



**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL
ESTADO DE MORELOS**

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS
INSTITUTO DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y APLICADAS
CENTRO DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS

**“Diseño y aplicaciones de estructuras fotónicas
de silicio poroso”**

TESIS

QUE PARA OBTENER EL GRADO DE

DOCTOR EN CIENCIAS

PRESENTA

Denise Estrada Wiese

DIRECTOR DE TESIS

Dr. Jesús Antonio del Río Portilla

Jurado revisor de Tesis

- Presidente: Dra. Vivechana Agarwal
- Secretario: Dr. Rolando Pérez Álvarez
- Vocal: Dr. Miguel Robles Pérez
- Vocal: Dr. Miguel Eduardo Mora Ramos
- Vocal: Dra. Julia Tagüeña Parga
- Suplente: Dra. Rocio Nava Lara
- Suplente: Dr. Jesús Antonio del Río Portilla

Lista de publicaciones

- N. Sánchez-Castro, M. A. Palomino-Ovando, D. Estrada-Wiese, J. A. del Río, M.B. de la Mora, R. Doti, J. Faubert & J. E. Lugo A photonic self-oscillator based on porous silicon, *Mesoporous Biomater.* **3**, 1526 (2016).
- D. Estrada-Wiese & J.A. del Río, Refractive index evaluation of porous silicon using Bragg reflectors, *Rev. Mex. Fis.* **64**, 7281 (2018).
- D. Estrada-Wiese, E.A. del Río-Chanona & J.A. del Río, Stochastic optimization of broadband reflecting photonic structures, *Sci. Rep* **8**, 1193 (2018).
- N. Sánchez-Castro, M. A. Palomino-Ovando, D. Estrada-Wiese, N. Xcaret Valladares, J. A. del Río, M.B. de la Mora, R. Doti, J. Faubert & J. E. Lugo, The Influence of the External Signal Modulation Waveform and Frequency on the Performance of a Photonic Forced Oscillator, *Materials* **11**, 854 (2018).

Resumen

Las estructuras fotónicas son materiales diseñados de tal manera que pueden controlar la propagación de las ondas electromagnéticas dentro de su estructura. Esto es posible gracias a la periodicidad de su índice de refracción que actúa como un potencial periódico generando brechas de transmisión prohibidas. La manipulación de las ondas electromagnéticas en los materiales fotónicos depende del diseño de sus estructuras permitiendo así el desarrollo de diversos dispositivos para diferentes aplicaciones. Entre algunas de las estructuras más sencillas se destacan los filtros, microcavidades y biosensores; en particular en este trabajo nos interesan los espejos de Bragg y los espejos de banda ancha que reflejan desde longitudes de onda específicas hasta rangos muy amplios del espectro electromagnético permitiendo su uso en diversas aplicaciones, como en dispositivos de concentración solar, entre otros.

El silicio poroso (p-Si) es un material apto para fabricar estructuras fotónicas reflectivas, formadas por capas alternadas de diferentes índices de refracción. En el proceso de diseño y fabricación de estos dispositivos es de vital importancia la caracterización adecuada de las propiedades ópticas del p-Si, en particular de los índices de refracción de capas de diferentes porosidades. En este trabajo obtuvimos mediante diferentes técnicas, experimentales y teóricas, los índices de refracción de p-Si y presentamos un procedimiento práctico para evaluar con precisión los valores obtenidos. La metodología que proponemos aquí consiste en el uso de parámetros cuantitativos basados en la comparación de los experimentos con la teoría. Esta comparación se realiza en forma similar a las medidas de calidad óptica.

El diseño óptimo para producir espejos fotónicos de alta calidad es complicado debido a la diversidad de posibles arreglos periódicos y la configuración correcta

de capas que cada espejo diferente necesita. Cuando se busca diseñar espejos con una brecha fotónica amplia, por ejemplo para aplicaciones de concentración solar, es necesaria la superposición de varios espejos de Bragg. Sin embargo, no es sencillo escoger la configuración óptima de los espejos de Bragg tal que se superpongan adecuadamente para cubrir todo el rango de longitudes de onda deseado. En este trabajo desarrollamos un método de optimización estocástica para diseñar estructuras reflectivas de alta calidad fotónica. Este método combina un algoritmo híbrido de búsquedas aleatorias con una metodología de exploración de espacio reducido para obtener una configuración optimizada de la estructura fotónica deseada. En el procedimiento de optimización la evaluación de las posibles estructuras fotónicas se realiza mediante el cálculo de los espectros de reflectancia teóricos. Realizamos estos cálculos usando el método de la matriz de transferencia donde implementamos el modelo de espesores equidistantes que considera la transmisión incoherente de la luz en las estructuras, logrando así el cálculo de espectros de reflectancia más realistas. Con la fabricación de diferentes espejos fotónicos de p-Si mostramos la viabilidad de nuestro procedimiento y encontramos buena concordancia entre experimento y teoría utilizando una función de mérito. Presentamos con este método una manera optimizada de diseñar estructuras fotónicas reflectivas de banda ancha que pueden ser fabricadas con diferentes materiales y diseñadas para distintas aplicaciones.

