14.49° y 19.49° respectivamente. Estos ángulos corresponden a los primeros tres picos resonantes (WSLs) de la estructura con $\lambda=1250$ nm (ver figura (5.3) $E3$).

turas de multicapas. Podemos ver que es posible obtener oscilaciones de Bloch con periodos de oscilación iguales para ciertos ángulos en este tipo de estructuras.

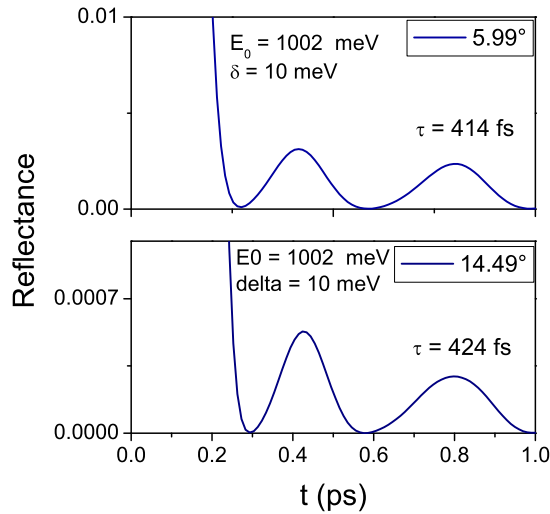


Figura 5.13: Espectro de reflectancia en resolución temporal para la estructura $E3$ calculada para dos ángulos de incidencia de la luz, correspondientes a las resonancias de las escaleras de Wannier-Stark del espectro de transmitancia de la figura (5.3) $E3$).

En resumen, se ha observado que el número de resonancias puede ser deter-

minado al variar los parámetros que caracterizan a la estructura. El factor de calidad (FWHM) de los picos depende en gran medida de la selección adecuada de los parámetros de la estructura, así como también de la longitud de onda donde se desean diseñar las superredes ópticas. Como comparación con otros trabajos, *R. Sapienza et al.* [3] propuso un sistema con microcavidades ópticas, las cuales exhiben oscilaciones de Bloch con periodo $\tau_B = h/\Delta E_B$, donde h es la constante de Planck. En aquel trabajo, las EWS son vistas como líneas brillantes horizontales que se extienden entre las dos bandas prohibidas inclinadas. También, se muestra que los picos de transmitancia están espaciados por $\Delta E_B \approx 7.5 \text{ meV}$. De manera similar *V. Agarwal et al.* [5] observó OB en un sistema que contiene 20 y 30 microcavidades fabricadas con silicio poroso, donde los picos resonantes están separados por $\Delta E_B = 26 \text{ meV}$ y $\Delta E_B = 22 \text{ meV}$, tales valores corresponden a oscilaciones de Bloch con un periodo de $\tau_B = 170 \text{ fs}$ y $T_B = 200 \text{ fs}$, respectivamente. En las estructuras que nosotros estudiamos en esta sección, se puede observar que el espaciamiento entre niveles asociados a las escaleras de Wannier-Stark es del orden de valores mostrados en los trabajos mencionados anteriormente. Por ejemplo en la estructura *E3* donde se obtuvo un valor $\Delta E = 11 \text{ meV}$.

Capítulo 6

Escaleras de Wannier-Stark, oscilaciones de Bloch y tunelamiento Zener en estructuras DP

6.1 Gradiente lineal en el espesor óptico

En los capítulos anteriores se ha estudiado la existencia de oscilaciones de Bloch y tunelamiento Zener en cristales fotónicos unidimensionales. Se ha mencionado que la analogía fotónica de las OB aparece cuando un cristal fotónico se somete a una variación gradual de su índice de refracción o a una modulación de sus parámetros geométricos que resultan en una inclinación lineal de la estructura de bandas. También se mencionaron algunos ejemplos de diferentes sistemas que se han propuesto para observar las EWS y las OB, donde principalmente se usan microcavidades acopladas. Tales estructuras de multicapas originan un nuevo tipo de cavidad de Fabry-Perot donde los reflectores (espejos) son reemplazados por regiones donde no hay propagación asociadas con la periodicidad local de la estructura; la distancia entre los bordes de banda donde ocurren las OB puede ser mantenida

constante considerando un gradiente lineal, por lo tanto el periodo de las OBs permanece constante con el cambio en la frecuencia de la onda incidente [3, 5]. Por otro lado un incremento en el gradiente de espesor óptico lleva a un acoplamiento de dos niveles de Wannier-Stark lo que provoca la deslocalización de las ondas electromagnéticas haciendo posible la observación del tunelamiento Zener resonante [21]. La mayoría de los sistemas reportados hasta ahora para la observación de las OB, EWS o el efecto de tunelamiento Zener usan un gradiente en el espesor óptico para inclinar la banda fotónica y a partir de estas estructuras se han logrado diversas aplicaciones en el área de sensado óptico [22]. En el presente capítulo se demuestra teóricamente y se presenta la evidencia experimental de EWS, OB y tunelamiento Zener usando estructuras de multicapas DP cuando se considera un gradiente lineal sobre los espesores ópticos de las capas que conforman la estructura.

6.1.1 Rompimiento de la simetría traslacional en estructuras DP

En el capítulo 4 se explicó como generar una estructura DP (ver figura (6.1)) y se enfatizó la importancia que juegan los parámetros que describen el sistema para poder generar múltiples resonancias dentro de una banda prohibida de manera semejante al de las microcavidades acopladas. A continuación mostramos el efecto de introducir un gradiente lineal en los índices de refracción [45], así como también, un gradiente lineal en los espesores físicos que componen la estructura. Además de esto, se analiza el efecto del ángulo de incidencia sobre las oscilaciones de Bloch y tunelamiento Zener para algunas de las estructuras.

6.1.2 Gradiente lineal en los índices de refracción

En la siguiente sección se demuestra teóricamente y se muestra la evidencia experimental de las EWS usando un gradiente lineal en los índices de refracción de una estructura de multicapas DP fabricada con SP. También se presentan resultados teóricos que muestran la presencia de oscilaciones de Bloch fotónicas en dicha

estructura.

Cuando la simetría translacional 1D del sistema se rompe introduciendo un ligero gradiente en los espesores ópticos a lo largo de la dirección de crecimiento de la estructura DP, las EWS se forman y consecuentemente las OB fotónicas pueden ser observadas. A medida que se incrementa el valor del gradiente en los índices de refracción ocurre un inclinamiento espacial de las minibandas y las bandas prohibidas, en las cuales las resonancias debidas a los defectos en la estructura DP cambian ligeramente preservando al mismo tiempo el acoplamiento de los modos. De esta forma los estados fotónicos extendidos toman la forma de una secuencia discreta de niveles de energía con espaciamiento ΔE , los cuales son el equivalente óptico de las EWS en el dominio de frecuencias. Dependiendo del gradiente en el índice de refracción, se pueden observar acoplamientos resonantes de dos estados consecutivos de EWS que llevan a la deslocalización de las ondas electromagnéticas y por lo tanto a la ocurrencia del tunelamiento Zener resonante, el cual describimos más adelante. El gradiente en los índices de refracción de las capas está dado por $\Delta n = (n_{z_m} - n_{z_1}) / n_{z_1}$, donde los subíndices z_1 y z_m representan la primera y la m -ésima capa a lo largo de la profundidad del sistema de multicapas. El gradiente aplicado, es la contraparte óptica del campo eléctrico usado en las superredes electrónicas para observar EWS y OB.

Las estructuras DP basadas en SP se obtuvieron por ataque electroquímico

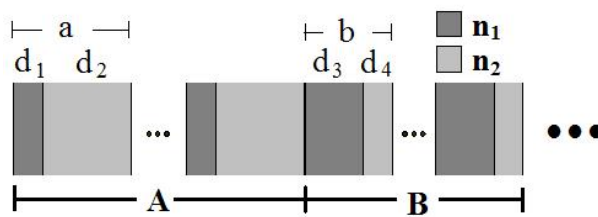


Figura 6.1: Representación esquemática de una estructura doblemente periódica 1D, donde n y m representan el número de periodos de a y b en las subestructuras A y B respectivamente; n_1 y n_2 son los índices de refracción alto y bajo de las capas dieléctricas alternadas en a y b ; el espesor de las capas es d_1 y d_2 para a y d_3 y d_4 para b .

de obleas de silicio dopadas con boro con una resistividad de $0.007 - 0.013 \Omega cm$ y orientación (100). Los sustratos se atacaron en un electrolito consistente de HF (40%) y etanol (99.98%) en una razón volumétrica 1 : 1. Para estimar el índice de refracción correspondiente a una densidad de corriente específica, se usó el modelo de medio efectivo de Bruggeman descrito en el capítulo 3. Para medir la porosidad de las capas se empleó el método gravimétrico. Los espectros de reflectancia se midieron usando luz no polarizada a un ángulo de incidencia de 20° con un espectrómetro VARIAN-CARY 5000.

Para fabricar las estructuras DP se usaron dos diferentes conjuntos de parámetros estructurales para observar las EWS y las OB en la región del infrarrojo cercano. Para obtener la estructura $(A_2B_4)^6$ con modos de transmisión resonantes en el IR cercano se consideraron los siguientes parámetros: $d_1=105$ nm, $d_2=315$ nm, $d_3=216$ nm y $d_4=103$ nm. Los índices de refracción fueron tomados como $n_1 = 2.2$ y $n_2=1.4$ ($\lambda=1500$ nm), los cuales corresponden a porosidades de 48% y 76%, y que fueron obtenidos con densidades de corriente (J) de 29 y 134 mA/cm^2 , respectivamente. Para obtener el gradiente lineal en los índices de refracción de 16% en la estructura $(A_2B_4)^6$ (denotada como $G(A_2B_4)^6$), n_1 cambia de 2.2 (porosidad 48%) a 2.55 (porosidad de 37%, $J=5.2$ mA/cm^2) y n_2 cambia de 1.4 (porosidad de 76%) a 1.57 (porosidad de 69%, $J = 89.0$ mA/cm^2), respectivamente.

6.1.3 Resultados y discusión

En la figura 6.2I(a) se muestra el cuadrado de la intensidad del campo eléctrico dentro de la estructura DP $(A_2B_4)^6$, cuando no hay gradiente en el índice de refracción ($\Delta n = 0$), calculado usando la ecuación (3.29). El mapa de estados dispersivos provee la intensidad del campo eléctrico en cada punto dentro de la estructura cuando una onda electromagnética plana de amplitud uno incide sobre la estructura a 20° . Un cambio de oscuro a brillante corresponde a un incremento en la intensidad de la luz. La intensidad de entrada ha sido normalizada a la unidad. En algunas regiones la intensidad del campo eléctrico dentro de la estructura puede ser mayor que uno debido a las resonancias internas. Se puede observar que no hay

localización fuerte del campo eléctrico en diferentes zonas de la estructura DP. La composición de algunos estados deslocalizados en el espacio -cada banda brillante- es un análogo óptico de las bandas de energía electrónicas causadas por el potencial periódico en las superredes electrónicas. En la figura 6.2I(b), se presentan las mediciones de reflectancia óptica realizadas sobre las estructuras DP. Las líneas punteadas en la figura 6.2I(b) corresponden a los resultados obtenidos por las simulaciones numéricas. Los espectros de reflectancia medidos muestran la presencia de cinco picos resonantes en las posiciones de energía del fotón de 0.837, 0.853, 0.870, 0.885 y 0.896 eV, con anchos medios del pico (FWHM) de 6, 8.2, 8, 7.1 y 4 meV, respectivamente. Los FWHMs de los picos resonantes pueden ser sintonizados al incrementar o disminuir el número de capas en alguna de las subestructuras. Disminuyendo (incrementando) el número de capas de la subestructura que actúa como un defecto en el sistema (en este caso la subestructura B), resulta en un ensanchamiento (estrechamiento) de los picos y consecuentemente un cambio en los valores del FWHM [59].

