

Facultad de Ingeniería

Universidad Católica de Temuco Facultad de Ingeniería Departamento de Ciencias Matemáticas y Física

Estudio de la estructura de bandas fotónicas en cristales fotónicos en una dimensión

Por

Natalia Brintrup Schwerter

Profesor Guía

Dr. Gonzalo Recio Sánchez

Actividad Formativa Equivalente, para optar al grado de Magíster en Matemáticas Aplicadas (Profesional).

Temuco - 18 de agosto de 2016

Universidad Católica de Temuco Facultad de Ingeniería Departamento de Ciencias Matemáticas y Física

COMISION EVALUADORA

Profesor Guía:

Dr. Gonzalo Recio

Profesor informante:

Dr. Ramón Becar

Profesor informante:

Dr. Cristian Farias

Profesor informante:

Dr. Stefan Berres

Director del Programa (Ministro de fe):

Dr Emilio Cariaga

Temuco - 30 de agosto de 2016

Perfil de Egreso

Magíster en Matemáticas Aplicadas. Universidad Católica de Temuco.

El egresado del Magíster en Matemáticas Aplicadas es un profesional posgraduado que posee la competencia de aplicar la matemática al análisis de sistemas y procesos complejos en el ámbito de los fenómenos de transporte. Específicamente

Formula ecuaciones diferenciales como modelos matemáticos, en el ámbito de los fenómenos de transporte, para obtener una relación cuantitativa entre las variables relevantes del sistema.

Resuelve ecuaciones diferenciales como modelos matemáticos, utilizando técnicas numéricas y analíticas, para obtener valores cuantitativos de la variable respuesta del sistema.

Utiliza programas computacionales en la resolución, análisis y aplicación de ecuaciones diferenciales al mejoramiento de sistemas complejos en el ámbito de los fenómenos de transporte.

Agradecimientos

Sin duda existen muchas personas a quienes agradecerles por haberme acompañado durante este camino del magister, en primer lugar a Dios por darme la oportunidad de continuar con mis estudios.

Quiero expresar el más sincero y afectuoso agradecimiento a mi director de tesis el Dr. Gonzalo Recio, quien me ha mostrado su apoyo y su dedicación en cada instante de este proceso. También destacar que ha sido un buen maestro y que representa un ejemplo a seguir en mi vida profesional.

Expresar la gratitud al director del programa el Dr. Emilio Cariaga, los docentes del magister y del departamento, que en conjunto colaboraron con suministrar las herramientas necesarias para el logro de este proyecto.

No dejar de mencionar el apoyo de mi compañero de vida, en todo y cada uno de los momentos que lo necesité, por ser mi amigo, confidente y, lo más importante, ser el mejor papá. Asimismo agradecer a mi chichicho hermoso, quien, con cada abrazo, beso, sonrisa o muestra de cariño me dio la fuerza necesaria para poder seguir adelante.

Si bien la familia uno no la elige, debo agradecer la que me ha tocado, en especial a mi madre por esas palabras de aliento en los momentos difíciles y además por los viajes relámpagos para cuidar de mi hijo. A mi hermana por su amistad incondicional y las tardes de trabajo en conjunto en las que terminábamos arreglando el mundo. A mi cuñada, porque gracias a su apoyo y su disposición pude embarcarme en esta aventura.

Finalmente quiero agradecer a mis compañeros de magister por todos los momentos vividos durante este proceso, imposible olvidar las anécdotas y tallas, especialmente reconocer a mis amigas Ercy y Pame por toda la ayuda brindada en esta aventura vivida.

A mi hijo, Marcelo Quezada Brintrup.

Abstract

In the present work, a theoretical study about the photonic band structure of one-dimensional photonic crystals is presented. In order to study photonic band structure, from Maxwell's equations, which describe macroscopic electromagnetism, wave equation is obtained. Solving this equation with the transversality restriction, light frequencies as function of main direction in the reciprocal space can be obtained, which form the photonic band structure.

Analitical solution of photonic band structure of a multilayer which alterns two kind of layers is calculated by expansion wave method, using two plane waves. In addition, numerical solutions are studied using the software MPB. In particular, three kind of numerical solutions are studied. First, the behavior of photonic bands is analyzed when dielectric constants of the layers are modulated. Second, consequences in the photonic band structure when the thickness of each layers is varied are studied. Finally, a validation of the numerical solutions is made by comparing the data with the experimental results observed in a multilayer structure based on two different kind of porous silicon layers. It can be observed that photonic gaps are highly influenced by the dielectric constants and thickness of the layers which form the multilayer stack. Furthermore, numerical solutions show a good agreement with the experimental results.

Keywords: Photonic Crystals, Photonic Band, Plane wave expansion, MIT Photonic-Bands (MPB)

Resumen

En esta investigación se desarrolla un estudio teórico de la estructura de bandas fotónicas de cristales fotónicos en una dimensión. Para estudiar la estructura de bandas fotónicas se parte de las ecuaciones de Maxwell que describen el electromagnetismo macroscópico, por lo tanto, como se propaga la luz dentro de los cristales fotónicos. A partir de dichas ecuaciones se realizan diferentes aproximaciones para obtener la ecuación de onda. Resolviendo esta ecuación, junto con las condiciones de transversalidad, se encuentran las frecuencias en función de las direcciones en el espacio reciproco, las cuales generan la estructura de bandas fotónicas.

La solución analítica de la estructura de bandas fotónicas para una multicapa que alterna dos tipos de capas se calcula por medio del método de expansión de ondas con dos ondas planas. Además, se realizan diferentes estudios sobre la solución numérica que entrega el software MPB, en particular se efectúan tres estudios diferentes. En el primer estudio, se analiza el comportamiento de las bandas fotónicas al realizar una variación de la constante dieléctrica. En el segundo estudio, al igual que el primero se analiza el comportamiento de las bandas fotónicas pero al realizar una variación del ancho de cada capa. Finalmente en el tercer estudio, se validan los resultados numéricos obtenidos utilizando una estructura multicapa de un cristal fotónico en una dimensión basado en silicio poroso con distintas porosidades. Se observa que los gaps fotónicos se ven altamente influenciados por la constante dieléctrica y el ancho de las bandas, además se puede comprobar que los resultados numéricos tienen una gran coincidencia con los datos experimentales.

Palabras clave: Cristales fotónicos, Banda fotónica, Expansión de ondas planas, MIT Photonic-Bands (MPB)

Índice

1	Introducción	2
	1.1 Motivación y antecedentes	2
	1.2 Introducción a los cristales	4
	1.2.1 Red puntual \ldots	4
	1.2.2 Red recíproca \ldots	6
	1.3 Fundamentos de los cristales fotónicos	8
2	Materiales y Métodos	12
	2.1 Ecuación de valores propios y sus propiedades	12
	2.1.1 Ecuación de valores propios	12
	2.1.2 Propiedades de la ecuación de valores propios	12
	2.1.3 Cálculo de la estructura de bandas	15
3	Resolución Analítica	16
	3.1 Descripción de la constante dieléctrica por medio de la serie de Fourier	16
	3.2 Resolución de la ecuación de valores propios	19
	3.3 Aproximación analítica con dos ondas planas	21
4	Resultados	23
	4.1 Variación de la constante dieléctrica	23
	4.2 Variación de la anchura de las capas	28
	4.3 Estudio cristal fotónico experimental	32
5	Conclusiones	34
6	Trabajo Futuro	35
A	Características del MPB	38

Objetivos

Objetivo general

Determinar la estructura de bandas fotónicas en cristales fotónicos en una dimensión.

Objetivos específicos

- 1. Describir el fenómeno general de los cristales fotónicos.
- 2. Formular el modelo matemático para determinar la estructura de bandas fotónicas dentro de cristales fotónicos en una dimensión.
- 3. Resolver analíticamente el problema por medio del método de expansión de ondas planas.
- 4. Estudiar las soluciones numéricas utilizando software MPB.

1 Introducción

1.1 Motivación y antecedentes

En las últimas décadas han habido grandes avances tecnológicos, revolucionando muchas áreas de la vida, como la comunicación. La búsqueda constante del hombre por satisfacer cada vez mejor su necesidad de comunicación ha sido el impulso que ha logrado la instauración en el mundo de instrumentos cada día más poderosos y veloces en el proceso comunicativo. Dado que la actual tecnología microelectrónica, que gobierna los procesos comunicativos, está llegando al límite de sus posibilidades físicas lo cual ha dado lugar al desarrollo de nuevas tecnologías como la fotónica, la cual se enfoca en las propiedades ópticas de los materiales sin modificar sus propiedades electrónicas. En este sentido los cristales fotónicos son la pieza fundamental de esta nueva tecnología donde los fotones son para los cristales fotónicos como los electrones a los semiconductores [1]. Esto quiere decir que al igual que los semiconductores presentan un rango de energías prohibida para los electrones (gap) en su estructura de banda energética, los cristales fotónicos lo presentan para los fotones en su estructura de bandas fotónica (como se muestra en la figura 1). La existencia del gap electrónico así como sus propiedades dependen de la naturaleza del material, es decir de los átomos que lo constituyen así como de su estructura cristalina. La existencia del gap fotónico depende de cómo se estructure la constante dieléctrica.



Figura 1 – Ejemplos de estructuras de bandas fotónicas y bandas electónicas, con sus respectivos rangos de energías prohibidas (gap) [1]

Lo interesante de estudiar los cristales fotónicos es que se puede controlar las frecuencias permitidas dentro del cristal. Si se logra controlar la frecuencia de luz, se podrían realizar los mismos dispositivos electrónicos actuales pero más veloces, ya que la luz viaja más rápido, además el dispositivo tendría mayor capacidad y sería más fiable. Los fotones interaccionan mucho menos que los electrones por lo cual las restricciones por

calentamiento serían mucho menores en estos sistemas.

Los cristales fotónicos son estructuras periódicas dieléctricas que son diseñadas para interaccionar con el movimiento de fotones en una manera similar a la que la periodicidad de los potenciales atómicos interacciona con el movimiento de los electrones en los cristales semiconductores.

En la figura 2 se pueden ver tres tipos de cristales fotónicos para una, dos y tres dimensiones dependiendo de la periodicidad de la constante dieléctrica.



Figura 2 – Ejemplos de cristales fotónicos en una, dos y tres dimensiones. Los colores diferentes representan materiales con constantes dieléctricas diferentes. La definición característica de un cristal fotónico es la periodicidad del material dieléctrico a lo largo de uno o más ejes [2].