Las aplicaciones que exploramos en este trabajo incluyen el uso de espejos fotónicos como sustratos para depositar nanoantenas sobre ellos con el objetivo de mejorar el funcionamiento de los dispositivos para cosechar radiación infrarroja (IR). Realizamos una caracterización con cámara termográfica para evaluar el aumento de temperatura en las diferentes muestras con y sin espejo y encontramos que los espejos fotónicos ayudan a mejorar la eficiencia de las nanoantenas. Adicionalmente, mediante pruebas realizadas con termografía de alta resolución determinamos el aumento de temperatura de una sección transversal de una oblea de silicio cristalino y un espejo optimizado de p-Si. Estudiamos la distribución de temperatura en las muestras y los resultados coinciden con el efecto óptico en un espejo de multicapas que no permite la incidencia de la radiación en su estructura. Aquí obtuvimos evidencia experimental para una mejor comprensión de la interacción de la radiación IR con los espejos fotónicos.

Finalmente, también contribuimos con la fabricación de espejos de Bragg para la producción de micro-motores fotónicos. Estos son dispositivos diseñados para atrapar las ondas electromagnéticas dentro de su estructura y aprovechan la presión de la radiación para formar oscilaciones mecánicas en el dispositivo. Estas oscilaciones se modelaron teóricamente y compararon con resultados ex-

perimentales mostrando buena coincidencia.

Abstract

Photonic structures are materials designed to control the propagation of the electromagnetic waves within their structure. This propagation control is possible due to the periodicity of their refractive indices which act as a periodic potential generating band gaps of forbidden transmission. The manipulation of the electromagnetic waves in photonic materials depends on the design of their structures allowing the development of custom designed devices for many applications. Among the most straightforward structures are filters, microcavities, and biosensors; particularly in this work, we are interested in Bragg and broadband mirrors which reflect from specific to wide wavelength ranges of the electromagnetic spectrum.

Porous silicon (p-Si) is a suitable material to fabricate reflective photonic structures, formed of alternating layers of high and low refractive index. The fair characterization of the optical properties of p-Si is of great value for the fabrication and design of these devices, especially the refractive indices of the layers with different porosities. In this work, we obtained values for the refractive indices of p-Si from different experimental and theoretical techniques and present a practical procedure to evaluate them. The methodology that we propose consists of using quantitative parameters based on the comparison of the experiments with theory in a similar way as the optical quality measures.

To achieve an optimum design to produce high-quality photonic mirrors is complicated due to the different possible periodic arrangements and the adequate layer configuration that each different mirror needs. When designing mirrors with an increased bandgap, for example for solar concentration applications, the superposition of several Bragg mirrors is needed. However, it is no easy task to find the optimum configuration of Bragg mirrors such that they super-

pose adequately to cover the complete desired wavelength range. In this work, we developed a stochastic optimization method to design high quality reflecting photonic structures. This method combines a hybrid algorithm of random search with a methodology of reduced space search to obtain an optimized configuration of the desired photonic structure. The optimization procedure is evaluated through theoretical reflectance spectra simulated using the transfer matrix and the equispaced thickness methods, which improve the calculations due to the consideration of incoherent light transmission through the structure. We show the viability of our procedure by fabricating different photonic mirrors with p-Si and find good agreement between theory and experiment using a merit function. Herein we present an optimized manner to design broadband reflecting photonic structures which can be fabricated with different materials and designed for many applications.

In this work, we explored some applications which include the use of photonic mirrors as substrates to deposit nanoantennas on them with the aim of enhancing their operation to collect infrared radiation (IR). Using a thermal characterization with an infrared camera, we evaluated the temperature increase in different samples finding that the mirrors might upgrade the efficiency of the nanoantennas.