La figura 6.2II(a) muestra la intensidad del eléctrico dentro de la estructura $G(A_2B_4)^6$ con $\Delta n = 16\%$ en el mismo rango de energías de la figura 6.2I. Se puede observar claramente el confinamiento de la luz debido a la inclinación de las minibandas y las bandas prohibidas (Figura 6.2II(a)). La ocurrencia de las EWS como una serie de picos resonantes muy estrechos se observa claramente en los espectros de reflectividad de la estructura (Figura 6.2II(a)). Cuando el pulso gaussiano incide sobre la estructura $(A_2B_4)^6$ en la región con valores de energías entre dos bandas prohibidas locales, la mayor parte de la luz es reflejada hacia atrás por la banda prohibida de abajo y solo un pequeño porcentaje, el cual cruza la banda prohibida (tunelamiento Zener), alimenta las resonancias horizontales asociadas con las EWS. Por consiguiente, la luz confinada comienza a oscilar dentro de las minibandas permitidas inclinadas con un periodo regular de $\tau_B = h/\Delta E$. Esas son las OB fotónicas y que representan la contraparte en el dominio temporal de las EWS. Se pueden observar oscilaciones en el dominio temporal al medir la reflectancia en resolución temporal de la estructura de multicapas. El centro de las resonancias de Wannier-Stark definen, en el espacio, el centro de las OB. La distancia entre niveles de energía

sucesivos se pueden obtener por la fórmula de Fabry-Perot siguiente: $\Delta E = hc/2\bar{n}d$, donde d es la distancia entre los bordes de los gaps locales a la frecuencia de entrada dada y \bar{n} es el promedio del índice refractivo. De la figura 6.2II(b), el valor medido de ΔE está en gran acuerdo con las simulaciones numéricas presentadas en la figura Figura 6.2II(a) (como función de la profundidad de la estructura). Los parámetros estructurales son modulados para obtener valores de $\Delta E \approx 27$ meV, y por consiguiente, $\tau_B = 148$ fs.

La figura 6.2III muestra la reflectancia teórica resuelta en el tiempo de la estructura $G(A_2B_4)^6$ calculada usando la Ec. (3.31) para un pulso Gaussiano centrado en $E_0 = 809$ meV ($\delta = 10.5$ meV) y $E_0 = 830$ meV ($\delta = 11$ meV) como se ilustra en la figura 3(b). Se pueden observar PBOs con un periodo de oscilación de 111 fs y 130 fs (Figura 4), comparado con 148 fs ($\Delta E = 27$ meV) medido del espectro de reflectancia de la correspondiente estructura (figura 3(b)). Las oscilaciones son observadas debido al tunelamiento de los fotones a través del gap inclinado de abajo. Se encuentra que la energía y forma del pulso influyen ligeramente en el periodo de oscilación de las OB fotónicas, por ejemplo, un incremento en la energía del pulso por 21 meV resulta en un incremento del periodo de las OB de 19 fs.

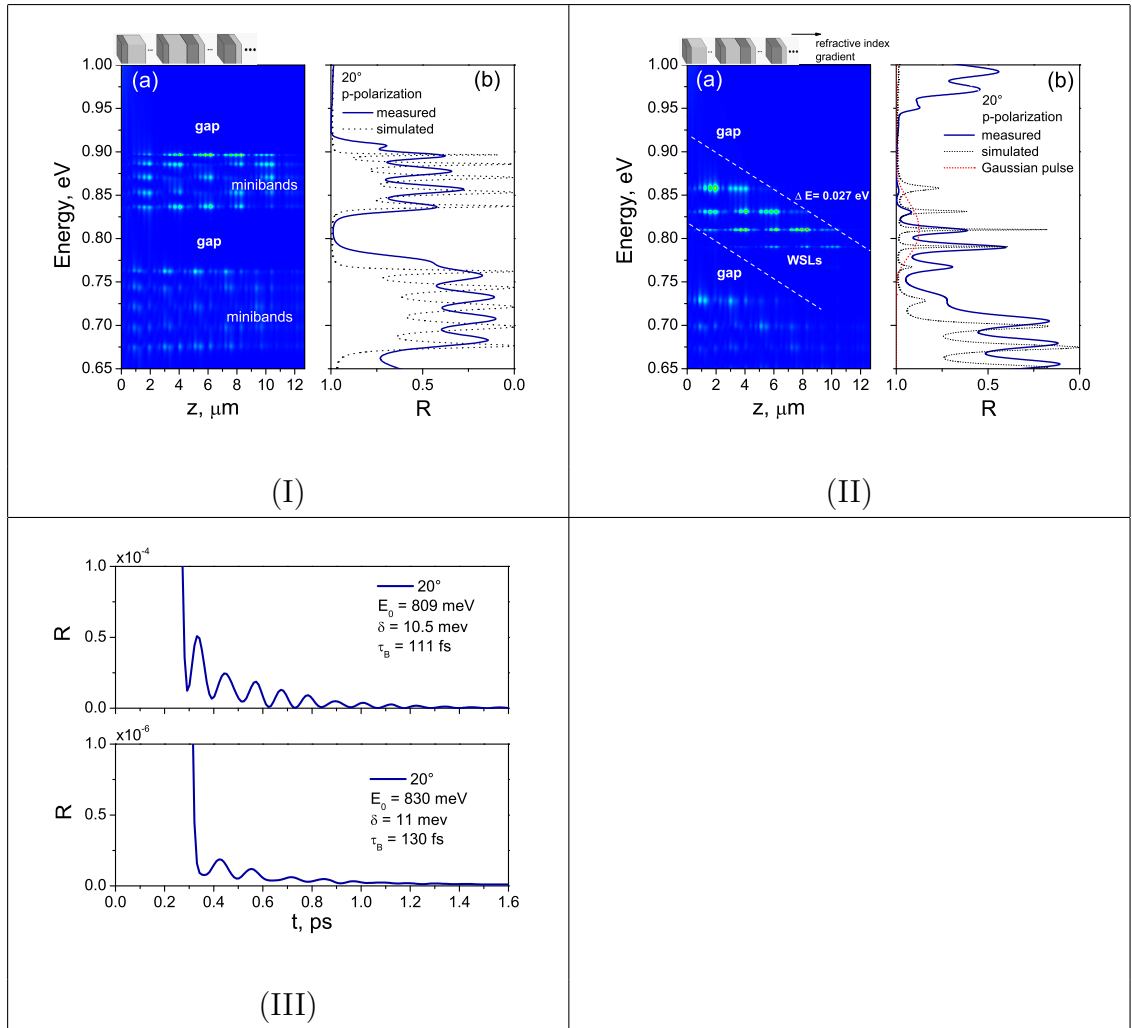


Figura 6.2: I(a) Distribución de la intensidad del campo eléctrico (modo TM) en la estructura $(A_3B_6)^5$ cuando no hay gradiente en los espesores físicos, esto es, $\Delta d = 0\%$ (situación de minibandas planas). Un cambio de color de oscuro a brillante corresponde a un incremento en la intensidad de la luz. II(a) con $\Delta d = 10\%$ (WSLs ópticas). I(b) y II(b) Muestra el espectro de reflectancia medido (líneas sólidas) y simulado (líneas punteadas). (c) $\Delta d = 20\%$, tunelamiento Zener resonante (TZR). (d) amplificación en zona de TZR. Los espectros de reflectividad calculados se muestran en los paneles de la derecha. Arriba de cada panel se muestra esquemáticamente la secuencia $(A_3B_6)^5$ de la estructura mencionada.

6.1.4 Gradiente lineal en los espesores físicos

Para este caso, el gradiente en los espesores físicos que componen la estructura está dado por $\Delta d = (d_{z_m} - d_{z_1})/d_{z_1}$, donde los subíndices z_1 y z_m son la primera y la

m – ésima capa a lo largo de la profundidad de la muestra.

6.1.5 Detalles experimentales

Las estructuras DP con gradiente lineal en los espesores físicos se obtuvieron con las mismas condiciones que el caso anterior, esto es, resistividad de $0.007 - 0.013 \Omega \text{cm}$ y orientación (100). Con un electrolito consistente de HF (40%) y etanol (99.98%) en una razón volumétrica 1 : 1.

Además de la muestra DP de referencia sin gradiente, se usaron dos diferentes grupos de parámetros estructurales para fabricar las estructuras de SP y observar las EWS en la región del cercano infrarrojo. Para obtener la estructura $(A_3B_6)^5$ con modos de transmisión resonantes en la región del cercano infrarrojo se consideraron los espesores $d_1 = 100 \text{ nm}$, $d_2 = 350 \text{ nm}$, $d_3 = 210 \text{ nm}$ y $d_4 = 100 \text{ nm}$. Los índices de refracción correspondientes son $n_1 = 2.4$ y $n_2 = 1.4$ a una longitud de onda

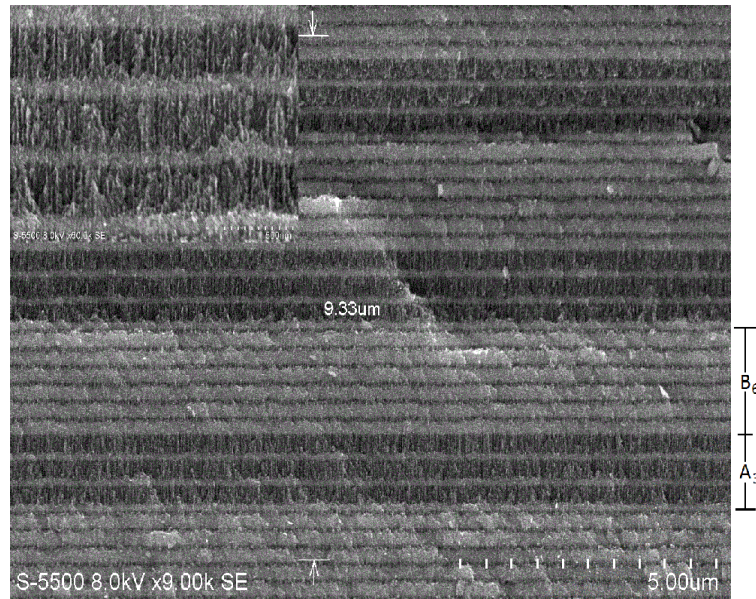


Figura 6.3: HRSEM de la estructura $(A_3B_6)^5$ con gradiente $\Delta(d) = 20\%$. Las zonas claras y oscuras corresponden a capas de baja y alta porosidad respectivamente. El recuadro ($2.01 \times 1.58 \mu\text{m}^2$) muestra una vista ampliada de la subestructura A_3 .

de 1500 nm, los cuales corresponden a porosidades de 41% y 76% obtenidas con densidades de corriente (J) de 16.6 y 130 mA/cm^2 respectivamente.