En esencia, los cristales fotónicos tienen regiones alternadas de alta y baja constante dieléctrica. Los fotones se propagan a través de esta estructura dependiendo de su frecuencia y se definen bandas de frecuencias permitidas y bandas de frecuencias prohibida (gaps). La existencia de Gaps para fotones es el fenómeno esencial en los cristales fotónicos, el cual da lugar a la posibilidad de inhibir la emisión espontánea, guiar la luz a través de circuitos ópticos, desarrollar espejos dieléctricos, entre otros [3].

Lord Rayleigh [4] fué el primero en comentar el estudio de bandas de frecuencias prohibidas, diseñando estructuras multicapas que tenían cierto rango de reflectividad. Sin embargo el concepto de cristales fotónicos fue usado por primera vez en 1987 por los grupos de Yablonovitch [5] y John [6] de manera independiente y en contextos diferentes.

En la naturaleza existen multitud de ejemplos de cristales fotónicos. Entre ellos, cabe destacar la organización estructural de las alas de las mariposas que son una combinación de múltiples interposiciones, rejillas ópticas, cristales fotónicos y otras estructuras ópticas que producen una mezcla compleja de colores, es decir, depende de la estructura de su ala para ver el color que refleje (Ver figura 3).



Figura 3 – Ala de mariposa mirada a escala micrométrica, donde se aprecia su estructura periódica [7].

Los cristales fotónicos en una dimensión son utilizados ampliamente como espejos dieléctricos y filtros ópticos (as in, e.g, Hecht y Zajac, 1997) [2], también en láminas ópticas delgadas con aplicaciones que van desde: recubrimientos de lentes y espejos con baja y alta reflexión hasta pinturas que cambian de color [8]. Los cristales fotónicos de mayor dimensionalidad son de gran interés tanto para la investigación teórica como práctica, es asi como los bidimensionales empiezan a encontrar usos comerciales. Los primeros productos comercializados que incluían cristales fotónicos periódicos en dos dimensiones son las fibras microestructuradas [9], que gracias a su estructura microscópica confinan la luz con resultados radicalmente mejores que para las fibras ópticas convencionales y encuentran su aplicación en aparatos de óptica no lineal y como insólitas guías de luz. Sus análogos en tres dimensiones están lejos de llegar a comercializarse pero ofrecen características adicionales que pueden dar lugar a un nuevo concepto de tecnologías (por ejemplo; computadores ópticos).

En esta investigación se va a analizar la estructura de bandas fotónicas de un cristal fotónico en una dimensión, cuya estructura multicapa es similar a la que aparece en la figura 2 es decir, una estructura multicapa que alterna dos tipos de constantes dieléctricas.

1.2 Introducción a los cristales

Con el objeto de entender de mejor forma el concepto de los cristales se comenzará con la definición de éste, el cual de manera general es un sólido cuya estructura interna presenta un patrón ordenado en sus componentes reticulares, sean átomos, iones o moléculas. A diferencia de los sólidos amorfos, los cristales tienen una geometría regular y la característica de poseer elementos de simetría.

1.2.1 Red puntual

Con el fin de describir las estructuras cristalinas se introducirá el concepto de red puntual. Ésta consiste en un arreglo infinito de puntos discretos que llenan todo el espacio, en el cual se define una base vectorial que genera la red a través de un conjunto de operaciones de traslación discretas sobre la base definida, formando las llamadas redes de Bravais. Dicha base está compuesta por un conjunto de vectores llamados vectores primitivos que definen la estructura o forma de la red, de manera que se puede definir una red respecto a su base. Por ejemplo en la figura 4 se muestra como a partir de los vectores primitivos \mathbf{a}_1 y \mathbf{a}_2 se construye la red cuadrada.

Para facilitar el estudio de una red, definida por un vector, se elige una región del espacio sobre la cual aplicando operaciones de traslación se puede generar toda la red, dicha zona es llamada la celda unitaria de la red. En la figura 4 se observan las celdas unitarias de dos redes, en 1(b) se forma la celda primitiva para la red bidimensional y en 2(b) se forma la celda primitiva para la restudio.



Figura 4 – Muestra dos ejemplos de redes, en (1) esquema de una red puntual bidimensional: (a) sección de una red cuadrada con vectores primitivos $\hat{a}_1 \ y \ \hat{a}_2$, (b) su correspondiente celda unitaria. En (2) estructura multicapa escogida para el desarrollo del estudio: en la parte superior el sistema compuesto de capas $\varepsilon_a \ y \ \varepsilon_b$ de longitudes $d_a \ y \ d_b$, en la parte inferior su correspondiente celda unitaria.

Otra característica a tener en cuenta es el parámetro de red, dado por la longitud de la celda unitaria, y con base en el cual se aplican las operaciones de simetría. Puede haber más de un parámetro diferente según el tipo de red que se esté estudiando. Los vectores de red primitivos se definen respecto al parámetro de red. En la figura 4 se puede apreciar que el parámetro de red para la red cuadrada está dado por a, mientras que en la estructura multicapa es d.

1.2.2 Red recíproca

Es importante conocer el comportamiento de las funciones periódicas en el espacio de frecuencias. En general una función $f(\mathbf{r})$ es periódica si cumple con la condición de periodicidad dada por:

$$f(\mathbf{r}) = f(\mathbf{r} + \mathbf{R}) \tag{1}$$

en cuyo caso se dice que \mathbf{R} es el periodo de la función. Se observa que si \mathbf{R} es el vector primitivo de una red, entonces se puede concluir que una red es una función periódica, ya que si se modela la función que describe su celda unitaria, dicha función se mantendría invariante bajo operaciones de traslación discreta, de manera que al aplicar estas traslaciones sobre la celda unitaria se generaría la red en su totalidad llenando todo el espacio sobre la que está definida. En el caso del cristal fotónico en estudio la constante dieléctrica $\varepsilon(\mathbf{r})$, va a ser una función periódica, que estará dada como:

$$\varepsilon(\mathbf{r}) = \varepsilon(\mathbf{r} + \mathbf{d}) \tag{2}$$

donde d es el parámetro de red.

Se considerará una función periódica $f(\mathbf{r})$ asociada a una celda unitaria, para esa función se tiene que (1) debe cumplirse para todos los vectores de red \mathbf{R} que trasladan la red al interior de si misma, es decir, que trasladan la celda unitaria sobre todo el espacio en el que está definida dicha red.

Para que la función $f(\mathbf{r})$ pueda ser expresada en términos de su transformada en el espacio de las frecuencias se deberá utilizar la transformada de Fourier, la cual permite construir una función a partir de integrar ondas planas sobre todas las frecuencias y es por definición [10]:

$$f(\mathbf{r}) = \int_{V} g(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} d\mathbf{k}$$
(3)

donde V es el volumen de la celda unidad, $g(\mathbf{k})$ representa la función en el espacio recíproco y dice qué tanto aporta a $f(\mathbf{r})$ una onda plana con vector de onda \mathbf{k} . Ahora, debido a la condición de periodicidad (1):

$$\begin{split} f(\mathbf{r}) &= \int_{V} g(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}+\mathbf{R})} d\mathbf{k} \\ &= \int_{V} g(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} d\mathbf{k} \end{split}$$

La periodicidad de $f(\mathbf{r})$ indica que su tranformada de Fourier $g(\mathbf{k})$ debe cumplir que:

$$g(\mathbf{k}) = g(\mathbf{k})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \tag{4}$$

Esto sólo es posible si $g(\mathbf{k}) = 0$ o $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} = 1$; la primera condición es la solución trivial y no tiene sentido en el sistema, de manera que se debe cumplir que $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} = 1$, lo cual quiere decir que $g(\mathbf{k})$ es cero en todas partes a excepción de máximos en los valores de \mathbf{k} en los cuales $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} = 1$ para cualquier \mathbf{R} . De lo anterior se puede concluir que para construir una función periódica de red $f(\mathbf{r})$ a partir de ondas planas, sólo se necesita considerar aquellas ondas planas con vectores de onda \mathbf{k} tales que $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} = 1$, o de forma equivalente, $\mathbf{k}\cdot\mathbf{R} = 2\pi n$ con n entero. Estos vectores se denominan los vectores de red recíproca y se denotan con la letra \mathbf{G} . Ahora se puede expresar la función $f(\mathbf{r})$ como una sumatoria ponderada sobre todos los vectores de red recíproca, de manera que:

$$f(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} f(\mathbf{G}) e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}}$$
(5)

Estos vectores \mathbf{G} se relacionan directamente con los vectores de la red espacial \mathbf{R} de modo que $\mathbf{G} \cdot \mathbf{R} = 2\pi n \operatorname{con} n$ entero. Entoces con la igualdad anterior, \mathbf{G} está relacionado con la periodicidad de la red espacial contenida en \mathbf{R} , de manera que pueden definir una red propia en el espacio de frecuencias cuya periodicidad se relaciona directamente con la periodicidad de la red definida por \mathbf{R} en el espacio directo; es así entonces que la red definida por \mathbf{G} es la red recíproca de aquella definida por \mathbf{R} .

En el caso de esta investigación que se va a desarrollar en una dimensión, el vector **R** estaría definido como $\mathbf{R} = d\mathbf{a}_1$, entonces el vector **G** tiene que cumplir la condición $\mathbf{G} \cdot \mathbf{R} = 2\pi n$, realizando el producto punto y despejando, se obtiene que la magnitud de G es $\frac{2\pi n}{d}$.

Cuando se analiza una función periódica y se considera su transformada de Fourier, se encuentra que, dada la condición de periodicidad (1) para su transformada $g(\mathbf{k})$, se debe cumplir (4). Entonces una función definida sobre una red de la forma $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ y aplicando la condición de periodicidad se tiene que:

$$e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}+\mathbf{r})}$$
$$= e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$$

Entonces para un determinado vector \mathbf{k} la función es la misma salvo un multiplicador global que sólo aporta información de amplitud, dicha información no es relevante para este

estudio. Por lo tanto diremos que ambos lados de la igualdad representan la misma función. Si se aumenta el vector de onda \mathbf{k} en una cantidad entera de veces \mathbf{G} , de tal manera que ahora $\mathbf{k} = \mathbf{k} + m\mathbf{G}$ con m entero. Entonces:

$$e^{i(\mathbf{k}+m\mathbf{G})\cdot\mathbf{r}} = e^{i(\mathbf{k}+m\mathbf{G})\cdot(\mathbf{R}+\mathbf{r})}$$
$$= e^{im\mathbf{G}\cdot\mathbf{R}}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}e^{i(\mathbf{k}+m\mathbf{G})\cdot\mathbf{r}}$$
$$= e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}e^{i(\mathbf{k}+m\mathbf{G})\cdot\mathbf{r}}$$

Cuando se aumenta el vector de onda \mathbf{k} un número entero de veces \mathbf{G} , aplicando la condición de periodicidad (1), la cual se manifiesta como una operación de traslación bajo la cual la función permanece invariante, se obtiene infinito número de funciones con el mismo factor multiplicativo, debido a que el aumento de \mathbf{k} en una cantidad mG significa una traslación de $2\pi n$ en el espacio recíproco. Como consecuencia de esto, se puede observar un grado de redundancia en el vector de onda k, de manera que sólo es necesario considerar aquellos valores de k contenidos en un intervalo de 2π , en todas las direcciones.