We also studied heat transfer in optimized multilayered mirrors for their use in solar concentration applications. Here we obtained experimental evidence for a better understanding of the interaction of IR radiation with photonic mirrors. We realized experiments with an infrared camera and determined the increase of temperature in a transversal section of a crystalline silicon wafer and compared it to an optimized p-Si mirror. The results agree with the optical effect in the multilayered mirror that forbids the incidence of the radiation in the structure.

Finally, we contributed to the fabrication of Bragg photonic mirrors for the production of photonic micro-motors. These devices are designed to trap electromagnetic waves within its structure and take advantage of the radiation pressure to form mechanical oscillations in the device. These oscillations are modeled theoretically and compared with experimental results showing good agreement.

Agradecimientos

Al Dr. Jesús Antonio del Río Portilla por mucho más que la dirección de esta tesis, gracias por tantas enseñanzas.

A los miembros de mi Comité Tutorial y de mi Jurado por la supervisión de este trabajo de tesis. Gracias por su dedicación y sus acertadas observaciones que han enriquecido mucho este trabajo. Un especial agradecimiento al Dr. Miguel Robles por las informativas conversaciones que tuvimos y por su ayuda en la programación del modelo teórico.

Agradezco el apoyo financiero otorgado por CONACyT mediante la beca de doctorado. Así como el apoyo recibido del proyecto 354 Fronteras de la Ciencia y el apoyo recibido de la UAEM para la asistencia de congresos.

A J. Campos por su apoyo en la adquisición de imágenes SEM. A J. Méndez y B. Mora por su ayuda en la fabricación de las nanoantenas y la toma de imágenes SEM. Al Dr. F. J. González por la dirección del proyecto de las nanoantenas. Al Dr. J.E. Lugo por invitarnos a participar en el proyecto de los micromotores. A mis compañeros de laboratorio, Enrico, Jazael y Salvador, por su ayuda en la solución de varios problemas experimentales.

Finalmente quiero agradecer el apoyo incondicional de mi familia y amigos, que me alientan a seguir siempre adelante y me motivan a ser mejor cada día. A mi hijo, con quien he crecido y aprendido tantas lecciones de vida. A mi pareja, que vivió conmigo el día a día en esta etapa, gracias por su amor, su apoyo y su aliento constante.

Contenido

Introducción	1
1. Estructuras fotónicas	7
1.1. Estructuras fotónicas reflectivas	7
1.1.1. Espejos de Bragg	8
1.1.2. Espejos de banda ancha	9
1.2. Espectros de reflectancia teóricos	11
1.2.1. Espectros de reflectancia considerando imperfecciones . .	13
2. Espejos fotónicos de silicio poroso	17
2.1. Silicio poroso	17
2.1.1. Fabricación de multicapas de p-Si	19
2.2. Caracterización del índice de refracción	21
2.2.1. Elipsometría espectroscópica de p-Si	22
2.2.2. Modelos de medio efectivo para p-Si	27
2.2.3. El factor Q_e	30
2.2.4. Espejo de banda ancha	35
3. Optimización estocástica de espejos fotónicos	37
3.1. Diseño de espejos fotónicos	38
3.1.1. Subespejo intermedio de la distribución de longitudes de onda de Padé	40
3.2. Optimización estocástica	41
3.2.1. Algoritmo de optimización estocástica	43
3.3. Validación experimental	46

4. Aplicaciones de espejos fotónicos	51
4.1. Nanoantenas	52
4.1.1. Fabricación de nanoantenas	53
4.1.2. Caracterización térmica de nanoantenas	56
4.1.3. Resultados y análisis	65
4.1.4. Caracterización eléctrica de nanoantenas	67
4.2. Transferencia de calor en espejos para concentración solar	71
4.2.1. Experimentos de transferencia de calor en espejos fotónicos	72
4.3. Micromotores fotónicos	77
Conclusiones	83
Referencias	86