6.1.6 Resultados y discusión

Como ejemplo, en la figura (6.3) se muestra una imagen HRSEM de la sección transversal de una estructura doblemente periódica de la forma $(A_3B_6)^5$ con un gradiente de espesor a lo largo de la profundidad de la muestra. Las regiones claras y oscuras corresponden a capas de alto (n_1) y bajo (n_2) índice de refracción respectivamente. La doble periodicidad se distingue claramente denotada como A y B en la imagen. Las medidas de los espesores de las capas obtenidas de las imágenes de HRSEM muestran un excelente acuerdo entre los valores observados y calculados usando el método gravimétrico para cada capa. La figura (6.4) muestra el cuadrado del campo eléctrico dentro de la estructura DP $(A_3B_6)^5$ para diferentes niveles de gradiente, calculado por el método de la matriz de transferencia a partir de la ecuación (3.29). El mapa de los estados dispersados proporciona la intensidad de campo eléctrico en cada punto dentro de la estructura cuando ondas electromagnéticas de amplitud unitaria inciden en la estructura a 20° de ángulo de incidencia. El cambio de las zonas oscuras a las claras corresponde al incremento en la intensidad de la luz. La intensidad incidente se normalizó a la unidad. La figura (6.4)(a) muestra la intensidad del campo sin gradiente en los espesores físicos ($\Delta d = 0\%$). Es posible observar que el campo no se localiza en diferentes zonas de la estructura DP. Cada banda brillante, compuesta por estados deslocalizados en el espacio, es un análogo a la banda de energía electrónica debido a la periodicidad del potencial en superredes electrónicas. En los gráficos de la derecha se muestran los espectros de reflectividad como función de la energía del fotón. Se puede observar que en ausencia de un gradiente se forman dos minibandas planas denotadas como $MBS1$ y $MBS2$ separadas por una minibanda prohibida. La figura (6.4)(b)(izquierda) muestra el mapa de los estados dispersivos de las ondas electromagnéticas en la estructura con un gradiente en los espesores físicos $\Delta d = 10\%$. Se puede observar claramente el confinamiento de la luz debido a la inclinación de las minibandas prohibidas locales. También es posible

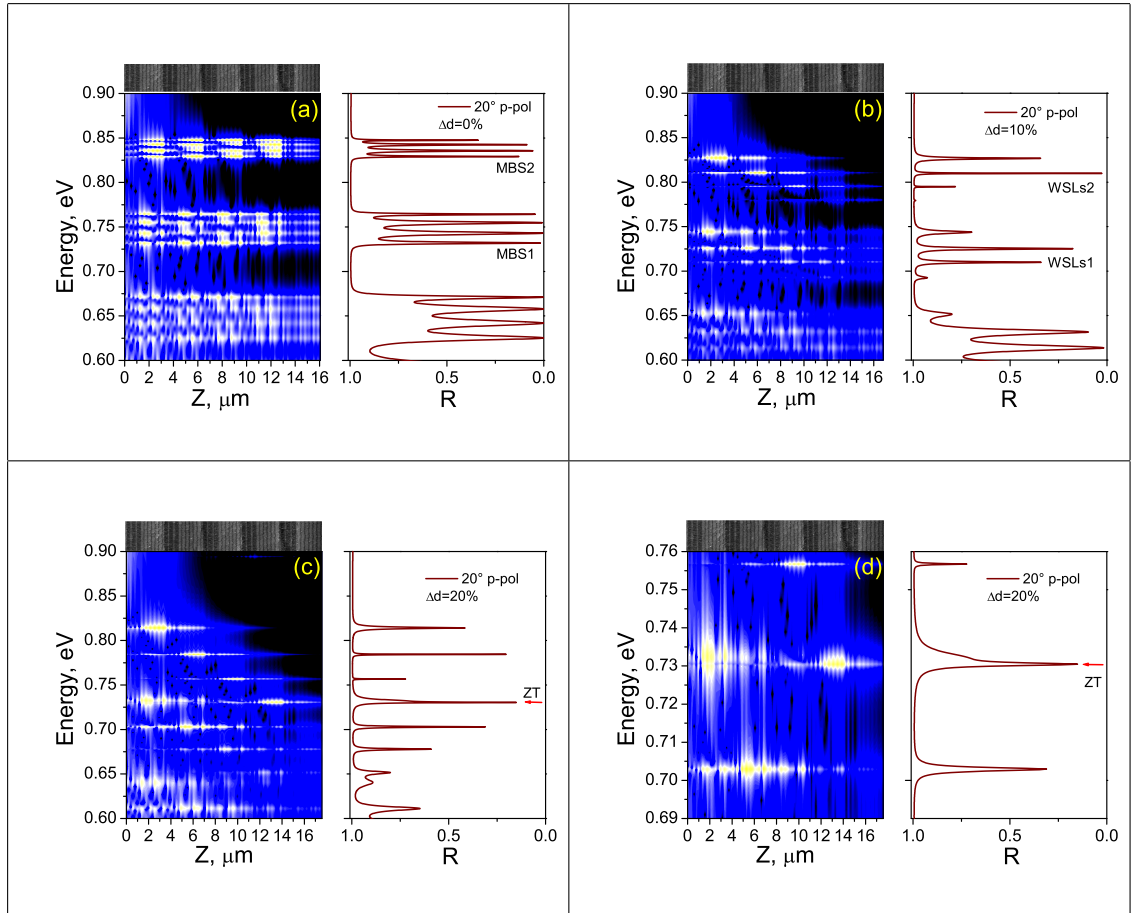


Figura 6.4: (a) Distribución de la intensidad del campo eléctrico (modo TM) en la estructura $(A_3B_6)^5$ cuando no hay gradiente en los espesores físicos, esto es, $\Delta d = 0\%$ (situación de minibandas planas). Un cambio de color de oscuro a brillante corresponde a un incremento en la intensidad de la luz. (b) con $\Delta d = 10\%$ (WSLs ópticas). (c) $\Delta d = 20\%$, tunelamiento Zener resonante (TZR). (d) amplificación en zona de TZR. Los espectros de reflectividad calculados se muestran en los paneles de la derecha. Arriba de cada panel se muestra esquemáticamente la secuencia $(A_3B_6)^5$ de la estructura mencionada.

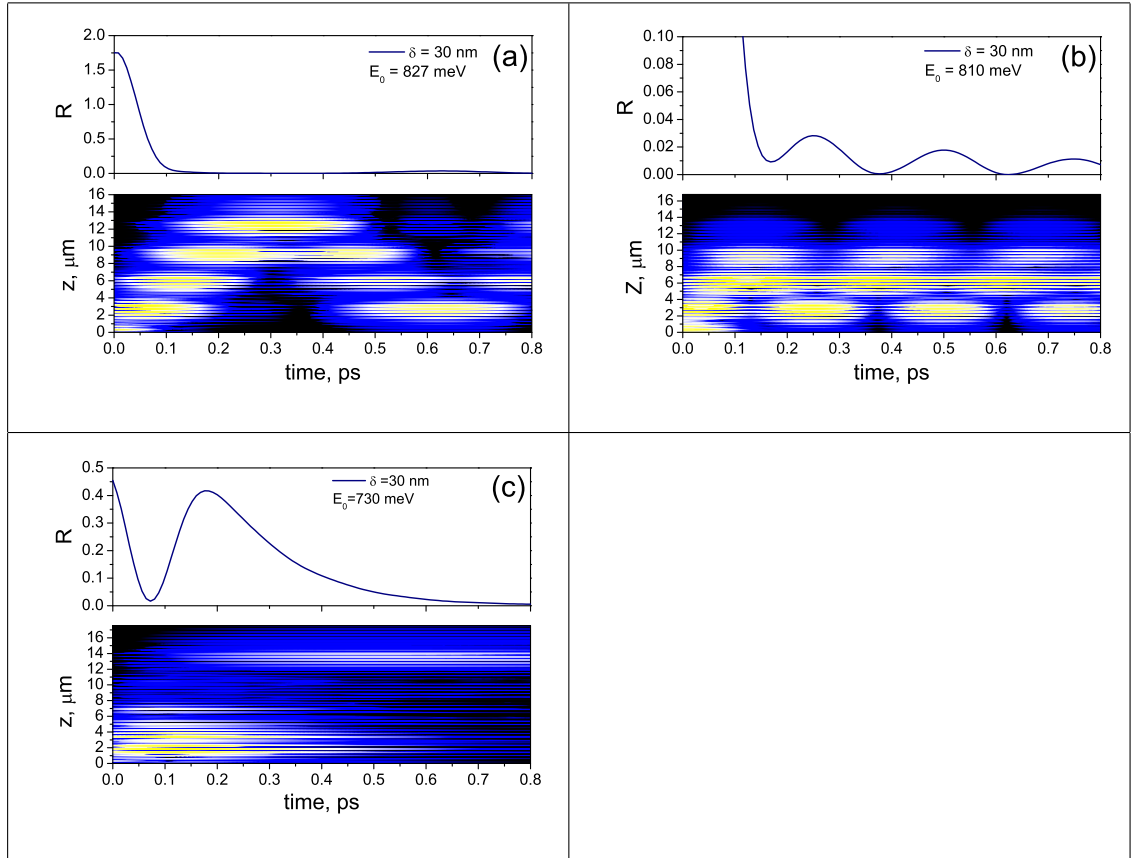


Figura 6.5: (a) (Arriba) Amplitud de la se\u00f1al reflejada como funci\u00f3n del tiempo. (Abajo) Resonancia \u00f3ptica simple: la traza de un pulso el cual es centrado en el primer pico de la segunda minibanda (MBs) ($\Delta d = 0\%$); (b) (Arriba) amplitud de la se\u00f1al reflejada como funci\u00f3n del tiempo; (abajo) oscilaciones de Bloch \u00f3pticas: la traza de un pulso el cual esta centrado en el tercer pico de la segunda escalera de Wannier-Stark de la estructura con $\Delta d = 10\%$; (c) (Arriba) amplitud de la se\u00f1al reflejada como funci\u00f3n del tiempo; (abajo) tunelamiento Zener \u00f3ptico ($\Delta d = 20\%$): la traza de un pulso el cual es centrado en el pico donde el tunelamiento Zener ocurre. En todos los casos, el pulso incide en la estructura desde la izquierda con un ancho de pulso de $\delta=30$ nm.

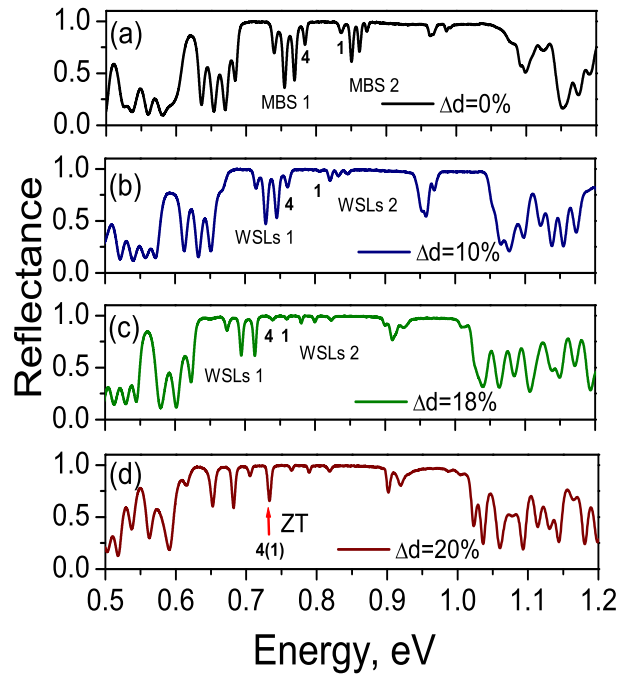


Figura 6.6: Espectro medido de la estructura de multicapas DP: (a) situación de banda plana $\Delta d = 0\%$. (b) $\Delta d = 10\%$. (c) $\Delta d = 18\%$. (d) estructura $Z(A_3B_6)^5$ con un gradiente lineal en los espesores físicos de las capas ($\Delta d = 20\%$). El tunelamiento Zener resonante se observa como un aumento en la intensidad del pico de transmisión en el centro de la minibanda prohibida.