Esta región se define alrededor de un punto o nodo de la red recíproca, en el cual se establece el origen $\mathbf{k} = 0$ y es conocida como la primera zona de Brillouin. A partir de este origen también se definen segundas, terceras y en general n-ésimas zonas de Brillouin según el número entero de veces m que se puede adicionar el vector de red recíproca G sin generar una redundancia particular, de manera que esta región será la |m| + 1-ésima zona de Brillouin.

Los cálculos que se realizarán en el espacio recíproco se limitarán a la primera zona de Brillouin, la cual va desde $\frac{-\pi}{d}$ hasta $\frac{\pi}{d}$, en el caso de cristales fotónicos unidimensionales, con lo que se obtiene la anchura de $\frac{2\pi n}{d}$

1.3Fundamentos de los cristales fotónicos

Para analizar la estructura de bandas fotónicas de un cristal fotónico, el cual puede ser considerado como un medio dieléctrico mixto, se parte de las ecuaciones de Maxwell que describen formalmente el electromagnetismo macroscópico, por tanto, como se propagan las ondas electromagnéticas dentro de un cristal fotónico [2].

Las ecuaciones de Maxwell se definen como:

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \tag{6}$$

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho \tag{7}$$

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho \tag{7}$$

$$\nabla \times \mathbf{E} + \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = 0 \tag{8}$$

$$\nabla \times \mathbf{H} - \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} = \mathbf{J}$$
(9)

donde \mathbf{E} es el campo eléctrico y \mathbf{B} la inducción magnética. \mathbf{D} y \mathbf{H} definen el desplazamiento eléctrico y el campo magnético, respectivamente. Por último, ρ y J son las fuentes de carga y de corrientes, respectivamente.

Un cristal fotónico se puede considerar como un medio macroscópico e isótropo. Por ello, el vector desplazamiento se puede considerar proporcional a la constante dieléctrica $\varepsilon(\mathbf{r})$ y al campo eléctrico.

$$\mathbf{D}(\mathbf{r},t) = \varepsilon_0 \varepsilon(\mathbf{r}) \ \mathbf{E}(\mathbf{r},t) \tag{10}$$

donde ε_0 es la permitividad dieléctrica en el vacio.

Como el sistema consiste en un material dieléctrico mixto, en el cual la constante dieléctrica depende de la posición en el sistema, se tiene que $\varepsilon_r = \varepsilon(\mathbf{r})$

Además como es un cristal no tiene cargas libres ni densidad de corriente, por tanto

$$\rho = 0 \tag{11}$$

$$\mathbf{J} = 0 \tag{12}$$

Sustituyendo (10) y (11) en la ecuación (7) de Maxwell se obtiene:

$$\nabla \cdot (\varepsilon(\mathbf{r}) \mathbf{E}(\mathbf{r}, t)) = 0 \tag{13}$$

En este estudio se considerará cristales fotónicos construidos a partir de materiales no magnéticos, por tanto la permeabilidad magnética $\mu(r)$ será cercana a la unidad, de este modo:

$$\mathbf{B}(\mathbf{r},t) = \mu_0 \mu(r) \mathbf{H}(\mathbf{r},t)$$

= $\mu_0 \mathbf{H}(\mathbf{r},t)$ (14)

donde μ_0 es la permeabilidad del vacio.

Sustituyendo (14) en las ecuaciones de Maxwell (6) y (8), se obtiene:

$$\nabla \cdot \mu_0 \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) = 0 \tag{15}$$

$$\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) + \mu_0 \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) = 0$$
(16)

Por otra parte, reemplanzado (10) y (12) en la ecuación de Maxwell (9) se tiene:

$$\nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) - \frac{\partial}{\partial t} [\varepsilon_0 \varepsilon(\mathbf{r}) \mathbf{E}(\mathbf{r}, t)] = 0$$
(17)

Cabe destacar que el material utilizado será transparente, por lo cual su constante dieléctrica será real y positiva.

Bajo las restricciones que se han impuesto claramente hay una parte fenomenológica que se pasa por alto. Sin embargo, muchas de las propiedades más interesantes y útiles resultan de analizar el caso de materiales lineales y sin pérdida que establecen la base de estudios más específicos. Para encontrar la solución en estado estacionario se separará la parte espacial de la parte temporal de los campos \mathbf{E} y \mathbf{H} , haciendo una expansión de los campos dentro de los modos armónicos. Lo cual permite escribir los modos armónicos como un patrón espacial, multiplicado por una exponencial compleja en el tiempo:

$$\mathbf{H}(\mathbf{r},t) = \mathbf{H}(\mathbf{r}) \ e^{-i\omega t} \tag{18}$$

$$\mathbf{E}(\mathbf{r},t) = \mathbf{E}(\mathbf{r}) \ e^{-i\omega t} \tag{19}$$

Reemplazando (18) en las ecuaciones (15) y (16), se obtiene:

$$\nabla \cdot \mathbf{H}(\mathbf{r}) \ e^{-i\omega t} = 0 \tag{20}$$

$$\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}) - i\omega\mu_0 \mathbf{H}(\mathbf{r}) = 0$$
(21)

Despejando $\mathbf{H}(\mathbf{r})$ de (21), resulta:

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}) = \frac{1}{i\omega\mu_0} \nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r})$$
(22)

Reemplazando (19) en las ecuaciones (13) y (17) respectivamente, se tiene:

$$\nabla \cdot \varepsilon(\mathbf{r}) \mathbf{E}(\mathbf{r}) = 0 \tag{23}$$

$$\frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})}\nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}) + i\omega\varepsilon_0 \mathbf{E}(\mathbf{r}) = 0$$
(24)

Reemplazando (22) en (24) resulta:

$$\frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} \nabla \times \left[\frac{1}{i\omega\mu_0} \nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}) \right] + i\omega\varepsilon_0 \mathbf{E}(\mathbf{r}) = 0 \qquad / \cdot i\omega\mu_0$$
$$\frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} \nabla \times [\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r})] + i^2 \omega^2 \varepsilon_0 \mu_0 \mathbf{E}(\mathbf{r}) = 0$$
$$\frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} \nabla \times [\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r})] = \omega^2 \varepsilon_0 \mu_0 \mathbf{E}(\mathbf{r})$$
$$\frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} \nabla \times [\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r})] = \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \mathbf{E}(\mathbf{r}) \qquad (25)$$

donde c es la velocidad de la luz que está dada por $\frac{1}{\sqrt{\varepsilon_0\mu_0}}$.

Despejando $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ de la ecuación (24), se obtiene:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = -\frac{1}{i\omega\varepsilon_0\varepsilon(\mathbf{r})}\nabla\times\mathbf{H}(\mathbf{r})$$

Y reemplazándolo en la ecuación (21), se tiene:

$$\nabla \times \left[-\frac{1}{i\omega\varepsilon_{0}\varepsilon(\mathbf{r})} \nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}) \right] - i\omega\mu_{0} \mathbf{H}(\mathbf{r}) = 0 \qquad / \cdot -i\omega\varepsilon_{0}$$
$$\nabla \times \left[\frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} \nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}) \right] + i^{2}\omega^{2}\varepsilon_{0}\mu_{0} \mathbf{H}(\mathbf{r}) = 0$$
$$\nabla \times \left[\frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} \nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}) \right] = \omega^{2}\varepsilon_{0}\mu_{0}\mathbf{H}(\mathbf{r})$$
$$\nabla \times \left[\frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} \nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}) \right] = \left(\frac{\omega}{c} \right)^{2}\mathbf{H}(\mathbf{r}) \qquad (26)$$

En resumen las ecuaciones de Maxwell quedan expresadas como:

$$\begin{cases} \nabla \cdot \mathbf{H}(\mathbf{r}) = 0 \\ \nabla \cdot (\varepsilon(\mathbf{r}) \ \mathbf{E}(\mathbf{r})) = 0 \\ \frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} \nabla \times [\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r})] = \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \mathbf{E}(\mathbf{r}) \\ \nabla \times \left[\frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} \nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r})\right] = \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \mathbf{H}(\mathbf{r}) \end{cases}$$
(27)

Para obtener la estructura de bandas de un cristal fotónico en una dimensión, se resolverán las ecuaciones (27), específicamente la última ecuación, ya que ésta junto a las ecuaciones de divergencia (13) y (15) entregarán la información necesaria para encontrar los estados de luz permitidos, es decir, las frecuencias ω permitidas para un cristal fotónico dado, cuya constante dieléctrica es periódica $\varepsilon(\mathbf{r}) = \varepsilon(\mathbf{r} + \mathbf{d})$.

2 Materiales y Métodos

Actualmente existen muchos métodos de cálculo para estudiar las propiedades de los cristales fotónicos, pero si se trata de encontrar las frecuencias permitidas en cada dirección cristalina para una periodicidad determinada, entonces el método más utilizado es el de expansión de ondas planas [11].

El método de expansión de ondas planas (MEOP) consiste en expandir en series de Fourier las funciones periódicas que definen a la función dieléctrica y a los campos electromagnéticos. Estás expansiones se introducirán a la ecuación de onda (ver ecuación 27) para obtener una ecuación de autovalores. A partir de la solución de la ecuación de autovalores se pueden obtener tanto las frecuencias propias del sistema (o estructuras de bandas) como las funciones propias del sistema (campos electromagnéticos).

En este capítulo primero se planteará la ecuación de autovalores partiendo de la ecuación de onda electromagnética (ecuación 27), luego las propiedades de dicha ecuación y finalmente se explican las características más relevantes del sofware MPB, el cual será utilizado para resolver numéricamente la ecuación de valores propios.