Lista de Figuras

1.1.	Esquema de un espejo de Bragg formado por capas alternantes de índice de refracción alto (η_a) y bajo (η_b).	9
1.2.	Esquema de un espejo fotónico de banda ancha formado por f sub-espejos de 3 periodos cada uno.	10
1.3.	Comparación entre espectros de reflectancia: teórico $T(\lambda)$ calculado con MMT y teórico efectivo $T_{ef}(\lambda)$ de un espejo fotónico de p-Si. . .	14
1.4.	Espectros de reflectancia experimental $E_{xp}(\lambda)$, teórico $T(\lambda)$ calculado con MMT, teórico efectivo $T_{ef}(\lambda)$ y teórico efectivo equidistante T_{eq} de un espejo fotónico de p-Si.	16
2.1.	Esquema de la celda electroquímica donde se fabrica el p-Si [33]. . .	19
2.2.	Imagen SEM de una estructura de multicapas de altas P_a y bajas porosidades P_b , con índices de refracción η_a y η_b respectivamente. . .	20
2.3.	Representación sinóptica del modelo óptico de p-Si de a) baja porosidad con un modelo de porosidad gradual y b) de alta porosidad con un modelo anisotrópico uniaxial.	24
2.4.	Espectro de depolarización representativo de una monocapa de alta porosidad de p-Si.	25
2.5.	Ejemplo de la comparación entre los ángulos elipsométricos ψ y Δ_S de una muestra de p-Si de a) baja porosidad y b) de alta porosidad. . . .	25
2.6.	Espectros del índice de refracción de p-Si obtenidos por SE, y los diferentes métodos de medio efectivo: Looyenga, la formula dRZW, las interpolaciones paralela y lineal y la aproximación de Bruggeman para a) capas de baja porosidad P_b , y b) capas de alta porosidad P_a . .	26

2.7.	Razón de índices de refracción ($n_a(\lambda)/n_b(\lambda)$) de p-Si obtenidos por SE, Looyenga, la formula dRZW, las interpolaciones paralela y lineal y la aproximación de Bruggeman	29
2.8.	Espectros de reflectancia teóricos (línea negra punteada) y experimentales (línea roja continua) de los espejos de Bragg fabricados con los índices de refracción obtenidos por SE centrados en a) $\Lambda_T= 600$ nm, b) 800 nm y c) 1000 nm.	31
2.9.	Espectros de reflectancia teóricos (línea negra punteada) y experimentales (línea roja continua) de los espejos de Bragg fabricados con los índices de refracción obtenidos por la fórmula de Looyenga centrados en a) $\Lambda_T= 600$ nm, b) 800 nm y c) 1000 nm.	33
2.10.	Espectros de reflectancia teóricos (línea negra punteada) y experimentales (línea roja continua) de los espejos de Bragg fabricados con los índices de refracción obtenidos por la fórmula de dRZW centrados en a) $\Lambda_T= 600$ nm, b) 800 nm y c) 1000 nm.	34
2.11.	Espectros de reflectancia teóricos (línea negra punteada) y experimentales (línea roja continua) de los espejos de Bragg fabricados con los índices de refracción obtenidos de la aproximación de Bruggeman centrados en a) $\Lambda_T= 600$ nm, b) 800 nm y c) 1000 nm.	34
2.12.	Espectros de reflectancia teóricos (línea negra punteada) y experimentales (línea roja continua) del espejo de banda ancha fabricado con los índices de refracción de Bruggeman.	36
3.1.	Espectros teóricos de a) un subespejo centrado en 400 nm con diferente número de periodos. b) un espejo de banda ancha de 400 a 2000 nm, con diferente número de subespejos.	39
3.2.	Diagrama de flujo del algoritmo de optimización.	46
3.3.	Espectros de reflectancia teóricos (T_A, T_B) y experimentales (E_A, E_B) de los espejos M_1 diseñados para reflejar el rango de 400 a 2000 nm. Sus distribuciones de longitud de onda $\Lambda(n_s)$ (figura en el recuadro) son obtenidos de los parámetros optimizados.	48
3.4.	Espectros de reflectancia teóricos (T_A, T_B) y experimentales (E_A, E_B) de los espejos M_2 diseñados para reflejar el rango de 600 a 1200 nm. Sus distribuciones de longitud de onda $\Lambda(n_s)$ (figura en el recuadro) son obtenidos de los parámetros optimizados.	49