observar la aparición de EWS como una serie de picos resonantes fuertemente localizados. En la parte derecha de la figura(6.4)(b) se observan dos estados discretos de EWS, marcados como $WSLs1$ y $WSLs2$. Estas EWS ópticas se aprecian en la forma de estados discretos confinados espacialmente que provocan picos fuertemente localizados y equidistantes en el espectro de reflectividad. Cuando el gradiente en el espesor aumenta las dos EWS se acercan una a la otra y a un valor crítico del gradiente, el estado de menor energía de $WSLs2$ y el de mayor energía de $WSLs1$ tendrán la misma energía fotónica (ver figura (6.4)(c)). Este acoplamiento induce la deslocalización de los dos estados los cuales aparecen con una mayor profundidad en la reflectividad, dando lugar a un canal intenso de tunelamiento resonante. En la figura (6.4)(d) se muestra la amplificación de la zona donde aparece el tunelamiento

Zener resonante. Los cálculos de resolución temporal se muestran en la figura (6.5). En la parte superior de las imágenes (a), (b) y (c) se presenta el cálculo del espectro de reflectividad resuelto en el tiempo para la estructura $(A_3B_6)^5$, mientras que en la parte inferior se observan los cálculos de la intensidad del campo eléctrico. El espectro de reflectividad resuelto en el tiempo y la intensidad del campo eléctrico como función del tiempo y de la posición a lo largo de la dirección de crecimiento fueron obtenidos considerando un pulso gaussiano incidente ($\delta = 30$ nm, ancho del pulso) de acuerdo a las ecuaciones (3.31) y (3.31) respectivamente. La figura (6.5)(a) corresponde a la minibanda plana ($\Delta d = 0\%$), la figura (6.5)(b) representa la estructura con $\Delta d = 10\%$ mientras que la figura (6.5)(c) muestra una estructura con $\Delta d = 20\%$. Se puede observar en la figura (6.5)(a) que la mayor parte del pulso penetra la estructura y la reflectividad inmediatamente tiende a cero con un valor muy pequeño de alrededor de $0.65ps$ proveniente de la reflexión en la parte derecha de la estructura. En la figura (6.5)(b) se observa que la mayor parte de la energía del pulso se refleja en el borde izquierdo de la estructura y un mínimo porcentaje se propaga. Dentro de la estructura la luz confinada comienza a oscilar dentro de las minibandas inclinadas permitidas de 1 a $15 \mu m$ aproximadamente, con un periodo regular de $\tau_B = h/\Delta E$. Estas son oscilaciones de Bloch que representan la contraparte en el dominio del tiempo de las EWS fotónicas. El periodo de las OB es de $\approx 248 fs$. La parte superior de la figura (6.5)(b) muestra el espectro de reflectividad resuelto en el tiempo para la estructura DP descrita anteriormente. Como se observa, la reflectividad exhibe oscilaciones bien definidas con periodos iguales a las OB. Estas oscilaciones son observadas debido al tunelamiento de fotones a través de la banda inferior inclinada. El periodo de las OB no depende significativamente de la forma y la intensidad del pulso incidente [3]. En la figura (6.5)(c) se presenta el fenómeno del TZ (para un $\Delta d = 20\%$) y considerando un ancho de pulso de alrededor de 30 nm. El modo resonante excitado es sometido a una deslocalización espacial, el cual es claramente observado en la parte superior de la figura (6.5)(c). El pulso experimenta un rápido decaimiento exponencial con una forma aproximadamente simétrica del pulso [21]. En comparación con una sola resonancia excitada (ver figura (6.5)(a)) el perfil resuelto en el tiempo del tunelamiento Zener no presenta una forma típica, es decir, se observa un decaimiento mayor y un pequeño retardo del pulso. El tiempo

de retardo mayor se debe a un acoplamiento más fuerte del modo con el medio ambiente de la estructura y es causado por el tiempo de transición necesario para que se forme la doble resonancia del tunelamiento Zener [21].

La estructura DP $(A_3B_6)^5$ se fabricó con los parámetros que permiten observar resonancias en la región del cercano IR del espectro electromagnético. En la figura (6.6) se presenta los espectros de reflectancia experimental que demuestran el efecto del gradiente sobre las estructuras, esto es, $(\Delta d = 0, \Delta d = 10, \Delta d = 18$ y $\Delta d = 20\%)$. En los cuatro espectros (figura (6.6)(a)-figura (6.6)(d)), el pico marcado como **4** es el cuarto pico de transmisión en la primera EWS ($WSLs1$) y el pico marcado como **1** es el primer pico de transmisión en la próxima EWS superior ($WSLs2$). Claramente se puede observar la evolución gradual de estos dos picos con un incremento en Δd y una eventual ocurrencia del TZ a $\Delta d = 20\%$. Para $\Delta d = 0\%$ (figura (6.6)(a)) se muestra la presencia de picos discretos resonantes ($MBS1$) a una energía fotónica de 739, 755, 769 y 783meV, con anchos medios de los picos ($FWHM$) de 5, 6, 4 y 4meV, respectivamente. En la figura (6.6)(b) donde $\Delta d = 10\%$, se observan dos EWS, en la primera $WSL1$ los picos de resonancia aparecen en 715, 729, 745 y 760 meV, respectivamente. Para $WSL2$ las resonancias se localizan en 806, 821, 833 y 760 meV, respectivamente. Las oscilaciones en el dominio del tiempo pueden ser detectadas midiendo la reflexión resuelta en el tiempo de la muestra. El centro de las resonancias de Wannier-Stark define en el espacio el centro de las OB fotónicas. Los valores medidos de ΔE de la figura (6.6)(b) se encuentran en acuerdo con las simulaciones teóricas presentadas en la figura (6.4)(b) (como función de la profundidad de la película). Los parámetros estructurales son modulados para obtener el espaciamiento de energía $\Delta E \approx 16meV$ ($WSL1$) y 12meV ($WSL2$) y por lo tanto $\tau_B = 258fs$ y $\tau_B = 344fs$ respectivamente. Para $\Delta d = 18\%$ (figura (6.6)(c)) el estado más bajo (denotado como **1**) de $WSL2$ y el estado más alto (denotado como **4**) de $WSL1$ se pueden observar relativamente más cercanos uno del otro. La Fig. figura (6.6)(d) muestra el efecto del tunelamiento Zener con un gradiente $\Delta d = 20\%$, es decir, el traslapamiento completo del último pico de transmisión **4** de $WSL1$ por el primer pico de transmisión **1** de $WSL2$. Se sabe que el acoplamiento de los picos de transmisión representa dos

estados resonantes localizados pertenecientes a diferentes EWS que ocurren cuando la diferencia de frecuencia entre ellos es menor que el ancho de los picos. Al valor crítico de gradiente de espesor físico $\Delta d = 20\%$, los dos estados resonantes vecinos se traslapan para formar un pico de transmisión de mayor intensidad, esto es, el tunelamiento Zener de las ondas de luz se revela como un canal de tunelamiento resonante intenso en 733 meV. Adicionalmente un mejoramiento en la amplitud de la transmisión después del acoplamiento de las EWS vecinas, es tan grande como dos veces la suma de ambos picos para valores de gradiente menores; aparte del incremento en la amplitud, el pico de transmisión resultante es más amplio, lo cual es consecuencia de la repulsión entre los dos estados resonantes acoplados [21].

6.2 Efecto del ángulo de incidencia

En la siguiente sección se muestra la influencia del ángulo de incidencia sobre las oscilaciones de Bloch y el tunelamiento Zener. Los espectros de reflectancia en resolución temporal y los mapas de estados dispersivos son analizados para un rango de ángulos de incidencia de la luz. Los espectros medidos revelan la presencia de WSLs y ZT en la región del infrarrojo cercano.

La figura (6.7) muestra imágenes de HRSEM de la sección transversal de una estructura doblemente periódica de la forma $(A_3B_6)^5$ para diferentes ampliaciones. Se puede observar las dos subestructuras A_3 y B_6 que se repiten periódicamente, así como también diferentes ampliaciones donde se observan interfaces homogéneas entre las capas.

La figura (6.8)(a) muestra el corrimiento del tercer pico en (WSLs2) *vs* el ángulo de incidencia, el corrimiento del pico resonante cambia de 793 meV a 984 meV para ángulos de 0° a 89.9° respectivamente. En la figura (6.8)(b) podemos ver que el espaciamiento entre los picos resonantes (ΔE) de las (WSLs2) aumenta a medida que se incrementa el ángulo de incidencia, esto es, cuando el ángulo de incidencia cambia de 0° a 89.9° , se observa un incremento en (ΔE) de 14.5 meV a 19.6 meV respectivamente. De acuerdo a $\tau = h/\Delta E$, el periodo de oscilación decrece

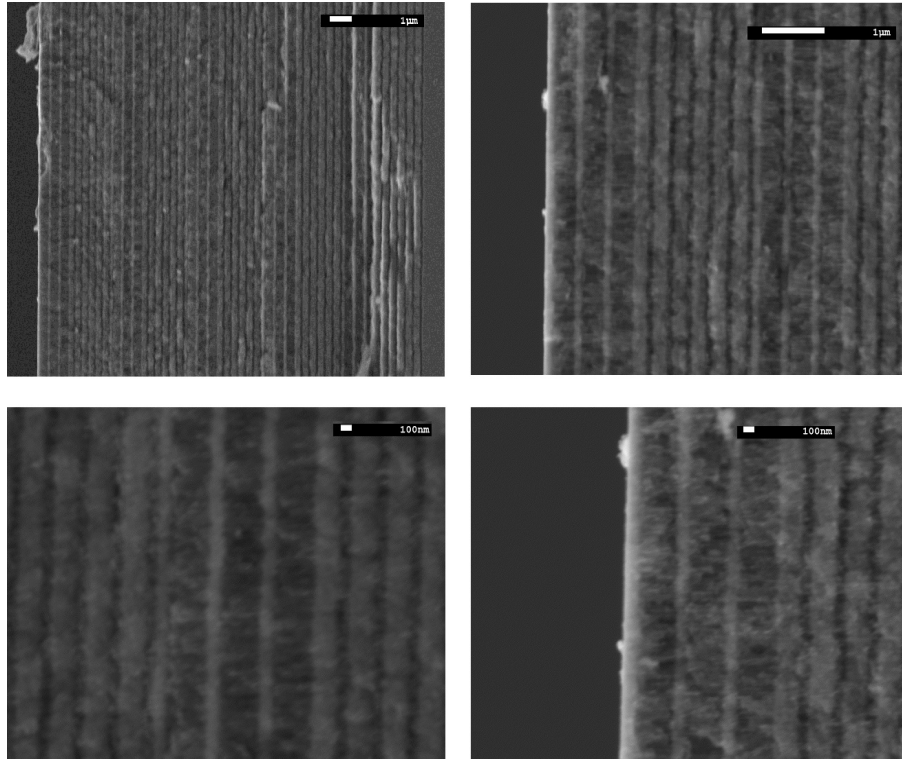


Figura 6.7: HRSEM de la estructura $(A_3B_6)^5$ con gradiente $\Delta(d) = 20\%$. Las zonas claras y oscuras corresponden a capas de baja y alta porosidad respectivamente.

cuando ΔE se incrementa (ver figura (6.8)(c)). En la figura (6.8)(c) se evalúa la reflectancia resuelta en el tiempo en función del ángulo de incidencia cuando un pulso gaussiano con $\delta=30$ nm (ancho del pulso) incide sobre la estructura. Se observa que las oscilaciones de Bloch fotónicas son retardadas y el periodo de oscilación cambia ligeramente de 256 fs a 184 fs para un rango de ángulos de 0° a 89.9° respectivamente. En resumen, un incremento en el ángulo de excitación conduce a un incremento en la intensidad de la señal reflejada y también a un incremento en el FWHM del pico resonante. Además, se encuentra que el periodo de oscilación cambia ligeramente 256 fs a 184 fs para un intervalo de ángulos de 0° a 89.9° .