2.1 Ecuación de valores propios y sus propiedades

2.1.1 Ecuación de valores propios

Como éste estudio es en una dimensión las soluciones de la ecuación de onda del campo eléctrico y el campo magnético son las mismas, ya que la dirección de la onda y los campos electromagnéticos tienen que cumplir la condición de ser perpendiculares por lo tanto se trabajará sólo con la ecuación de onda para el campo magnético:

$$\nabla \times \left[\frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} \nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r})\right] = \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \mathbf{H}(\mathbf{r})$$
(28)

2.1.2 Propiedades de la ecuación de valores propios

Se puede identificar al lado izquierdo de la ecuación (28) un conjunto de operaciones que actúan directamente sobre $\mathbf{H}(\mathbf{r})$, las cuales pueden reunirse en un operador Θ , y al lado derecho se identifica $\left(\frac{\omega}{c}\right)^2$ que reúne todos los autovalores.

Entonces $\Theta = \nabla \times \frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} \nabla$ se considerará como un tipo especial de operador lineal conocido como operador hermítico.

El operador Θ es hermítico si cumple con: $(\mathbf{F}, \Theta \mathbf{G}) = (\Theta \mathbf{F}, \mathbf{G})$, donde \mathbf{F} y \mathbf{G} son funciones de ondas.

Para demostrar que Θ es un operador hermítico, en primer lugar, en analogía con el producto interno de dos funciones de onda, se define el producto interno de dos campos

vectoriales $\mathbf{F}(\mathbf{r})$ y $\mathbf{G}(\mathbf{r})$ como:

$$(\mathbf{F}, \mathbf{G}) = \int_{V} \mathbf{F}^{*}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{G}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}$$
(29)

donde \mathbf{F}^* denota el conjugado complejo de \mathbf{F} . Además una consecuencia de esta definición es que $(\mathbf{F}, \mathbf{G}) = (\mathbf{G}, \mathbf{F})^*$ para cualquier $\mathbf{F} \neq \mathbf{G}$.

Entonces si se integra dos veces por partes, resulta:

$$\begin{aligned} (\mathbf{F}, \Theta \mathbf{G}) &= \int_{V} \mathbf{F}^{*} \cdot \nabla \times \left[\frac{1}{\varepsilon} \nabla \times \mathbf{G} \right] d\mathbf{r} \\ &= \int_{V} (\nabla \times \mathbf{F})^{*} \cdot \frac{1}{\varepsilon} \nabla \times \mathbf{G} \ d\mathbf{r} \\ &= \int_{V} \left[\nabla \times \left(\frac{1}{\varepsilon} \nabla \times \mathbf{F} \right) \right]^{*} \cdot \mathbf{G} \ d\mathbf{r} \\ &= (\Theta \mathbf{F}, \mathbf{G}) \end{aligned}$$

De este modo se comprueba que Θ es un operador hermítico, por lo tanto se tiene un problema de autovalores y autovectores siendo los autovalores del operador Θ números reales.

Además la hermiticidad del operador Θ fuerza a los modos armónicos $\mathbf{H}_1(\mathbf{r})$ y $\mathbf{H}_2(\mathbf{r})$ con frecuencias ω_1 y ω_2 respectivamente, a que su producto interno sea cero.

Si se consideran dos modos normalizados $\mathbf{H}_1(\mathbf{r})$ y $\mathbf{H}_2(\mathbf{r})$ con frecuencias ω_1 y ω_2 respectivamente, se tiene:

$$\begin{pmatrix} \omega_1 \\ c \end{pmatrix}^2 (\mathbf{H}_2, \mathbf{H}_1) = (\mathbf{H}_2, \Theta \mathbf{H}_1) \omega_1^2 (\mathbf{H}_2, \mathbf{H}_1) = c^2 (\mathbf{H}_2, \Theta \mathbf{H}_1) = c^2 (\Theta \mathbf{H}_2, \mathbf{H}_1) = \omega_2^2 (\mathbf{H}_2, \mathbf{H}_1)$$

Entonces:

$$\omega_{1}^{2} (\mathbf{H}_{2}, \mathbf{H}_{1}) = \omega_{2}^{2} (\mathbf{H}_{2}, \mathbf{H}_{1})$$
$$\omega_{1}^{2} (\mathbf{H}_{2}, \mathbf{H}_{1}) - \omega_{2}^{2} (\mathbf{H}_{2}, \mathbf{H}_{1}) = 0$$
$$\left(\omega_{1}^{2} - \omega_{2}^{2}\right) (\mathbf{H}_{2}, \mathbf{H}_{1}) = 0$$

Si $\omega_1 \neq \omega_2$ entonces $(\mathbf{H}_2, \mathbf{H}_1) = 0$, esto implica que \mathbf{H}_1 y \mathbf{H}_2 son modos ortogonales. Si $\omega_1 = \omega_2$ entonces los modos armónicos tienen igual frecuencia, esto implica que \mathbf{H}_1 y \mathbf{H}_2 son degenerados y no necesariamente ortogonales.

Sin embargo, Θ es lineal, cualquier combinación lineal de estos modos degenerados es en si mismo un modo con la misma frecuencia. Se puede trabajar con combinaciones lineales que son ortogonales, lo cual permite que los modos diferentes sean ortogonales o se pueden ordenar para serlo.

Otra característica interesante de las ecuaciones de Maxwell es que son escalables, es decir, que una misma estructura va a tener una misma solución pero en frecuencia normalizada.

Por ejemplo, el modo armónico $\mathbf{H}(\mathbf{r})$ de frecuencia ω con una constante dieléctrica $\varepsilon(\mathbf{r})$.

$$\nabla \times \left[\frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} \nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r})\right] = \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \mathbf{H}(\mathbf{r})$$
(30)

Se indagará en la configuración de los modos armónicos de otra constante dieléctrica $\varepsilon'(\mathbf{r})$, que es una versión comprimida o expandida de $\varepsilon(\mathbf{r})$, $\varepsilon'(\mathbf{r}) = \varepsilon(\mathbf{r}/s)$ para el parámetro de escala s.

Haciendo el cambio de variable: $\mathbf{r}' = s\mathbf{r}$ y $\nabla' = \nabla/s$, reemplanzándolo en (30) queda:

$$s\nabla' \times \left[\frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r}'/s)}s\nabla' \times \mathbf{H}(\mathbf{r}'/s)\right] = \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \mathbf{H}(\mathbf{r}'/s)$$
 (31)

Pero $\varepsilon(\mathbf{r}'/s)$ es $\varepsilon'(\mathbf{r}')$, reemplanzándolo en (31), se obtiene:

$$s\nabla' \times \left[\frac{1}{\varepsilon'(\mathbf{r}')}s\nabla' \times \mathbf{H}(\mathbf{r}'/s)\right] = \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \mathbf{H}(\mathbf{r}'/s)$$
 (32)

Ordenando la ecuación (32), se tiene:

$$\nabla' \times \left[\frac{1}{\varepsilon'(\mathbf{r}')} \nabla' \times \mathbf{H}(\mathbf{r}'/s)\right] = \left(\frac{\omega}{cs}\right)^2 \mathbf{H}(\mathbf{r}'/s)$$
(33)

Esta ecuación muestra el nuevo perfil de los modos $\mathbf{H}'(\mathbf{r}') = \mathbf{H}(\mathbf{r}'/s)$ y frecuencia $\omega' = \omega/s$, entonces el nuevo perfil se puede obtener por simple reescalación del antiguo perfil del modo armónico y su frecuencia. La solución del problema en una longitud escalable determina las soluciones a todas las demás longitudes escalables, es decir, independiente del valor que se considere para el parámetro de red, la estructura de bandas que se obtiene será siempre de igual forma.

En el caso de esta investigación se va a escalar o normalizar en función de la periodicidad d, ver figura (5).



Figura 5 – Estructura multicapa en la cual se observa el parámetro d.

2.1.3 Cálculo de la estructura de bandas

Dada la periodicidad del sistema, para cada vector de onda **k** que realice una traslación discreta, es decir, donde $\mathbf{k} = k_1 \hat{a}_1$, para $k_1 = \frac{2\pi}{d}$, tendrá un autoestado con frecuencia $\omega(\mathbf{k})$ y un autovector $\mathbf{H}_{\mathbf{k}}$. De este modo el $\mathbf{H}_{\mathbf{k}}$ estará dado por:

$$\mathbf{H}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \cdot \mathbf{h}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \tag{34}$$

donde **k** es la dirección de las ondas, **r** es la dirección donde el sistema es periódico y $\mathbf{h}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ una función vectorial periódica, esto es, $\mathbf{h}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \mathbf{h}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{d})$, para todos los vectores de red **d**

Reemplazando (34) en (28), se tiene:

$$\nabla \times \left[\frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} \nabla \times e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \mathbf{h}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})\right] = \left(\frac{\omega(\mathbf{k})}{c}\right)^2 e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \mathbf{h}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$$
(35)

Aplicando la identidad vectorial $\nabla \times (\phi A) = \nabla \phi \times A + \phi \nabla \times A$ en (35), queda:

$$\nabla \times \left[\frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} \left(\nabla \cdot e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \times \mathbf{h}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) + e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \nabla \times \mathbf{h}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})\right)\right] = \left(\frac{\omega(\mathbf{k})}{c}\right)^2 e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \mathbf{h}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$$
(36)

Resolviendo $\nabla \cdot e^{i\mathbf{kr}} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} e^{i\mathbf{kr}} = i\mathbf{k}e^{i\mathbf{kr}}$ y reemplazándolo en (36) la ecuación resultante sería:

$$\nabla \times \left[e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} (i\mathbf{k} + \nabla) \times \mathbf{h}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \right] = \left(\frac{\omega(\mathbf{k})}{c} \right)^2 e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \mathbf{h}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$$
(37)

Aplicando nuevamente la identidad vectorial en la ecuación (37), resulta:

$$(i\mathbf{k} + \nabla) \times \frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})}(i\mathbf{k} + \nabla) \times \mathbf{h}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \left(\frac{\omega(\mathbf{k})}{c}\right)^2 \mathbf{h}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$$
 (38)

Se encuentra una nueva ecuación de autovalores ahora para $\mathbf{h}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ que junto a la condición de periodicidad $\mathbf{h}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \mathbf{h}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{d})$ permiten que el sistema puede ser simplicado a una sola celda unitaria del cristal fotónico, y al restringir el problema a un volumen finito se llega a un espectro de autovalores discreto donde para un valor determinado de \mathbf{k} se obtiene un infinito sistema de modos con frecuencias discretamente espaciadas, las cuales se pueden clasificar por un índice de banda n. En este orden de ideas se pueden describir los modos de un cristal fotónico como una familia de funciones continuas con una estructura de bandas $\omega(\mathbf{k})$.