3.5.	Espectros de reflectancia teóricos (T_A, T_B) y experimentales (E_A, E_B) de los espejos M_3 diseñados para reflejar el rango de 800 a 1800 nm. Sus distribuciones de longitud de onda $\Lambda(n_s)$ (figura en el recuadro) son obtenidos de los parámetros optimizados.	49
4.1.	Espectros de reflectancia de los tres diferentes sustratos sobre los cuales depositamos las nanoantenas.	54
4.2.	Esquema de los pasos de fabricación de nanoantenas mediante litografía de haz de electrones [70].	55
4.3.	Imágenes SEM de una sección de la matriz de 150×150 nanoantenas tipo <i>Bowtie</i> fabricadas mediante litografía de haz de electrones. . . .	56
4.4.	a) Arreglo experimental para medir el cambio de temperatura en las nanoantenas sobre diferentes sustratos al someterlas a radiación infrarroja mediante un caudín. b) Imagen IR del arreglo de nanoantenas tomada con la cámara IR. El área donde se encuentran las nanoantenas fue seleccionado para realizar las mediciones de temperatura en esa zona.	60
4.5.	Mediciones representativas del cambio de temperatura en el tiempo de las nanoantenas sobre los sustratos: espejo fotónico de p-Si, monocapa de p-Si y oblea de c-Si. Las muestras se calentaron con un caudín a un ángulo de 45° respecto al eje de la cámara IR.	61
4.6.	Arreglo experimental para medir el cambio de temperatura en las nanoantenas sobre diferentes sustratos al someterlas a radiación infrarroja mediante un foco infrarrojo.	63
4.7.	Mediciones del aumento de temperatura $\Delta T(t)$ de tres muestras (A, B, C) de cada sustrato de: c-Si, espejo fotónico y monocapas de p-Si.	66
4.8.	Promedio de las mediciones del aumento de temperatura $\Delta T(t)$ de todas los sustratos de c-Si, espejo fotónico y monocapas de p-Si. Se muestra el ajuste lineal de cada promedio con una línea continua. . . .	66
4.9.	a) Espectros de reflectancia experimentales de los espejos B y b) de los espejos A.	68
4.10.	a) Arreglos de nanoantenas bimetálicas conectadas en serie sobre el espejo B y b) sobre el espejo A.	69
4.11.	a) Chip con muestras de nanoantenas, b) Chip con nanoantenas conectado a un multímetro para medir el cambio en el voltaje.	69

4.12. a) Imagen IR de tres espejos distintos sometidos a radiación solar concentrada. b) Medición de temperatura representativa de tres espejos sometidos a radiación solar concentrada. Los datos se analizaron considerando el aumento de temperatura en función de la difusividad térmica [77].	72
4.13. Arreglo experimental para medir la transferencia de calor en la sección transversal de un espejo fotónico de multicapas de p-Si y una oblea de c-Si.	73
4.14. Imágenes IR de la sección transversal de un espejo de p-Si tomadas en los tres tiempos característicos del experimento: t_0 , t_m y t_f	74
4.15. Cambio de temperatura $\Delta T(p)$ de la sección transversal de todas las mediciones del espejo fotónico en los tiempos característicos t_0 , t_m y t_f	75
4.16. Cambio de temperatura $\Delta T(p)$ de la sección transversal de todas las mediciones del silicio cristalino en los tiempos característicos t_0 , t_m y t_f	75
4.17. Promedio de todas las mediciones del cambio de temperatura $\Delta T(p)$ del espejo fotónico en los tres tiempos característicos. Las líneas rojas punteadas indican aproximadamente la interfaz entre el sustrato de c-Si, el espejo y el aire.	76
4.18. Promedio de todas las mediciones del cambio de temperatura $\Delta T(p)$ del c-Si en los tres tiempos característicos. La línea roja punteada indica la interfaz entre el c-Si y el aire.	76
4.19. Espectros de reflectancia experimentales de espejos autosoportados centrados en $\Lambda = 633$ nm formados por a) 6 periodos y b) 16 periodos.	79
4.20. (a) Esquema del dispositivo vibrador formado por dos espejos de p-Si autosoportados encimados [27], (b) Esquema de las multicapas de p-Si, donde cada una forma un espejo [83].	80

Introducción

Desde la prehistoria el ser humano ha aprovechado el entendimiento de las propiedades de los recursos naturales para su uso en la fabricación de herramientas útiles en su día a día. Con el paso del tiempo, se ha incrementado considerablemente nuestro conocimiento sobre las características de los materiales resultando en avances muy importantes en el desarrollo de la tecnología. En las últimas décadas del siglo actual ha habido un creciente interés en el estudio de las propiedades ópticas de los materiales donde la interacción de la luz con la materia es el principal objeto de estudio.