En la figura (6.9) se muestra, que para un valor crítico del gradiente δ , el estado más bajo en WSLs2 y el estado más alto en WSLs1 se cruzan a una cierta energía del fotón $E_0 = 775$ meV (para 40° , ver (6.9)(a)), y 886 meV (para 60° , ver (6.9)(b)),

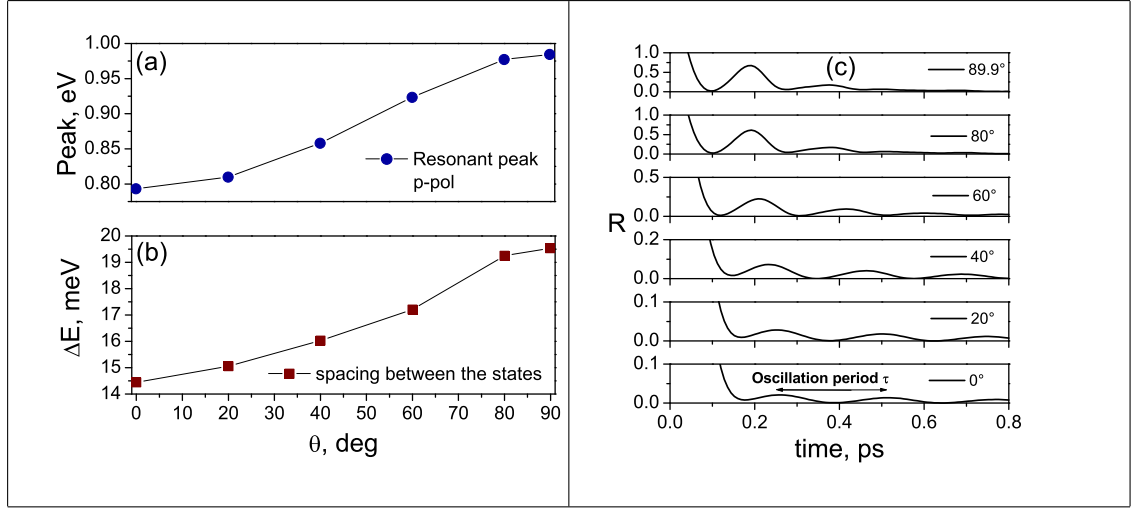


Figura 6.8: (a) Cálculo del corrimiento del segundo pico resonante en WSLs2 *vs* ángulo de incidencia (θ) en la estructura $(A_3B_6)^5$ con $\Delta d = 20\%$, y (b) espaciamiento entre los estados Stark (segundo y tercero) en las WSLs1 *vs* ángulo de excitación. (c) Cálculo de la reflectancia en resolución temporal, donde las oscilaciones de Bloch fotónicas se observan para un ángulo de 0° a 89.9° considerando la energía del segundo pico resonante en (a).

esto es, el acoplamiento resonante de los niveles en las dos WSLs conduce a una deslocalización de las ondas electromagnéticas y así surge el tunelamiento Zener. Podemos observar el tunelamiento Zener para $\Delta d = 20\%$ a dos diferentes ángulos de incidencia, 20° y 60° respectivamente. Con un incremento en el ángulo de excitación, el FWHM correspondiente al pico Zener se incrementa a medida que aumenta el ángulo de incidencia.

En la figura (6.10)(a) se muestra un corrimiento del pico resonante Zener para diferentes ángulos de incidencia de la luz. El pico cambia de 715 meV a 886 meV, para ángulos de 0° a 89.9° . Para observar el tunelamiento Zener, se calculó la reflectancia resuelta en el tiempo de un pulso gaussiano que incide sobre la estructura DP ($\Delta d = 20\%$) para diferentes ángulos (figura (6.10)(b)).

Los pulsos Gaussianos incidentes están centrados a diferentes valores de energía correspondientes a los valores del pico mostrado en la figura (6.10)(a). Para el caso mostrado en la figura (6.10)(b), el pulso incidente está centrado simultáneamente

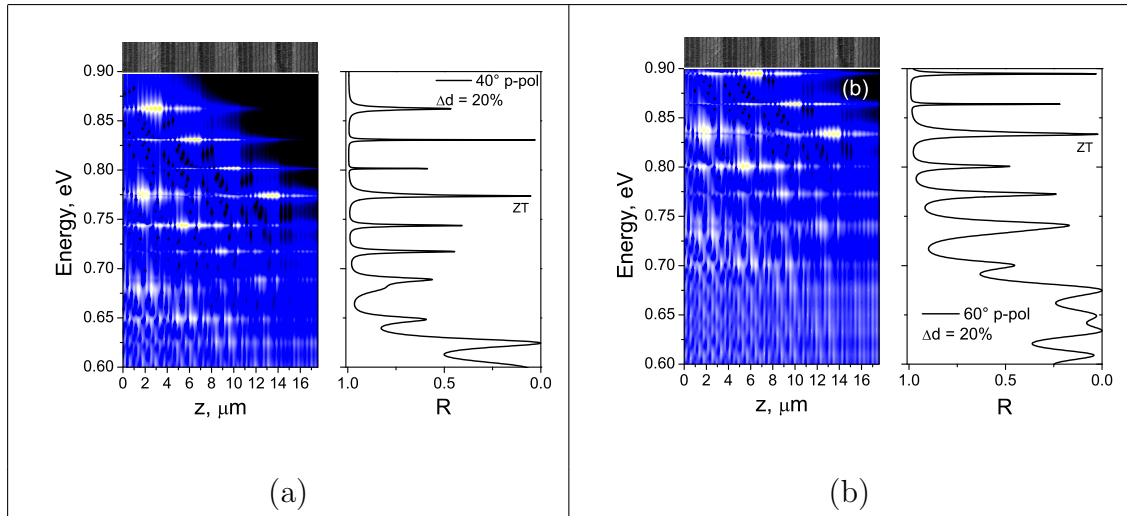


Figura 6.9: (a) Cálculo de la distribución de la intensidad del campo eléctrico (modos TM) en la estructura $(A_3B_6)^5$ con gradiente en los espesores físicos, $\Delta d = 20\%$ (situación de tunelamiento Zener) para dos diferentes ángulos de incidencia de la luz, (a) 40° and (b) 60° . Arriba de cada panel se muestra esquemáticamente la estructura $(A_3B_6)^5$.

en la energía del primer modo de la WSLs más alta y el último modo de la WSLs de abajo, esto es, considerando $\delta = 30$ nm (ancho del pulso). En la situación de tunelamiento Zener, un decaimiento más rápido y un retardo sustancial del pulso puede ser observado. El tiempo de decaimiento más rápido es debido a un acoplamiento más fuerte de los modos con el medio ambiente (aire) donde se encuentra la muestra y el retardo del pulso es causado por el tiempo necesario para construir la doble resonancia del modo Zener [21]. La reflectancia resuelta en el tiempo muestra una forma de línea no-Lorenziana ancha, contrario a la forma típica de una resonancia simple, esto significa, que cuando un pulso gaussiano excita una resonancia simple en la situación cuando las minibandas no están inclinadas ($\Delta d = 0\%$), la intensidad simplemente decae exponencialmente con el tiempo. La figura (6.10)(b) muestra como al incrementar el ángulo de incidencia, existe un incremento en la amplitud de la reflectancia resuelta en el tiempo y una forma más simétrica del pico.

En la figura (6.11) se presentan las mediciones de reflectancia realizada sobre cuatro muestras con diferentes gradientes en los espesores físicos, esto es, $\Delta d=0$,

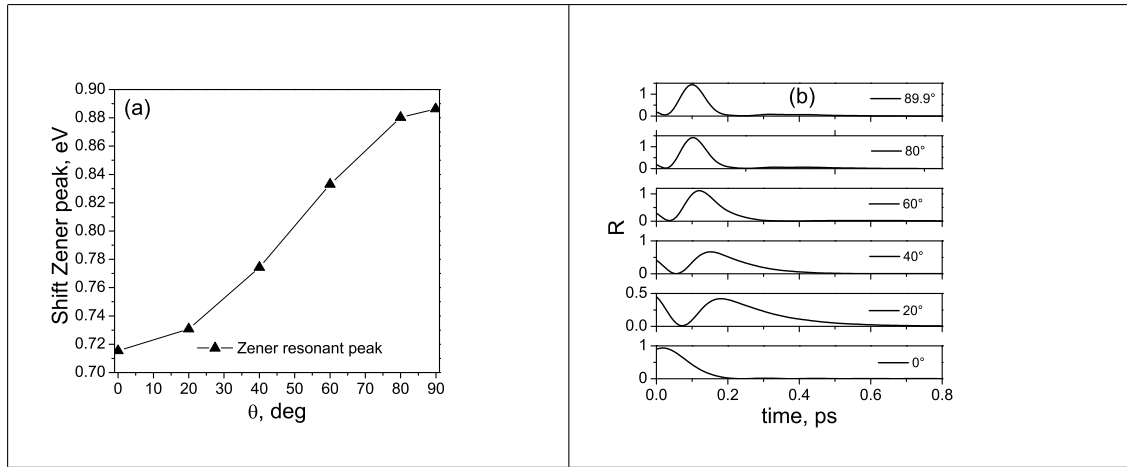


Figura 6.10: (a) Cálculo del corrimiento del pico Zener *vs* el ángulo de excitación (θ) en la estructura $(A_3B_6)^5$ con $\Delta d = 20\%$. (b) Reflexión resuelta en el tiempo como una función del ángulo de excitación cuando se considera un pulso Gaussiano con $\delta = 30$ nm.

$\Delta d=10$, $\Delta d=18$, y $\Delta d=20\%$. Todas las medidas se realizaron a dos ángulos de incidencia diferentes. De la figura (6.11)(a)-figura (6.11)(d), el pico etiquetado como 4 es el cuarto pico de transmisión en la primera MB (denotada como MBs1), y el pico etiquetado como 1 es el primer pico de transmisión de la MB de arriba más cercana (denotada como MBs2). A medida que Δd se incrementa, se puede observar claramente la evolución de esos dos picos, así como también las resonancias de Wannier-Stark y consecuentemente el tunelamiento Zener puede ser observado para gradientes mayores. Para $\Delta d=0\%$ observamos picos resonantes discretos (MBs1) y (MBs2). Los picos 4 y 1 aparecen a las energías del fotón de 783 meV y 835 meV a 20° , respectivamente. Podemos observar que esos picos se desplazan a 834 meV y 880 meV para 60° . Para $\Delta d=10\%$, las dos escaleras de Wannier-Stark se forman y el pico resonante aparece en 726 meV (pico 4 en WSLs1) y 775 meV (pico 1 en WSLs2) para 20° . Tales picos resonantes se mueven a 800 meV y 852 meV para 60° , respectivamente. Cuando $\Delta d=18\%$ los picos están localizados a 717 meV y 743 meV para 20° y cada pico se mueve a 786 meV y 821 meV para 60° , es decir, estos llegan a estar cada vez más cercanos. Finalmente, en la situación de tunelamiento Zener, el último pico de transmisión 4 de la WSLs1 cubre completamente el primer pico de transmisión 1 de la WSLs2. Los estados de diferentes WSLs llegan a acoplarse uno

con el otro cuando la diferencia de frecuencias entre estos es más pequeña que el ancho de los picos como ya se había discutido anteriormente. En este caso, el pico aparece a 736 meV para 20° y se desplaza a 819 meV para 60° . Todas las mediciones de la reflectancia coinciden en gran medida con las simulaciones numéricas.