3 Resolución Analítica

Para encontrar la solución analítica de la estructura de bandas fotónicas en cristales fotónicos en una dimensión se analizará la serie de Fourier para la función dieléctrica [17], luego se resuelverá la ecuación de valores propios y, finalmante se hará una aplicación del MEOP planteando el problema de autovalores con solo dos ondas planas.

3.1 Descripción de la constante dieléctrica por medio de la serie de Fourier

Se trabajará con un medio periódico infinito tal como se describe a continuación (Ver figura 6). La estructura multicapa está compuesta por capas alternas de materiales ε_a y ε_b cuyos espesores son d_a y d_b , respectivamente. En la parte superior de la figura se observa que la estructura se extiende por todo el espacio y en la parte inferior de la misma se puede ver una celda unitaria que tiene longitud $d = d_a + d_b$. El cristal se puede considerar como una repetición de la celda unitaria.



Figura 6 – Cristal fotónico unidimensional infinito, en la parte superior de la imagen se muestra un sistema compuesto de capas ε_a y ε_b de longitudes d_a y d_b, en la parte inferior de la imagen se muestra la celda unitaria simétrica [17].

La función dieléctrica en la celda unitaria puede expresarse como:

$$\varepsilon(x) = \begin{cases} \varepsilon_b & -\frac{d}{2} \le x < -\frac{a}{2} \\ \varepsilon_a & -\frac{a}{2} \le x \le \frac{a}{2} \\ \varepsilon_b & \frac{a}{2} < x \le \frac{d}{2} \end{cases}$$

donde $\varepsilon(x) = \varepsilon(x+d)$

Las funciones periódicas pueden ser descritas por medio de una serie de Fourier. Para la función dieléctrica se propone:

$$\varepsilon(x) = \sum_{G} \varepsilon(G) e^{iGx}$$
(39)

siendo G un vector de la red
 reciproca cuya forma es $G = \frac{2\pi n}{d}$

Para conocer los coeficientes de la serie de Fourier $\varepsilon(x)$ se multiplica ambos lados de la igualdad por $e^{-iG'x}$, donde G' es distinto de G

$$\varepsilon(x) e^{-iG'x} = \sum_{G} \varepsilon(G) e^{i(G-G')x}$$

Se integra respecto a los límites de la celda unitaria

$$\int_{-\frac{d}{2}}^{\frac{d}{2}} \varepsilon(x) \ e^{-iG'x} \ dx = \sum_{G} \varepsilon(G) \int_{-\frac{d}{2}}^{\frac{d}{2}} e^{i(G-G')x} \ dx$$
$$= \sum_{G} \varepsilon(G) d\delta_{G,G'}$$

donde $\delta_{G,G'}$ se define como:

$$\delta_{G,G'} = \frac{1}{d} \int_{-\frac{d}{2}}^{\frac{d}{2}} e^{i(G-G')x} dx$$

Si se considera el caso que G = G' se obtiene que $\delta_{G,G'} = 1$. Pero si se considera que $G \neq G'$ se obtiene que $\delta_{G,G'} = 0$ lo cual implica que $\varepsilon(G) \delta_{G,G'}$ es cero, lo que no tiene sentido, pues se eliminaría $\varepsilon(G)$ que es lo que se quiere lograr obtener.

Por lo tanto $\varepsilon(G)$ queda definida como:

$$\varepsilon(G) = \frac{1}{d} \int_{-\frac{d}{2}}^{\frac{d}{2}} \varepsilon(x) \ e^{-iGx} \quad dx$$

Se considerará primero el caso en que G = 0, entonces el coeficiente $\varepsilon(0)$ es.

$$\varepsilon(0) = \frac{1}{d} \left[\int_{-\frac{d}{2}}^{-\frac{a}{2}} \varepsilon_b dx + \int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} \varepsilon_a dx + \int_{\frac{a}{2}}^{\frac{d}{2}} \varepsilon_b dx \right]$$

$$= \frac{1}{d} \left[\varepsilon_b \left(\frac{-a}{2} - \frac{-d}{2} \right) + \varepsilon_a \left(\frac{a}{2} - \frac{-a}{2} \right) + \varepsilon_b \left(\frac{d}{2} - \frac{a}{2} \right) \right]$$

$$= \varepsilon_b + (\varepsilon_a - \varepsilon_b) f$$

donde $f = \frac{a}{d}$

El segundo caso para cualquier G distinto de cero:

$$\begin{split} \varepsilon(G) &= \frac{1}{d} \left[\int_{-\frac{d}{2}}^{-\frac{a}{2}} \varepsilon_{b} e^{-iGx} dx + \int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} \varepsilon_{a} e^{-iGx} dx + \int_{\frac{a}{2}}^{\frac{d}{2}} \varepsilon_{b} e^{-iGx} dx \right] \\ &= \frac{1}{d} \left[\varepsilon_{b} \frac{e^{-iGx}}{-iG} \Big|_{-\frac{a}{2}}^{-\frac{a}{2}} + \varepsilon_{a} \frac{e^{-iGx}}{-iG} \Big|_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} + \varepsilon_{b} \frac{e^{-iGx}}{-iG} \Big|_{\frac{a}{2}}^{\frac{d}{2}} \right] \\ &= \frac{-1}{idG} \left[\varepsilon_{b} (e^{iG\frac{a}{2}} - e^{-iG\frac{a}{2}}) + \varepsilon_{b} (e^{-iG\frac{d}{2}} - e^{iG\frac{d}{2}}) - \varepsilon_{a} (e^{iG\frac{a}{2}} - e^{-iG\frac{a}{2}}) \right] \\ &= \frac{-1}{idG} \left[\varepsilon_{b} (e^{iG\frac{a}{2}} - e^{-iG\frac{a}{2}}) + \varepsilon_{b} (e^{-i\frac{2\pi n}{d} \cdot \frac{d}{2}} - e^{i\frac{2\pi n}{d} \cdot \frac{d}{2}}) - \varepsilon_{a} (e^{iG\frac{a}{2}} - e^{-iG\frac{a}{2}}) \right] \\ &= \frac{-1}{idG} \left[\varepsilon_{b} (e^{iG\frac{a}{2}} - e^{-iG\frac{a}{2}}) + \varepsilon_{b} (e^{-i\pi n} - e^{i\pi n}) - \varepsilon_{a} (e^{iG\frac{a}{2}} - e^{-iG\frac{a}{2}}) \right] \\ &= \frac{-1}{idG} \left[\varepsilon_{b} (e^{iG\frac{a}{2}} - e^{-iG\frac{a}{2}}) + \varepsilon_{b} (e^{-i\pi n} - e^{i\pi n}) - \varepsilon_{a} (e^{iG\frac{a}{2}} - e^{-iG\frac{a}{2}}) \right] \\ &= \frac{-1}{idG} \left[\varepsilon_{b} (e^{iG\frac{a}{2}} - e^{-iG\frac{a}{2}}) - \varepsilon_{a} (e^{iG\frac{a}{2}} - e^{-iG\frac{a}{2}}) \right] \\ &= \frac{1}{idG} \left[\varepsilon_{b} (e^{iG\frac{a}{2}} - e^{-iG\frac{a}{2}}) - \varepsilon_{a} (e^{iG\frac{a}{2}} - e^{-iG\frac{a}{2}}) \right] \\ &= \frac{1}{idG} \left[\varepsilon_{a} - \varepsilon_{b} \right] \left[\frac{e^{iG\frac{a}{2}} - e^{-iG\frac{a}{2}}}{\frac{2i}{2}} \right] \\ &= f(\varepsilon_{a} - \varepsilon_{b}) \left[\frac{\sin\left(\frac{Ga}{2}\right)}{\frac{Ga}{2}} \right] \end{split}$$

Expresión general para la función dielétrica

ε

$$\varepsilon(G) = \left[\varepsilon_b + \left(\varepsilon_a - \varepsilon_b\right) f\right] \delta_{G,0} + \left[f(\varepsilon_a - \varepsilon_b) \left(\frac{\sin\left(\frac{Ga}{2}\right)}{\frac{Ga}{2}} \right) \right] (1 - \delta_{G,0})$$

Considerando que $G = \frac{2\pi n}{d}$ conviene introducir una forma normalizada para la ecuación anterior, ya que G sólo depende de n:

$$\varepsilon(n) = [\varepsilon_b + (\varepsilon_a - \varepsilon_b) f] \delta_{n,0} + \left[f(\varepsilon_a - \varepsilon_b) \left(\frac{\sin\left(\frac{2\pi n}{d} \cdot \frac{a}{2}\right)}{\frac{2\pi n}{d} \cdot \frac{a}{2}} \right) \right] (1 - \delta_{n,0})$$

$$= [\varepsilon_b + (\varepsilon_a - \varepsilon_b) f] \delta_{n,0} + \left[f(\varepsilon_a - \varepsilon_b) \left(\frac{\sin\left(\pi nf\right)}{\pi nf} \right) \right] (1 - \delta_{n,0})$$

$$= [\varepsilon_b + (\varepsilon_a - \varepsilon_b) f] \delta_{n,0} + \left[(\varepsilon_a - \varepsilon_b) \left(\frac{\sin\left(\pi nf\right)}{\pi n} \right) \right] (1 - \delta_{n,0})$$

Luego es posible definir la función dieléctrica en unidades normalizadas de la forma

$$(x) = \sum_{G} \varepsilon(G) e^{iGx}$$
$$= \sum_{n} \varepsilon(n) e^{i\frac{2\pi n}{d}x}$$
$$= \sum_{n} \varepsilon(n) e^{i2\pi n \left(\frac{x}{d}\right)}$$

donde n es cualquier valor entero.