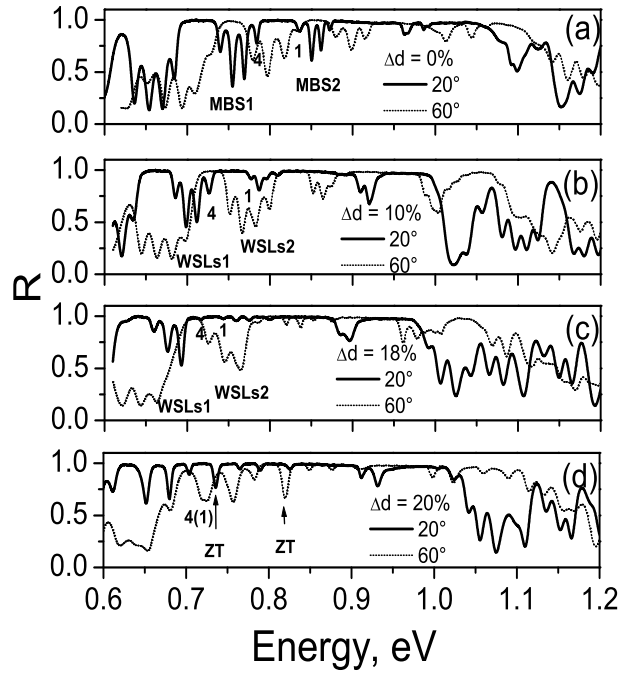


Figura 6.11: Espectros medidos de la estructura DP como función del gradiente en los espesores físicos de la multicapa (Δd) (a) $\Delta d = 0\%$. (b) $\Delta d = 10\%$. (c) $\Delta d = 18\%$, and (d) $\Delta d = 20\%$, donde se observa el tunelamiento Zener para dos ángulos diferentes.

En resumen, se diseñaron y fabricaron estructuras multicapas doblemente periódicas con SP para estudiar las características de propagación de ondas electromagnéticas. Una variación lineal en el espesor físico del sistema revela la presencia de dos escaleras de Wannier-Stark y de tunelamiento Zener resonante. Con parámetros estructurales específicos, se han demostrado teóricamente las oscilaciones de Bloch fotónicas y el TZ resonante. Las OB resueltas en el tiempo pueden ser observadas con un período de $T_B = 248 fs$ en una distancia local de aproximadamente $14 \mu m$ entre los bordes de las bandas a una energía de entrada específica. También se observa

que las EWS, OB y TZ pueden ser sintonizados variando el ángulo de incidencia de la luz.

Conclusiones y perspectivas a futuro

En los capítulos precedentes se han presentado las recientes investigaciones sobre como fabricar estructuras de multicapas usando el silicio en su forma porosa para aplicaciones ópticas. En particular se han diseñado algunas estructuras tales como microcavidades, heteroestructuras híbridas (HH), estructuras con secuencias deterministas-aperiódicas, estructuras "simples" (gradiente no lineal) y en especial, fueron analizadas diferentes estructuras doblemente-periódicas, donde se introdujo un gradiente en los índices de refracción de las capas constituyentes, así como también se introdujo un gradiente lineal en los espesores físicos de las mismas donde se ha roto la simetría traslacional del sistema. En las estructuras simples, se obtuvieron EWS y OB. En este tipo de estructuras, no fue necesario introducir defectos de capa para poder localizar modos resonantes (EWS) dentro de la estructura, con lo que se mostró que el sistema es equivalente a el sistema del caso de superredes de semiconductores cuando se les aplica un campo eléctrico externo. El fenómeno de EWS y OB se analizó y mostró de dos formas. En la primera, se realizó un barrido en el $\sin^2\theta$ y se observó la respuesta de la transmitancia mostrando picos resonantes muy localizados separados a la misma distancia (EWS). En la segunda, se logró obtener un tipo de filtro que mostró el mismo fenómeno de las EWS en un espectro de reflectancia en función de la energía del fotón para ciertos valores bien definidos del ángulo de incidencia de la luz. El periodo de las OB que manifiestan las estructuras se puede ampliar o disminuir si se seleccionan adecuadamente los parámetros que describen a la estructura, además de que la respuesta óptica puede escalarse a diferentes longitudes de onda.

En el segundo tipo de estructuras, las DP, que son muy parecidas a las microcavidades acopladas, se estudiaron las características de propagación de ondas electromagnéticas cuando se les introdujo un gradiente lineal en los espesores ópticos de las capas que componen la estructura. Una variación lineal en el índice de refracción, así como también en los espesores físicos del sistema revela la presencia de escaleras de Wannier-Stark y seleccionando adecuadamente los parámetros de crecimiento y el gradiente aplicado, fue posible observar tunelamiento Zener resonante. Se mostró que una variación en el ángulo de incidencia conduce a un cambio

significativo en el periodo de oscilación de las ondas electromagnéticas cuando son atrapadas dentro de la estructura.

Como se ha mostrado a lo largo de esta tesis, este tipo de estructuras se pueden ver como un nuevo tipo de cavidad Fabry-Perot, donde los reflectores son reemplazados por regiones no propagadoras asociadas con la periodicidad local de la estructura. También es posible sintonizar el periodo de las oscilaciones de Bloch en una misma estructura, si consideramos estructuras donde el gradiente aplicado sea de forma no lineal, de tal manera que la inclinación de la estructura de bandas también será no lineal.

Esperamos que estas investigaciones sean aplicadas para diseñar un nuevo tipo de "switch" óptico basados en estructuras de multicapas porosas, donde sea posible el sensado de diferentes moléculas. Además, el entendimiento de las propiedades ópticas de estos sistemas puedan ser útiles en el diseño de novedosos dispositivos donde sea posible modular la propagación de ondas electromagnéticas en el orden de los Terahertz para aplicaciones bio-médicas.

Bibliografía

- [1] F. Bloch, Z. Phys. **52**, 555 (1928); C. Zener, Proc. R. Soc. London A **145**, 523 (1934).
- [2] A. G. Chynoweth et al., Phys. Rev. Lett. **5**, 57 (1960).
- [3] R. Sapienza, P. Costantino, D. Wiersma, M. Ghulinyan, C.J Oton, L. Pavesi. Phys. Rev. Lett. **91**, 263902. (2003).
- [4] E. E. Mendez et al., Phys. Rev. Lett, **60**, 2426 (1988).
- [5] V. Agarwal, J. A. del Río, G. Malpuech, M. Zamfirescu, A. Kavokin, Phys. Rev. Lett. **92**, 097401 (2004).
- [6] G. Monsivais et al., Phys. Rev. Lett., **64**, 1433 (1990).
- [7] A. Kavokin et al., Phys. Rev. B, **61**, 4413 (2000).
- [8] Virginie Lousse et al., Phys. Rev. B, **72**, 075119 (2005).
- [9] G. Lenz et al., Phys. Rev. Lett, **83**, 963 (1999).
- [10] M. B. Dahan, E. Peik, J. Reichel, Y. Castin, and C. Salomon, Phys. Rev. Lett. **76**, 4508 (1996).
- [11] Steven R. Wilkinson et al., Nature (London) **387**, 575 (1997).
- [12] O. Morsch, J. H. Mller, M. Cristiani, D. Ciampini, and E. Arimondo, Phys. Rev. Lett. **87**, 140402 (2001).

-
- [13] Artur R. Davoya et al., Appl. Phys. Lett. **94**, 161105 (2009).
- [14] N. D. Lanzillotti-Kimura et al., Phys. Rev. Lett. **104**, 197402 (2010).
- [15] Properties of Porous Silicon, Edited by Leigh Canham DERA, Malvern, UK. Published by: INSPEC, The Institution of Electrical Engineers, London, United Kingdom (1997).
- [16] V. Agarwal and J. A. del Río, Appl. Phys. Lett, **82**, 1512 (2003).
- [17] J. O. Estevez, J. Arriaga, A. Méndez Blas, V. Agarwal. Appl. Phys. Lett. **93**, 191915 (2008).
- [18] J. O. Estevez et al., Appl. Phys. Lett, **94**, 061914 (2009).
- [19] S. Fahr et al., Optics Express, **16**, 9332 (2008).
- [20] M. Ghulinyan et al., Appl. Phys. Lett. **93**, 061113 (2008).
- [21] M. Ghulinyan, C. J. Oton, Z. Gaburro, L. Pavesi. Phys. Rev. Lett. **94**, 127401 (2005).
- [22] M. Ghulinyan, Z. Gaburro, C. Toninelli, L. Pavesi, D. S. Wiersma, Nat. Photon. **1**, 172-175 (2007).
- [23] Jonh P. McKelvey, Robert E. Krieger Publishing Company. Malabar, Florida, (1966).
- [24] Yoder M. N. Electron Devices **43**, 1633 (1996).
- [25] Yablonovitch, Eli, Phys. Rev. Lett. **58**, 2059 (1987).
- [26] John S. Phys. Rev. Lett. **58**, 2486 (1987).
- [27] Kuilong Yu, Tongxiang Fan, Shuai Lou, Di Zhang, Progress in Material Science, **58**, 825-873 (2013).
- [28] Pete Vukusic and J. Roy Sambles, NATURE, **424**, (2003).
- [29] L. Chen, Y. Suzuki and G.E. Kohnke, Appl. Phys. Lett. **80**, 1514 (2002).

-
- [30] R. Sapienza, T. Coenen, J. Renger, M. Kuttge, N.F. van Hulst, and A. Polman, *NATURE MATERIALS*, **11** (2012).
- [31] L. P. Biró Zs. Bálint, K. Kertész, Z. Vértesy, G. I. Márk, Z. E. Horváth, J. Balázs, D. Méhn, I. Kiricsi, V. Lousse, and J. P. Vigneron, *Phys. Rev. E*, **67**, 021907 (2003).
- [32] José Octavio Estevez Espinoza, Tesis de maestría: "Espejos omnidireccionales basados en multicapas de silicio poroso", IFUAP-BUAP (2008).
- [33] J. D. Joannopoulos, R. D. Meade, and J. N. Winn, *PHOTONIC CRYSTALS: MOLDING THE FLOW OF LIGHT*, Princeton University Press, (1995).
- [34] Kazuaki Sakoda, *Springer Series in Optical Science*, 80, Springer Verlag, Mayo (2001).
- [35] *Photonic Band Gap Materials*, Proceedings of the NATO ASI on Photonic Band Gap Materials, Crete, Greece, June 18-30, 1995, Editado por C. Soukoulis, (NATO ASI Series, Kluwer Academic Publishers, The Netherlands, (1996).
- [36] H. Kosaka, et al., *Phys. Rev. B*. 58, R10096 (1998); *ibid*, *Appl. Phys. Lett.*, **74**, 1212 (1999).
- [37] H. Kosaka, et al., *Appl. Phys. Lett.* **74**, 1370 (1999); *ibid*, *J. Lightwave Technol.* **17**, 2032 (1999).
- [38] N. Notomi, *Phys. Rev. B*, **62**, 10696 (2000).
- [39] S. Fetoinoupolou and C. M. Soukoulis, *Phys. Rev. B*, **67**, 235107 (2003).
- [40] Y. Fink, J. N. Winn, S. Fan, C. Chen and J. D. Joannopoulos, *Science*, **282**, 1679 (1998).
- [41] A. Bruyant, G. Lerondel, P. J. Reece and M. Gal, *Appl. Phys. Lett.* **82**, 3227 (2003).
- [42] E. Xifré-Pérez, L. F. Marsal, J. Pallarès and J. Ferré-Borrull, *J. Appl. Phys.*, **97**, 064503 (2005).