3.2 Resolución de la ecuación de valores propios

Para resolver la ecuación de valores propios (ecuación 38) se considerará que la onda viaja en dirección x y se va a fijar el campo magnético en dirección y (perpendicular a la onda), entonces:

$$\mathbf{h}(\mathbf{r}) = h(x) \cdot \mathbf{a}_y \tag{40}$$

De este modo las componentes quedan:

$$h(x) = \sum_{G} \mathbf{h}(G) e^{iGx}$$
(41)

Como se trabajó en la sección anterior (ecuación 39), la función dieléctrica puede expresarse como:

$$\varepsilon(x) = \sum_{G'} \varepsilon(G') e^{iG'x} \tag{42}$$

Reemplazando (41) y (42) en la ecuación (38), se tiene:

$$(i\mathbf{k} + \nabla) \times \frac{1}{\sum\limits_{G'} \varepsilon(G') e^{iG'x}} (i\mathbf{k} + \nabla) \times \sum\limits_{G} \mathbf{h}(G) e^{iGx} = \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \sum\limits_{G} h(G) e^{iGx} \mathbf{a}_y$$
(43)

Se calculará primero:

$$(i\mathbf{k} + \nabla) \times \sum_{G} \mathbf{h}(G) e^{iGx} = \begin{vmatrix} \mathbf{a}_{x} & \mathbf{a}_{y} & \mathbf{a}_{z} \\ (ik + \frac{\partial}{\partial x}) & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ 0 & \sum_{G} h(G) e^{iGx} & 0 \end{vmatrix}$$
$$= \left[\left(ik + \frac{\partial}{\partial x} \right) \sum_{G} h(G) e^{iGx} \right] \mathbf{a}_{z}$$
$$= \left[ik \sum_{G} h(G) e^{iGx} + \sum_{G} iGh(G) e^{iGx} \right] \mathbf{a}_{z}$$
$$= \left[i \sum_{G} (k + G) h(G) e^{iGx} \right] \mathbf{a}_{z}$$
(44)

Reemplanzando (44) en (43) se obtiene:

$$(i\mathbf{k} + \nabla) \times \frac{1}{\sum\limits_{G'} \varepsilon(G') e^{iG'x}} \left[i\sum\limits_{G} (k+G)h(G)e^{iGx} \right] \mathbf{a}_z = \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \sum\limits_{G} h(G)e^{iGx} \mathbf{a}_y \tag{45}$$

Desarrollando el producto cruz, resulta:

$$(i\mathbf{k} + \nabla) \times \frac{\left[i\sum_{G} (k+G)h(G)e^{iGx}\right] \mathbf{a}_{z}}{\sum_{G'} \varepsilon(G')e^{iG'x}} = \begin{vmatrix} \mathbf{a}_{x} & \mathbf{a}_{y} & \mathbf{a}_{z} \\ (ik + \frac{\partial}{\partial x}) & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ 0 & 0 & \frac{i\sum_{G} (k+G)h(G)e^{iGx}}{\sum_{G'} \varepsilon(G')e^{iG'x}} \end{vmatrix} \\ = -\left[\left(ik + \frac{\partial}{\partial x}\right)\frac{i\sum_{G} (k+G)h(G)e^{iGx}}{\sum_{G'} \varepsilon(G')e^{iG'x}}\right] \mathbf{a}_{y} \\ = -\left[\frac{i^{2}k\sum_{G} (k+G)h(G)e^{iGx}}{\sum_{G'} \varepsilon(G')e^{iG'x}} + \frac{\partial}{\partial x}\frac{i\sum_{G} (k+G)h(G)e^{iGx}}{\sum_{G'} \varepsilon(G')e^{iG'x}}\right] \mathbf{a}_{y} \\ = \left[\frac{k\sum_{G} (k+G)h(G)e^{iGx}}{\sum_{G'} \varepsilon(G')e^{iG'x}} + \frac{G\sum_{G} (k+G)h(G)e^{iGx}}{\sum_{G'} \varepsilon(G')e^{iG'x}}\right] \mathbf{a}_{y} \\ = \left[\frac{\sum_{G} (k+G)h(G)e^{iGx}}{\sum_{G'} \varepsilon(G')e^{iG'x}}\right] \mathbf{a}_{y} \\ = \left[\frac{\sum_{G} (k+G)^{2}h(G)e^{iGx}}{\sum_{G'} \varepsilon(G')e^{iG'x}}\right] \mathbf{a}_{y}$$
(46)

Y reemplazando (46) en (45), la ecuación de autovalores, queda:

$$\frac{\sum_{G} (k+G)^2 h(G) e^{iGx}}{\sum_{G'} \varepsilon(G') e^{iG'x}} \mathbf{a}_y = \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \sum_{G} h(G) e^{iGx} \mathbf{a}_y \tag{47}$$

Reordenando los términos de la ecuación anterior, se obtiene:

$$\sum_{G} (k+G)^2 h(G) e^{iGx} = \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \sum_{G} \sum_{G'} h(G) \varepsilon(G') e^{i(G+G')x}$$
(48)

Multiplicando (48) por $e^{-iG''x}$ e integrando sobre la celda unitaria, se tiene:

$$\int_{-\frac{d}{2}}^{\frac{d}{2}} \sum_{G} (k+G)^2 h(G) e^{iGx} e^{-iG''x} dx = \int_{-\frac{d}{2}}^{\frac{d}{2}} \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \sum_{G} \sum_{G'} h(G) \varepsilon(G') e^{i(G+G')x} e^{-iG''x} dx$$

$$(k+G)^2 h(G) \delta_{G,G''} = \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \sum_{G'} h(G) \varepsilon(G') \delta_{G'+G,G''}$$
(49)

Como G' + G = G'' entonces G' = G'' - G, se obtiene

$$(k+G'')^2 h(G'') = \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \sum_{G'} h(G)\varepsilon(G''-G)$$
(50)

Como G, G', G'' son índices mudos, la ecuación se transforma en:

$$(k+G)^{2}h(G) = \left(\frac{\omega}{c}\right)^{2} \sum_{G'} h(G')\varepsilon(G-G')$$
(51)

Al multiplicar ambos lados de la igualdad por $\frac{d}{2\pi}$ se obtiene una ecuación de onda normalizada [17], donde $G = \frac{2\pi n}{d}$, $G' = \frac{2\pi m}{d}$ y $G'' = \frac{2\pi p}{d}$

$$(k'+n)^{2}h(n) = (\omega')^{2}\sum_{m}\varepsilon(n-m)h(m)$$
(52)

donde $k'=\frac{kd}{2\pi}$ y $\omega'=\frac{\omega d}{2\pi c}$

3.3 Aproximación analítica con dos ondas planas

Se obtendrá una estructura de bandas con sólo dos ondas planas tomando la ecuación 52, además se considerará que la sumatoria se mueve en dos términos: m = 0 y m = 1.

De esta forma se tiene para n = 0:

$$(k'+0)^2 h(0) = (\omega')^2 \sum_{m=0}^{m=1} \varepsilon(0-m)h(m)$$

= $(\omega')^2 [\varepsilon(0)h(0) + \varepsilon(-1)h(1)]$

Para n = 1:

$$(k'+1)^{2}h(1) = (\omega')^{2} \sum_{m=0}^{m=1} \varepsilon(1-m)h(m) = (\omega')^{2} [\varepsilon(1)h(0) + \varepsilon(0)h(1)]$$

Lo anterior se puede escribir en forma matricial:

$$A\mathbf{h} = (\omega')^2 B\mathbf{h} \tag{53}$$

donde:

$$A = \begin{pmatrix} (k')^2 & 0\\ 0 & (k'+1)^2 \end{pmatrix}$$
(54)

$$B = \begin{pmatrix} \varepsilon(0) & \varepsilon(-1) \\ \varepsilon(1) & \varepsilon(0) \end{pmatrix}$$
(55)

$$\mathbf{h} = \begin{pmatrix} h(0)\\ h(1) \end{pmatrix} \tag{56}$$

Para buscar la solución analítica de la ecuación (53), primero se calcula la matriz inversa de ${\cal B}$

$$B^{-1} = \frac{1}{\Delta} \begin{pmatrix} \varepsilon(0) & -\varepsilon(-1) \\ -\varepsilon(1) & \varepsilon(0) \end{pmatrix}$$
(57)

donde

 $\Delta = [\varepsilon(0)]^2 - [\varepsilon(-1)\varepsilon(1)]$

Si se multiplica la matriz A por B^{-1} , se determina una nueva matriz llamada C

$$C = B^{-1}A = \frac{1}{\Delta} \begin{pmatrix} \varepsilon(0) & -\varepsilon(-1) \\ -\varepsilon(1) & \varepsilon(0) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} (k')^2 & 0 \\ 0 & (k'+1)^2 \end{pmatrix} = \frac{1}{\Delta} \begin{pmatrix} \varepsilon(0)(k')^2 & -\varepsilon(-1)(k'+1)^2 \\ -\varepsilon(1)(k')^2 & \varepsilon(0)(k'+1)^2 \end{pmatrix}$$
(58)

Con la cual se plantea un problema de autovalores

$$C\mathbf{h} = (\omega')^2 \mathbf{h} \tag{59}$$

Donde los autovalores se obtienen resolviendo:

$$\left|C - (\omega')^2 I\right| = 0\tag{60}$$

Reemplanzado (58) en (60), resulta:

$$\left| \frac{1}{\Delta} \begin{pmatrix} \varepsilon(0)(k')^2 & -\varepsilon(-1)(k'+1)^2 \\ -\varepsilon(1)(k')^2 & \varepsilon(0)(k'+1)^2 \end{pmatrix} - (\omega')^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \right| = 0$$
$$\left| \begin{pmatrix} \frac{\varepsilon(0)(k')^2}{\Delta} - (\omega')^2 & \frac{\varepsilon(-1)(k'+1)^2}{\Delta} \\ \frac{-\varepsilon(1)(k')^2}{\Delta} & \frac{\varepsilon(0)(k'+1)^2}{\Delta} - (\omega')^2 \end{pmatrix} \right| = 0$$

Al resolver el determinante anterior se obtiene:

$$\frac{\varepsilon(0)(k')^2\varepsilon(0)(k'+1)^2}{\Delta^2} - \frac{\varepsilon(0)(k')^2(\omega')^2}{\Delta} - \frac{(\omega')^2\varepsilon(0)(k'+1)^2}{\Delta} + (\omega')^4 - \frac{\varepsilon(1)(k')^2\varepsilon(-1)(k'+1)^2}{\Delta^2} = 0$$

Reordenando los términos, resulta:

$$(\omega')^4 - (\omega')^2 \left[\frac{\varepsilon(0)(k')^2}{\Delta} + \frac{\varepsilon(0)(k'+1)^2}{\Delta}\right] - \frac{\varepsilon(1)(k')^2\varepsilon(-1)(k'+1)^2}{\Delta^2} + \frac{\varepsilon(0)^2(k')^2(k'+1)^2}{\Delta^2} = 0$$
(61)

La ecuación 61 cumple con la estructura de una ecuación cuadrática, por lo tanto su solución es:

$$\begin{aligned} (\omega')^2 &= \frac{\frac{\varepsilon(0)}{\Delta} \left[(k')^2 + (k'+1)^2 \right] \pm \sqrt{\left(\frac{\varepsilon(0)}{\Delta} \left[(k')^2 + (k'+1)^2 \right] \right)^2 - 4 \frac{(k')^2 (k'+1)^2}{\Delta^2} \left[\varepsilon(0)^2 - \varepsilon(1) \varepsilon(-1) \right]}}{2} \\ &= \frac{\varepsilon(0) \left[(k')^2 + (k'+1)^2 \right] \pm \sqrt{\left(\varepsilon(0) \left[(k')^2 + (k'+1)^2 \right] \right)^2 - 4 (k')^2 (k'+1)^2 \left[\varepsilon(0)^2 - \varepsilon(1) \varepsilon(-1) \right]}}{2\Delta} \end{aligned}$$

La ecuación anterior corresponde a una aplicación del método de onda planas, dicha ecuación permite encontrar las frecuencias ω' del cristal fotónico para cada valor de la dirección de propagación dada por el vector de onda \mathbf{k}' para una estructura de bandas fotónicas con dos ondas planas.