-
- [43] J. C. Knight, et al., *Science*, **282**, 1476 (1998); J. C. Knight and P. St. J. Russell, *Science*, **296**, 276 (2002).
- [44] G. Amato, C. Delerue and H. J. von Bardeleben, Gordon and Breach Science Publishers (1997).
- [45] J. Octavio Estevez, J. Arriaga, A. M.-Blas, E. Reyes-Ayona, J. Escorcía, V. Agarwal, *Nanoscale Research Letters* **7** 413 (2012).
- [46] Bertolotti J, Gottardo S, Wiersma DS, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 113903 (2005).
- [47] W. H. Zheng, P. Reece, B. Q. Sun, *M. Gal. Appl. Phys. Lett.* **84**, 3519 (2004).
- [48] MIAO Feng-Juan, ZHANG Jie, XU Shao-Hui, WANG Lian-Wei, CHU Jun-Hao, CAO Zhi-Shen, ZHAN Peng, WANG Zhen-Lin. *Chin. Phys. Lett.* **26**, 044207 (2009).
- [49] M.B. de la Mora , O.A. Jaramillo , R. Nava, J. Tagüena -Martínez, J.A. del Río. *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* (2009).
- [50] A. G. Palestino, M. B. de la Mora, J. A. del Río, C. Gergely, E. Pérez. *Appl. Phys. Lett.* **91**, 121909 (2007).
- [51] M. Ghulinyan, C. J. Oton, Z. Gaburro, P. Bettotti, L. Pavesi. *Appl. Phys. Lett.* **82**, 1550-1552 (2003).
- [52] T. V. Dolgova, A. I. Maĭdikovskiĭ, M. G. Martem'yanov, G. Marovsky, G. Mattei, D. Schuhmacher, V. A. Yakovlev, A. A. Fedyanin, and O. A. Aktsipetrov. *JETP Letters*, **73**, 6-9 (2001).
- [53] T. V. Dolgova, A. I. Maĭdykovski, M. G. Martemyanov, A. A. Fedyanin, and O. A. Aktsipetrov. *JETP Letters*, **75**, 15-19(2002).
- [54] H. Ouyang, C. C. Striemer, P. M. Fauchet. *Appl. Phys. Lett.* **88**, 163108 (2006).
- [55] S. Li, J. Huang, L. Cai, *Nanotechnology* **22**, 425502 (2011).
- [56] Claudia Pacholski. *Sensors* **13**, 4694-4713 (2013).

-
- [57] Tatyana V. Murzina, Fedor Yu. Sychev, Irina A. Kolmychek, Oleg A. Akt-sipetrov. *Appl. Phys. Lett.* **90**, 161120 (2007).
- [58] Sharon M. Weiss, Huimin Ouyang, Jidong Zhang, Philippe M. Fauchet. *Opt. Express* **13**, 1090 (2005).
- [59] K. Pérez, J. O. Estevez, A. Méndez-Blas, J. Arriaga. *J. Opt. Soc. Am. B* **29** (4), 538-542 (2012).
- [60] A. David Ariza-Flores, L. M. Gaggero-Sager, V. Agarwal. *Appl. Phys. Lett.* **101**, 031119 (2012).
- [61] Nobuyuki Ishikura, Minoru Fujii, Kohei Nishida, Shinji Hayashi, Joachim Di-ener. *Infrared Physics & Technology*, **53** (4), 292-294 (2010).
- [62] Simone Ciampi, Till Böcking, Kristopher A. Kilian, Jason B. Harper, and J. Justin Gooding. *Langmuir* **24**, 5888-5892 (2008).
- [63] F. Cunin, Thomas A. Schmedake, Jamie R. Link, Yang Yang Li, Jennifer Koh, Sangeeta N. Bhatia & Michael J. Sailor. *Nature Materials* **1**, 39-41 (2002).
- [64] A. M. Ruminski, G. Barillaro, E. Secret, W. D. Huang, A. Potocny, U. Carion, C. Wertans, and M. J. Sailor. *Adv. Optical Mater.* (2013).
- [65] Yang Yang Li, Frédérique Cunin, Jamie R. Link, Ting Gao, Ronald E. Betts, Sarah H. Reiver, Vicki Chin, Sangeeta N. Bhatia, Michael J. Sailor. *Science* **299**, 2045-2047 (2003).
- [66] K.A. Kilian, T. Böcking, S. Ilyas, K. Gaus, W. Jessup, M. Gal, J. J. Gooding, *Adv. Funct. Mater.* **00**, 1-8 (2007).
- [67] Claudia Pacholski, Christine Yu, Gordon M. Miskelly, Denis Godin, M. J. Sailor, *J. AM. CHEM. SOC.* **128**, 4250-4252 (2006).
- [68] SILICON NANOCRYSTALS. Ed. by Lorenzo Pavesi and Rasit Turan. 14 Sil- icon Nanocrystals in Porous Silicon and Applications. (WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2010).

-
- [69] L. Dal Negro, C. J. Oton, Z. Gaburro, L. Pavesi, P. Johnson, A. Legendijk, *Phys. Rev. Lett.* **90**, 055501 (2003).
- [70] L. Moretti, I. Rea, L. Rotiroti, I. Rendina, G. Abbate, A. Marino, L. De Stefano. *Opt. Express* **14**, 6264 (2006).
- [71] J. O. Estevez, J. Arriaga, A. Méndez-Blas, M. G. Robles-Cháirez, D. A. Contreras-Solorio, *J. Appl. Phys.* **111**, 013103 (2012).
- [72] J. E. Lugo, B. de la Mora, R. Doti, R. Nava, J. Tagüeña, A. del Río, J. Faubert. **17**, 3042-3051 (2009).
- [73] M. B. de la Mora, J. A. del Río, R. Nava, J. Tagüeña-Martínez, J. A. Reyes-Esqueda, A. Kavokin, J. Faubert, J. E. Lugo. *Opt. Express* **18**, 22808-22816 (2010).
- [74] S. W. Leonard, H. M. van Driel, K. Busch, S. John, A. Birner, A. Birner, A.-P. Li, F. Müller, U. Gösele, V. Lehmann. *Appl. Phys. Lett.* **75**, 3063 (1999).
- [75] R. B. Wehrspohn, and J. Schilling. *phys. stat. sol. (a)* **197**, 673-687 (2003).
- [76] S.M. Weiss, M. Haurylau, P.M. Fauchet. *Optical Materials* **27**, 740-744 (2005).
- [77] Gonzalo Recio-Sánchez, Zhiya Dang, Vicente Torres-Costa, Mark BH Breese, Raul-Jose Martín-Palma. *Nanoscale Research Letters* **7**, 449 (2012).
- [78] Zhiya Dang, Mark BH Breese, Gonzalo Recio-Sánchez, Sara Azimi, Jiao Song, Haidong Liang, Agnieszka Banas, Vicente Torres-Costa, Raúl José Martín-Palma. *Nanoscale Research Letters* **7**, 416 (2012).
- [79] M. Haurylau, S. P. Anderson, K. L. Marshall, P. M. Fauchet. *Appl. Phys. Lett.* **88**, 061103 (2006).
- [80] F. Genereux, S. W. Leonard, H. M. van Driel, A. Birner, and U. Goösele. *Phys. Rev. B*, **63**, 161101(R) (2001).
- [81] R. J. Martín-Palma, M. Manso, M. Arroyo-Hernández, V. Torres-Costa, J. M. Martínez-Duart. *Appl. Phys. Lett.* **89**, 053126 (200).

- [82] F. Müller, A. Birner, U. Gösele, V. Lehmann, S. Ottow, H. Föll. *Journal of Porous Materials* **7**, 201-204 (2000).
- [83] A. Birner, A.-P. Li, F. Müller, U. Gösele, P. Kramper, V. Sandoghdar, J. Mlynek, K. Busch, V. Lehmann. *Materials Science in Semiconductor Processing* **3** 487-491 (2000).
- [84] Mindy Lee and Philippe M. Fauchet. *Opt. Express* **15**, 4532-4535 (2007).
- [85] Two- and three-dimensional photonic crystals made of macroporous silicon and liquid crystals. Guido Mertens, Thorsten Röder, Heinrich Matthias, Heinrich Marsmann, Heinz-Siegfried R. Kitzerow, Stefan L. Schweizer, Cecile Jamois, Ralf B. Wehrspohn, Mary Neubert. *Appl. Phys. Lett.*, **83**, 3036-3038 (2003).
- [86] G. Recio-Sánchez, V. Torres-Costa, M. Manso-Silván, R. J. Martín-Palma. *Journal of Nanotechnology* (2012).
- [87] Albert Birner, Ralf B. Wehrspohn, Ulrich M. Gösele, Kurt Busch. *Adv. Mater.* **13**, 377-388 (2001).
- [88] K Wang, A Chelnokov, S Rowson, P Garoche, J-M Lourtioz. *J. Phys. D: Appl. Phys.* **33**, L119-L123 (2000).
- [89] V. V. Aristov, S. A. Magnitskii, V. V. Starkov, A. V. Tarasishin, A. M. Zheltikov. *Laser Physics* **10**, 946-951 (2000).
- [90] R. Hillebrand, St. Senz, W. Hergert, U. Gösele. *J. Appl. Phys.* **94**, 2758-2760 (2003).
- [91] J. Schilling, J. White, A. Scherer, G. Stupian, R. Hillebrand, U. Gösele. *Appl. Phys. Lett.* **86**, 011101 (2005).
- [92] J. Schilling, F. Müller, S. Matthias, R. B. Wehrspohn, U. Gösele, K. Busch. *Appl. Phys. Lett.*, **78**, 1180-1182 (2001).
- [93] Paul V. Braun, Stephanie A. Rinne, Florencio García-Santamaría, *Adv. Mater.* **18**, 2665-2678 (2006).

-
- [94] Sven Matthias, Frank Müller, Ulrich Gösele. *J. Appl. Phys.* **98**, 023524 (2005).
- [95] Heinrich Matthias, Thorsten Röder, Ralf B. Wehrspohn, Heinz-S. Kitzerow, Sven Matthias, Stephen J. Picken. *Appl. Phys. Lett.* **87**, 241105 (2005).
- [96] N. Matuschek, F.X. Kärtner, U. Keller, *IEEE J. Selected Topics Quantum Electron*, **4** (1998).
- [97] K. Busch, G. von Freymann, S. Linden, S.F. Mingaleev, L. Tkeshelashvili, M. Wegener, *Phys Rep*, **444**, 101 (2007).
- [98] St. Frohnhoff, M.G. Berger, M. Thonissen, C. Dieker, L. Vescan, H. Munder and H. Luth, *Thin Sol. Films*, **255**, 59 (1995).
- [99] O. Bisi, S. Ossicini and L. Pavesi, *Surf Science Rep*, **38**, 1, (2000).
- [100] Karina S Pérez, J Octavio Estevez, Antonio Méndez-Blas, Jesús Arriaga, Gabriela Palestino and Miguel E Mora-Ramos, *Nanoscale Research Letters* **7**, 392 (2012).
- [101] L. Pavesi, *Riv. Nuovo Cimento*. Vol **20**, N.10, (1997).
- [102] J. L. Coffey. Porous silicon formation by stain etching. In L Canham, editor, *Properties of Porous Silicon*, volume 18 of *Emis Datareviews Series*, page 223. INSPEC, IEE, London, United Kingdom, 1997.
- [103] A. Uhlir, *Bell System Technology Journal*, **35**, 333 (1956).
- [104] J.C. Lin et al., *Appl. Phys. Lett.* **89**, 121119 (2006).
- [105] Y. Watanabe and T. Sakai, *Rev. Elec. Commun. Lab.*, **19**(7-8):899, (1971)
- [106] Y. Watanabe, Y. Arita, T. Yokoyama, and Y. Igarashi *J. Electrochem. Soc.*, **122**, 1351 (1975).
- [107] T. Unagami. Oxidation of porous silicon and properties of its oxide film. *Jpn. J. Appl. Phys.*, **19**, 231 (1980).
- [108] L. T. Canham. *Appl. Phys. Lett.*, **57**, 1046 (1990).

-
- [109] Porous Silicon: material processing, properties and applications, France Telecom-CNET, BP. 98, 38243 Meylan cedex, France. 1994.
- [110] R. L. Smith and S. D. Collins. *J. Appl. Phys.*, **71**(8):R1, (1992).
- [111] L. Canham, *New Scientist*, 1868 (1993).
- [112] V. Lehmann and U. Gosele, *Appl. Phys. Lett.*, **58**, 856 (1991).
- [113] C. Pickering, M.I.J Beale, D.J. Robbins, P.J. Pearson and R. Greef, *J. Phys. C: Solid State Phys.*, **17**, 1046 (1984).
- [114] H. Ouyang, *Adv. Funct. Mater.*, **15**, 1851 (2005).
- [115] M.J. Eddowes, *J. Electroanal. Chem.*, **280**, 297 (1990)
- [116] D.R. Turner, *J. Electrochem. Soc.*, **105**, 402 (1958).
- [117] R. Memming, G. Schwandt, *Surf. Sci.*, **4**, 109 (1966).
- [118] Y. E. Makushot, V. P. Parkhutik and J. M. Martínez-Duart, *J. Phys. D: Appl. Phys.*, **27**, 661 (1994).
- [119] L. Canham, IEE INSPEC, The institution of Electrical Engineers, London, 1997.
- [120] P. M. Fauchet, J. Von Behren, L. Tsybeskov and S. P. Duttagupta, *Phys. Stat. Sol.(a)*, **165** 3, (1998).
- [121] J. Rouquerol, D. Avnir, C. W. Fairbridge, D. H. Everett, J. M. Haynes and N. Pernicone, *Pure Appl. Chem.*, **66** 1739 (1994).
- [122] M.I.J. Beale, J. D. Benjamini, M. J. Uren, N. G. Chew, and A. G. Cullis, *J. Cryst. Growth*, **73**, 622 (1985).
- [123] J. P. Gonchond, A. Halimaoui, and K. Ogura, in *Microscopy of Semiconducting Materials*, Edited by A. G. Cullis and N. J. Long, IOP Publishing Ltd., Bristol, 235 (1991)

-
- [124] P.Y.Y. Kan, S.E. Foss, and T.G. Finstad, *Phys. Stat. Sol. (a)*, **202** 1533 (2005).
- [125] M. B. Robinson, A. C. Dillon, and S. M. George, *Appl. Phys. Lett.* **62**, 1493 (1993).
- [126] G. Bomchil, A. Halimaoui, and R. Herino, *Microelectronic Engineering*, **8**, 293 (1988).
- [127] L. T. Canham, M. R. Houlton, W. Y. Leong, C. Pickering and J. M. Keen, *J. Appl. Phys.* **70**, 422 (1991).
- [128] A. G. Cullis, L. T. Canham and P. D. J. Calcott, *Appl. Phys. Rev.* **82**, 3, (1997).
- [129] L. T. Canham, A. G. Cullis, C. Pickering, O. D. Dosser, T. I. Cox, and T. P. Lynch. *Nature*, **368**, 133 (1994).
- [130] D. Bellet and L. T. Canham. *Adv. Mater.*, **10**, 487 (1998).
- [131] T. Gao, J. Gao, M. J. Sailor, *Langmuir*, **18**, 9953 (2002).
- [132] K. P. S, D. P. Greiner, M. Sailor, *J. Am.Chem.Soc.*, **121**, 7925 (1999).
- [133] C. Steinem, A. Janhoff, V. S. Y. Lin, N. H. Volcker, M. R. Ghadiri, *Tetrahedron*, **60**, 11259 (2004).
- [134] A. Nakajima, T. Itakura, S. Watanabe, N. Nakayama, *Appl. Phys. Lett.*, **61**, 46 (1992).
- [135] H. Ouyang. L. A. De Louise, B. L. Miller, M. Fauchet, *Anal. Chem.*, **79**, 1502 (2007).
- [136] M. Stuzmann, J. Weber, M.S. Brandt, H.D. Fuchs, M. Rosenbauer, P. Deak, A. Hopner and A. Breitschwerdt, *Solid State Physics*, **32**, 179 (1992).
- [137] V. Lysenko, P. H. Roussel, B. Remaki, G. Delhomme, V. Strikha, C. Martelet, D. Barbier and A. Dittmar, *J. Porous Mat.*, **7**, 177 (2000).
- [138] C.Mazzoleni, and L.Pavesi, *Appl. Phys. Lett.* **67**, 2983, (1995).

-
- [139] NANOPHOTONIC MATERIALS. Ed. by R. B. Wehrspohn, H.-S. Kitzerow, and K. Busch. (WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim, 2008).
- [140] NANOPHOTONIC. Ed. by Paras N. Prasad. Chapter 9. Photonic Crystals. (John Wiley & Sons, Inc, 2004).
- [141] ORDERED POROUS NANOSTRUCTURES AND APPLICATIONS. Ed. by Ralf B. Wehrspohn. Chapter 7. Macroporous Silicon Photonic Crystals. (Springer Science +Business Media, Inc., 1995).
- [142] PHOTONIC CRYSTALS: THEORY, APPLICATIONS, AND FABRICATION. D. W. Prather, S. Shi, S. Sharkawi, J. Murakowski, and G. J. Schneider. (Wiley, 2009).
- [143] K. Busch, S. John, Phys. Rev. E **58** 3896 (1998).
- [144] J. N. Winn et al., Opt. Lett., **23**, 1573 (1998).
- [145] E. Xifré Pérez, T. Trifonov, J. Pallarès and L.F. Marsal, Phys. Stat. Sol. (c) **2**, 3466 (2005).
- [146] P. Yeh, “Optical Waves in Layered Media”, John Wiley and Sons, 1998.
- [147] L. Pavesi and V. Molloni, J. Lumine., **80**, 43 (1999).
- [148] W. Theiss, Surf. Sci. Rep. **29**, 97 (1997).
- [149] H. F. Arrand, Optical Waveguides and Components Based on Porous Silicon, University of Nottingham, UK, 1997.
- [150] A. E. Pap, K. Kordás, J. Vähäkangas, A. Uusimäk, S. Leppävuori, L. Pilon and S. Szatmári, Optical Materials, **28**, 506513 (2006).
- [151] M. Khardani, M. Bouaïcha and B. Bessaïs, Phys. Stat. Sol. (c) **4**, 6 (2007).
- [152] J. Feldmann, K. Leo, D. A. B. Miller, J. E. Cunningham, T. Meier, G. Von Plessen, A. Schulze, P. Thomas, and S. Schmitt-Rink, Phys. Rev. B. **46** 7252 (1992).

-
- [153] E. Jódar and A. Pérez-Garrido, *Phys. Stat. Sol. (a)*, **204** 1892 (2007).
- [154] E. Jódar, A. Pérez-Garrido, and A. Díaz-Sánchez, *Phys. Rev. B*, **73** 205403 (2006).
- [155] T. Hartman, F. Keck, H. J. Korsch, and S. Mossmann, *New J. Phys.*, **6** 2 (2004).
- [156] V. Grecchi and S. Sacchetti, *Phys. Rep.*, **63** 122303 (2001).
- [157] M. Glüch, A. R. Kolovsky, and H. J. Korsch, *Phys. Rep.*, **366** 103 (2002).
- [158] H. N. Nazareno, C. A. Da Silva, and P. E. De Brito, *Phys. Rev. B*, **50** 4503 (1994).
- [159] H. N. Nazareno and P. E. De Brito, *Phys. Rev. B*, **64** 045112 (2001).
- [160] L. Esaki and R. Tsu, *IBM J. Res. Dev.*, **14** 61 (1970).
- [161] G. H. Wannier, *Phys. Rev.*, **117** 432 (1969).
- [162] M. Grifoni and P. Hänggi, *Phys. Rep.*, **304** 229 (1998).
- [163] K. Unterrainer, B. J. Keay, M. C. Wanke, S. J. Allen, D. Leonard, G. Medeiros-Ribeiro, U. Bhattacharya, and M. J. W. Rodwell, *Phys. Rev. Lett.* **76** 2973 (1996).
- [164] www.complexphotonics.org, e-mail:[sapienza@lens.unifl.it].
- [165] C. M. de Sterke, J. N. Bright, P. A. Krug, and T. E. Hammon, *Phys. Rev. E* **57** 2365 (1988).
- [166] P. B. Wilkinson, *Phys. Rev. E* **65** 056616 (2002).
- [167] Q. Qin, H. Lu, S. N. Zhu, C. S. Yuan, Y. Y. Zhu, and N. B. Ming, *Appl. Phys. Lett.* **82**, 4654-4656 (2003).
- [168] A. G. Yamilov, M. R. Herrera, and M. F. Bertino, *J Opt Soc Am: B* **25**: 599-608 (2008).

Apéndice A

Pasos para la fabricación de silicio poroso.

A.1 Pasos para la fabricación de silicio poroso

Debido a que la calidad de las muestras está directamente relacionada con la atención y la secuencia de cada uno de los pasos empleados para una buena reproducibilidad en la elaboración de cada muestra, se mencionan con detalle los pasos seguidos para la obtención de las muestras de SP:

Paso 1: Corte de las obleas. Primeramente se cortan las obleas de tal forma que se optimice el número de muestras por oblea (1.5cm x 1.5cm aproximadamente) y tratando de que no se ensucie o se raye la superficie que será atacada (cara pulida).

Paso 2: Limpieza de la oblea de Si. Esta etapa, consiste en la preparación de la oblea de Si para que posteriormente sea atacada por el HF. Aquí se consideran dos aspectos importantes que han dado los mejores resultados; a) eliminación de impurezas tales como grasa, polvo, etc., mediante un baño ultrasónico con agua desionizada y etanol (grado reactivo); y b) eliminación de la capa protectora de SiO₂ sobre la oblea con una solución de HF al 10% o dejar la muestra en la solución por 10 minutos antes de que se le aplique la corriente.

Paso 3: Montaje de la oblea. Una vez realizados los pasos anteriores se procede a preparar y armar la celda electroquímica. En seguida se coloca el cátodo (alambre de platino en forma de espiral) a una distancia de 1 cm por arriba del ánodo (oblea de Si).

Paso 4: Preparación de la solución electrolítica. Se miden por separado en una probeta graduada 5 ml de HF al 40 % y 5 ml de etanol (99.98%). Posteriormente se combinan los reactivos en un vaso de precipitado y la mezcla resultante se agita con una pipeta hasta que se disuelvan completamente cada uno de los reactivos.

Paso 5: Anodización de la oblea de Si. Una vez puesta la solución en la celda, la anodización está lista para llevarse a cabo. Pero antes de iniciar, hay que fijar las condiciones de corriente-tiempo y el número de ciclos que sean necesarios según la muestra que se requiera. Para esto, previamente se hace una tabla de datos (como archivo.txt) de corrientes y tiempos índices de refracción-espesores de las capas) según sea el caso, la cual se importa desde un programa en Labview (ver figura 2.12). Una vez realizado esto, se corre el programa, con lo cual se cierra el circuito y se inicia la anodización electroquímica de la oblea. Posteriormente se comienza a eliminar las burbujas de hidrógeno que se acumulan en el cátodo (alambre de Pt en forma de espiral) con una pipeta de plástico. Durante la anodización se monitorea la señal de corriente a través del multímetro para estar seguros de que la corriente suministrada es la indicada, con lo cual se asegura el funcionamiento correcto de todo el sistema de la figura 2.13.

Paso 6: Enjuagado y secado de la muestra de SP. Después de fabricar la muestra de SP se enjuaga con etanol hasta que los residuos de electrolito dentro de los poros de la capa de SP se hayan eliminado. Una vez hecho esto, se coloca la muestra de SP dentro de pentano en una caja petrel durante un tiempo de 5 minutos, posteriormente se extrae y se deja que el pentano residual sobre la muestra porosa se evapore por sí mismo a temperatura ambiente. Por último, se almacena la muestra en una caja de plástico y queda lista para su oxidación en el horno.