4 Resultados

En esta sección se presentan los resultados de las simulaciones computacionales, para lo cual se resolvió la ecuación 38 por medio de la utilización del software MPB. Para realizar un estudio más amplio de la propagación de las frecuencias se realizaron tres tipos de simulaciones, la primera de ellas hace una variación de la constante dieléctrica, la segunda hace una variación de la anchura de la capa y en la tercera simulación se comparan datos obtenidos computacionalmente con datos experimentales que alternan capas de silicio poroso con distintas porosidades.

4.1 Variación de la constante dieléctrica

En este primer estudio se va a realizar un análisis de cómo afectan los cambios de la constante dieléctrica de la estructura multicapa en la estructura de bandas fotónicas. Se modificarán los valores de la constante dieléctrica de una de las capas, fijando la otra en un mismo valor para todos los análisis, fijando además los anchos de las capas en $d_a = d_b = \frac{1}{2}d$, ya que d es el parámetro de red. Para tener una mejor representación de los valores de las constantes dieléctricas en la celda unidad, se irá cambiando las tonalidades donde un valor 12 será oscuro y un valor 1 será claro.



Figura 7 – En (a) se representa la celda unidad una estructura multicapa donde se considera que ε_a y ε_b tienen un mismo valor, en este caso 12. Mientras que (b) muestra la estructura de bandas fotónicas para dicha estructura.

En la figura 7 se muestra la estructura de bandas fotónicas para un mismo valor de la constante dieléctrica, es decir, ε_a y ε_b iguales a 12. Se puede observar que no se producen bandas de frecuencia prohibidas en la estructura multicapa, esto se debe a que ambas capas estan compuestas por el mismo material.

La figura 8, muestra la estructura de bandas cuando la multicapa está formada por dos capas de constantes dieléctricas $\varepsilon_a = 8$ y $\varepsilon_b = 12$, conservando el mismo tamaño de celda unidad, como se indica en la figura 8(a).



Figura 8 – En (a) se representa la celda unidad de una estructura multicapa donde se considera que $\varepsilon_a = 8$ y $\varepsilon_b = 12$. Mientras que (b) muestra la estructura de bandas fotónicas de dicha estructura multicapa

Se observa en la figura 8(b) que se producen diferentes regiones de bandas prohibidas, las cuales tienen un pequeño rango de frecuencia. En total se pueden ver hasta seis regiones de frecuencias prohibidas, por ejemplo, entre la primera y segunda banda el rango de frecuencia prohibida está entre 0,148 y 0,168 de frecuencia normalizada, entre la segunda y tercera banda se observa entre 0,314 y 0,321, así entre la cuarta y quinta banda se tiene un rango de frecuencias que está entre 0,629 y 0,641.

En la figura 9 se presenta la estructura de bandas fotónicas para el caso de constante dieléctrica $\varepsilon_a = 4$ y se mantiene $\varepsilon_b = 12$.



Figura 9 – En (a) se representa una estructura multicapa donde se considera que $\varepsilon_a = 4 y$ $\varepsilon_b = 12$. Mientras que (b) muestra la estructura de bandas fotónicas

En relación con la figura 8 ahora las frecuencias de bandas prohibidas aparecen a frecuencias normalizadas de mayor valor, por ejemplo, anteriormente la primera banda de energía prohibida se producía entre $0,148 \ge 0,168$ en cambio ahora en la figura 9(b) se produce la banda de $0,153 \ge 0,211$.

Además se puede observar que ha aumentado el rango de las frecuencias prohibidas, ya que en la figura 8 el rango entre la segunda y tercera banda era de 0,07, mientras que en la figura actual (vease figura 9(b)) la diferencia es de 0,47.

En la figura 10 se tiene la estructura de bandas fotónicas para la estructura multicapa cuando se cambia la constante dieléctrica ε_a a 1, conservando $\varepsilon_b = 12$

Para esta figura se puede observar que presenta los mayores rangos de frecuencias prohibidas, en relación a las figuras 8 y figura 9. Por ejemplo, entre la primera y segunda banda el rango de frecuencia prohibida está entre 0,150 y 0,265 de frecuencia normalizada, teniendo un tamaño de 0,115, mientras que en la figura 9 es de 0,058 y en la figura 8 es de 0,02.



Figura 10 – En (a) se representa una estructura multicapa en la celda unidad, donde se considera que $\varepsilon_a = 1$ y $\varepsilon_b = 12$. Mientras que (b) muestra la estructura de bandas fotónicas para dicha estructura.

En resumen de los gráficos anteriores se puede observar que si se fija el valor de ε_b en 12 y se hace variar el valor de ε_a , a medida que éste valor aumenta su diferencia con ε_b se producen bandas prohibidas (GAP) de mayor rango de frecuencias entre las mismas, lo que implica que se produce una región de mayor reflectancia.

Además se observa que cuando la diferencia de los valores de las constantes dieléctricas es menor cambian las frecuencias con que aparecen los GAP y cuando las dos constantes dieléctricas tienen el mismo valor debido ha que ambas capas estan compuestas por el mismo material no se producen regiones de frecuencias prohibidas. A continuación se presenta un mapa de los Gaps, el cual representa los Gap obtenidos fijando el valor de ε_b en 12 y haciendo una variación del valor ε_a de 1 a 12, dejando el mismo ancho para cada una de las capas (Figura 11).



Figura 11 – Mapa de los Gaps realizando una variación para ε_a de 1 a 12, fijando ε_b en 12

Al analizar el gráfico se puede concluir que para contrastes mayores entre las constantes dieléctricas ε_a y ε_b el rango de longitud de reflectancia es mayor y por ello se produce una región mayor del gap de frecuencias prohibidas.

A medida que el valor de ε_a se hace más grande acercándose al valor de ε_b disminuye el rango de frecuencia, lo que implica que también disminuye la frecuencia con la que aparecen las bandas de energías prohibidas, esto implica que ambos materiales terminan siendo iguales.

Es importante mencionar que para $10 < \varepsilon_a < 12$ se desprecia, ya que existen bandas prohibidas con un rango de frecuencia muy pequeño.

4.2 Variación de la anchura de las capas

En el siguiente estudio, se fijará un valor de 12 para la constante dieléctrica ε_b y de 1 para la constante dieléctrica ε_a . A partir de ello, se realizará un análisis de la variación del porcentaje de cada una de las capas en la celda unidad. Finalmente se hará un estudio de la estructura de bandas fotónicas para cada una de estas multicapas.



Figura 12 – En (a) se representa una estructura multicapa donde se considera un 100 % de ε_a y un 0 % de ε_b . Mientras que en (b) se representa la estructura de bandas de frecuencias con dicho porcentaje.

En la figura 12(a) se observa una celda unidad de la estructura multicapa del cristal fotónico donde se consideró $d_a = d$, es decir, la celda unidad está compuesta sólo por un tipo de material. Esto implica que no se producen bandas de energías prohibidas, como lo ilustra la estructura de bandas fotónicas de la figura 12(b).

En la figura 13(a) hay una celda unidad de la estructura multicapa donde se consideró $d_a = 0, 8d \text{ y} d_b = 0, 2d$. Se observa en la figura 13(b) que se producen bandas de energías prohibidas(Gaps), las cuales tienen un gran rango de frecuencia, por ejemplo, en la primera y segunda banda el rango de frecuencia prohibida está entre 0,271 y 0,494, y en la segunda y tercera banda se observa entre 0,669 y 0,945.



Figura 13 – En (a) se representa una estructura multicapa donde se considera un 80 % de ε_a y un 20 % de ε_b . Mientras que en (b) se representa la estructura de bandas de frecuencias con dicho porcentaje.



Figura 14 – En (a) se representa una estructura multicapa donde se considera un 20 % de ε_a y un 80 % de ε_b . Mientras que en (b) se representa la estructura de bandas de frecuencias con dicho porcentaje.

La figura 14(a) corresponde a una celda unidad de la estructura multicapa, donde se consideró $d_a = 0, 2d$ y $d_b = 0, 8d$.

Se observa en la figura 14(b) que se producen bandas de energías prohibidas, las cuales tienen un rango de frecuencia inferior a los de la figura 13, por ejemplo, entre la primera y segunda banda el rango de frecuencia es 0,018 mientras que en la figura anterior es de 0,223.



Figura 15 – En (a) se representa una estructura multicapa donde se considera un 0% de ε_a y un 100% de ε_b . Mientras que en (b) se representa la estructura de bandas de frecuencias con dicho porcentaje.

En la figura 15(a) se observa una celda unidad de la estructura multicapa donde se consideró $d_b = d$, es decir, la celda unidad esta compuesta por un solo tipo de material, de la misma forma como se muestra en la figura 12. Esto implica que no se producen bandas de energías prohibidas, como lo ilustra la estructura de bandas fotónicas de la figura 15(b).

De los análisis anteriores se puede concluir que cuando una estructura multicapa en una dimensión está compuesta por un solo tipo de material, no se producen bandas de frecuencias prohibidas.

Además cuando la capa central es la mitad de las otras dos capas se produce la mayor cantidad de bandas prohibidas, según los datos obtenidos. También se puede decir que cuanto más parecidos sean los porcentajes de las capa en la celda unidad, se obtiene un gap de mayor tamaño. A continuación se presenta un mapa de los Gaps, el cual representa los Gap obtenidos en la estructura multicapa, cambiando el ancho d_a y d_b de las multicapas ε_a y ε_b , donde 0 índica que no hay d_b y 1 índica que el 100 % de la capa corresponde al material de d_b (Figura 16).



Figura 16 – Mapa de los Gaps realizando una variación de 0 a 1 en el ancho de las capas, dejando fijo los valores de las constantes dieléctricas, $\varepsilon_a = 1$ y $\varepsilon_b = 12$

Se puede observar un mapa de los Gaps que depende del espesor de las capas ε_a y ε_b , donde el espesor está dado por el parámetro de red d, esto quiere decir que se consideró el tamaño de d_b en función de d como $\frac{d_b}{d}$.

Como se aprecia en la figura 16 a medida que ambas capas tienen un porcentaje similar aumenta el rango de frecuencias no permitidas, entonces para maximizar el tamaño de los gaps, se deberían construir multicapas donde el porcentaje de cada una en la celda unidad fuese similar.

4.3 Estudio cristal fotónico experimental

Con el objetivo de evaluar la validez de los resultados numéricos obtenidos, se realizó el estudio de las bandas fotónicas de un cristal fotónico en una dimensión, como el que muestra en la figura 17.



Figura 17 – Estructura multicapa que alternan capas de silicio poroso con distintas porosidades [18]

En la figura 17 se observa una estructura multicapa que alterna dos tipos de capas de silicio poroso, una de alta porosidad y otra de baja porosidad. El parámetro de red es de $2\mu m$, cada una de las capas tiene el mismo ancho de $1\mu m$, los valores de las constantes dieléctricas son diferentes, pero similares a 1.95 y 4.69 respectivamente.

El espectro de reflectancia experimental obtenido de este cristal a un ángulo de 20° , se muestra en la figura 18 en el lado derecho.

En la parte izquierda de la figura 18, se muestran las bandas fotónicas simuladas para la estructura multicapa.

Las bandas obtenidas se comparan con el espectro de reflectancia medido a un ángulo de 20° con respecto a la normal. Se puede observar que el gap formado entre la primera y la segunda banda coincide con el máximo de reflectancia obtenido experimentalmente. Sin embargo, el segundo gap formado entre la segunda y la tercera banda, no coincide exactamente con el máximo de reflectancia experimental, aunque están bastante próximos. El desplazamiento del gap se atribuye a que el espectro de reflectancia está tomado a un ángulo de 20° sobre la normal. Además, un pequeño cambio en la porosidad varía notablemente la constante dieléctrica de las capas de silicio poroso con distintas porosidades.

Los resultados numéricos se calcularon en condiciones ideales, formando un cristal infinito, mientras que en el caso de estudio el cristal sólo fue de 5 capas.



Figura 18 – A la izquierda, la estructura de bandas simulada para una multicapa que alterna capas de 0.5d de espesor, siendo d el parámetro de red, y 1.95 y 4.69 las constantes dieléctricas de cada capa. A la derecha, el espectro de reflectancia experimental obtenido para la sección transversal de la multicapa formada alternando la densidad de corriente en el ataque electroquímico del silicio, bajo un ángulo de 20°.

5 Conclusiones

La importancia del estudio de los cristales fotónicos se basa en su potencial de aplicación, pues es el material que reúne las condiciones necesarias y óptimas para el desarrollo y fabricación de componentes fotónicos análogos a los diferentes dispositivos electrónicos, ya que dependiendo de su estructura física, en los cristales fotónicos es posible controlar la frecuencia de luz que se propaga a través de ellos. En principio, las operaciones lógicas en un sistema completamente óptico se realizarían a velocidades superiores comparadas con la tecnología electrónica actual. Se cree que los cristales fotónicos son el camino para desarrollar las nuevas tecnologías del futuro.

Es fundamental entonces estudiar la estructura de bandas de un cristal fotónico, en esta investigación se mostró una combinación de herramientas matemáticas y numéricas basadas en el método de expansión en ondas planas. Como se pudo observar, el plantear las ecuaciones de Maxwell en el espacio de frecuencia permitió describir la ecuación de onda a partir de la cual se obtuvieron los coeficientes del campo magnético, que constituye la solución en ondas planas, siendo esta la base para los análisis posteriores. La ecuación de onda visualizada en el espacio de frecuencias permitió tener una estructura en términos de los vectores de la red recíproca, con el propósito de visualizar las bandas de energías prohibidas (Gaps) de un de cristal fotónico en una dimensión. Lo anterior pudo lograrse a partir de la expansión en ondas planas las cuales se pueden calcular por el método de ondas planas. Con éste método básicamente se calcularon las frecuencias del cristal fotónico para cada valor de dirección de propagación dada por el vector de onda **k**. El método de ondas planas es un método idóneo ya que no requiere de una base extensa y su implementación de acuerdo a la experiencia adquirida en este trabajo no presenta grandes dificultades.

Con los resultados computaciones obtenidos por el software MPB para cristales fotónicos en una dimensión, se puede decir, que cuando existe un mayor contraste entre los valores de las constantes dieléctricas de las distintas capas, el gap fotónico tiene un mayor rango de frecuencia. Además cuando las capas de la estructura multicapa, tienen un porcentaje similar se producen bandas de energías prohibidas de mayor rango, entonces para poder maximizar el tamaño de las bandas de energías prohibidas se deberían construir estructuras multicapas donde el porcentaje de cada capa en la celda unidad fuese similar. Los mapas de los gaps obtenidos permiten diseñar cristales fotónicos para una aplicación deseada, ya que indica el comportamiento de las bandas de frecuencias prohibidas, bajo ciertas condiciones.

Las estructura multicapa que alternan películas de silicio poroso con porosidades diferentes, forman en sí cristales fotónicos unidimensionales, capaces de alterar la propagación de luz en una dimensión. De manera complementaria, existe una concordancia entre los espectros experimentales de reflectancia obtenidos para estas estructuras, y los resultados numéricos de las bandas fotónicas obtenidas por el paquete de software utilizado.

6 Trabajo Futuro

A partir del estudio realizado se puede detectar la necesidad de seguir profundizando en el tema de los cristales fotónicos. Para ello, sería esencial poder comparar la solución analítica encontrada en este estudio con las soluciones computacionales. Es importante mencionar que las soluciones analíticas son complicadas de verificar, que ya se tiene que tener cristales fotónicos muy bien definido.

Además, el estudio se puede extender al análisis de las estructuras de bandas de cristales fotónicos en una dimiensión a cristales fotónicos en dos dimensiones y tres dimensiones, para obtener la propagación de las ondas en dos y tres direcciones.

Referencias

- [1] Blanco, A., Cristales Fotónicos Opalo-Semiconductor (Tesis Doctoral). Universidad Autónoma de Madrid, España, 2001.
- [2] Joannopoulos, J., Johnson, S., Winn, J. and Meade, R., Photonic Crystals: Molding the Flow of Light, Princeton: Princeton University Press, 2008.
- [3] Srivastava, R., Thapa, K., S. Pati, S., and Ojha, S., Design of photonic band gap Filters, *Progress in Electromagnetics Research*, PIER 81, 225-235, 2008.
- [4] Rayleigh, J., On the remarkable phenomenon of crystalline reflexion described by Prof. Stokes, Phil. Mag 26: 256-265, 1888.
- [5] Yablonovitch, E., (1987), Eli "inhibited spontaneus emission in solid-state physics and electronics". Physical review Letters. Vol 58. 2059-62.
- [6] John, S., Strong localization of photons in certain disordered dielectric supperlattices. Physical review Letters. Vol 58. no.23, 2486-9, 1987.
- [7] Nanotypos, Generación color estructural, http://www.nanotypos.com/portal/portfolio/ structural-color-generation, 2013.
- [8] Gutierrez, B., Transcripción de materiales fotónicos, https://prezi.com/vs26ijxhioxx/materiales-fotonicos, 2012.
- [9] Rusell, P., Photonic Crystal Fibers, Science299, 358-362, 2003.
- [10] Goodman, J., Introduction to Fourier Optics. McGraw-Hill Series in Electrical and Computer Engineering, 1996.
- [11] Luo, C., Johnson, S., Joannopoulos, J. and Pendry, J., All-angle negative refraction without negative effective index, Phys. Rev. B, vol. 65, p. 201104, 2002.
- [12] Johnson, S., Joannopoulous, J., Block-iterative frequency domains methods for Maxwell's equations in a plane wave basic, Optics Express, vol. 8, nº 3, pp. 173-190, 2001.
- [13] Johnson, S., Joannopoulous, J., The MIT PHotonic-Bands package home page http://ab-initio.mit.edu/mpb.
- [14] García, R. J, Estudio de los fenómenos de onda lenta y dispersión en estructuras periódicas de fotónica integrada (Tesis doctoral). Universidad Politécnica de Valencia, España, 2008.
- [15] Meade, R., Rappe, A., Brommer, K., and Joannopoulos, J., Acurate theoretical analysis of photonic band-gap materials, Physical Review B, vol. 48, pp. 8434-8437, 1993.
- [16] Parlett, B., «The Rayleigh quotient iteration and some generalizations for nonnormal matrices,» Mathematics of Computation, vol. 28, pp. 679-693, 1974.

- [17] Moctezuma, D., Optimización de heteroestructuras fotónicas de bajo índice de refracción (Tesis doctoral), Universidad de Sonora, México, 2010.
- [18] Ghenadii Korotcenkov, "Porous Silicon, from formation to application", CRC Press, Boca Raton, USA, 2016.

A Características del MPB

Para calcular estructuras de bandas de un cristal fotónico se dispone en la actualidad de herramientas computacionales. Una de ellas es el software gratuito MPB (MIT Photonic Bands) [12], el cual ha sido utilizado para los análisis de bandas en esta tesis. Fue desarrollado por el grupo de fotónica del Instituto Tecnológico de Massachusetts (Massachusetts Institute of Technology, MIT), MPB es un software que permite calcular la estructura de bandas de cristales fotónicos, mediante la obtención de los estados permitidos en el interior de éstos con frecuencias definidas por las ecuaciones de Maxwell [13].

El método utilizado por MPB para calcular los modos del sistema electromagnético consiste en descomponer los campos como la combinación de estados de distintas frecuencias, pero truncando la base completa (por ejemplo, ondas planas tomando una determinada frecuencia de corte), y entonces resolver el problema de valor propio lineal que queda. Tales métodos (de descomposición mediante funciones base) han sido utilizados ampliamente, con muchas variaciones dependiendo de la elección de la base y del algoritmo de resolución [14]. Cualquier base podría utilizarse para realizar la descomposición de los modos; sin embargo, la elección de las bases está determinada por tres factores: primero, las bases deben formar una representación compacta para un número razonable de bandas obteniendo buena precisión. Segundo, las bases deben ser compatibles con un método eficiente que permita reducir la complejidad de los cálculos. Y tercero, deben ser transversales por sí mismas, o proporcionar un método simple para mantener la restricción de transversalidad [15], como se observa en la primera ecuación de (27).

Este problema de valor propio será resuelto mediante un algoritmo iterativo, el cual se elige para optimizar los cálculos. Concretamente, se hará uso del método de minimización por gradiente conjugado precondicionado del cociente de Rayleigh [16], el cual permite obtener en cada iteración la mejor solución en el subespacio.