Lograr el control de la respuesta de las ondas electromagnéticas mediante la creación de materiales para fines específicos, es una muestra del desarrollo tecnológico. A partir de la producción de materiales que reflejan perfectamente un rango de longitudes de onda de la luz, o que permiten su propagación únicamente en una dirección, hasta materiales que confinan la luz en regiones específicas, surge una gran lista de aplicaciones para la creación de diversos dispositivos. A este tipo de materiales, que pueden controlar la propagación de la luz dependiendo de su diseño y estructura, se les llama cristales fotónicos. Estos están inspirados en fenómenos de interferencia que ocurren frecuentemente en la naturaleza, como la coloración brillante de las alas de las mariposas, algunos insectos o las plumas de los pavorreales, donde la reflexión de los colores se da debido a patrones repetidos en la microestructura que presentan, y no por pigmentos. Los cristales fotónicos están formados por un arreglo periódico de materiales dieléctricos y tienen la propiedad de controlar la propagación de las ondas electromagnéticas debido a la existencia de brechas fotónicas. Estas son brechas donde la transmisión de ciertas frecuencias está prohibida. De esta manera los cristales fotónicos presentan propiedades análogas a los materiales electrónicos

donde la geometría de su estructura dicta las propiedades de conducción de los electrones [1]. La dirección de la periodicidad en la estructura define la dimensionalidad de los cristales fotónicos, siendo los unidimensionales los más sencillos al estar conformados por arreglos de multicapas.

Entre los diversos dispositivos ópticos que pueden fabricarse se destacan los espejos, utilizados desde la Edad Media donde se producían mediante el pulido de metales, más tarde mediante el plateado de vidrio y en la actualidad con diversos métodos como la evaporación de diferentes materiales, el depósito de capas delgadas [2] o la creación de reflectores fotónicos. Estos espejos se componen por cristales fotónicos unidimensionales formados por capas alternantes de diferente índice de refracción.

Cuando una onda electromagnética incide en la estructura fotónica esta es reflejada totalmente si su frecuencia está dentro de la brecha de transmisión prohibida que genera el arreglo periódico. Esta onda incidente es parcialmente reflejada en la interfaz de cada capa, debido a la periodicidad de las capas y al cumplir la condición del $1/4$ de camino óptico las múltiples reflexiones interfieren destructivamente evitando la propagación de la onda, se forma así un espejo fotónico [1]. A un espejo fotónico que refleja únicamente cierta longitud de onda central se le llama espejo de Bragg y se caracteriza por tener una brecha fotónica estrecha alrededor de dicha longitud de onda. Si se desea fabricar estructuras fotónicas que reflejen un rango más amplio de longitudes de onda es necesaria la superposición de varios espejos de Bragg para ensanchar la brecha fotónica. Sin embargo, no es sencillo escoger la configuración de los espejos de Bragg y sus longitudes de onda centrales tal que se superpongan adecuadamente para cubrir todo el rango deseado. Se han desarrollado muchas maneras diferentes para diseñar este tipo de espejos, como por ejemplo mediante el uso de relaciones de recurrencia [3], estructuras escalonadas [4, 5] o mediante perfiles de incremento gradual [6–8]. Comúnmente, la versatilidad de estos métodos está limitada a parámetros estructurales empíricos, como el número de capas de la estructura, o la cantidad necesaria de espejos de Bragg, restringiendo así su utilidad.

En este trabajo proponemos un método práctico y versátil para diseñar estructuras fotónicas reflectivas que puede aplicarse para diferentes materiales dieléctricos. La metodología que proponemos aquí se basa en los principios de la optimización estructural, donde se busca la *mejor* estructura que cumpla con ciertas restricciones, mismas que pueden usarse como una medida de lo que es “mejor”, *i.e.* como una función de evaluación llamada función objetivo. Por lo tanto, un problema de optimización se formula para definir un parámetro para el desempeño de la estructura como una función objetivo que debe ser maximizada

o minimizada al utilizar algunas de las restricciones [9]. Para resolver un problema de optimización existen muchas estrategias diferentes que pueden utilizarse dependiendo de las características y restricciones del sistema. En este trabajo proponemos una optimización estocástica cuyo algoritmo fue desarrollado específicamente para el diseño de espejos fotónicos altamente reflectivos. Con esta metodología ofrecemos una manera útil para diseñar espejos fotónicos con el único requisito de definir el rango de longitudes de onda deseado y la necesidad de conocer los índices de refracción de los materiales dieléctricos que conforman la estructura de multicapas.

Para lograr una optimización efectiva es importante la estrategia de la búsqueda de un óptimo y también la determinación de una función objetivo adecuada. Debido a que el propósito de este trabajo se enfoca en la producción de espejos fotónicos altamente reflectivos, la función objetivo que proponemos está basada en el cálculo de su espectro de reflectancia. Para esto se utiliza comúnmente el método de matriz de transferencia que, mediante el análisis de la propagación coherente de los campos electromagnéticos totales a través de la estructura de multicapas, calcula cuales longitudes de onda de la luz pueden ser reflejadas por el espejo. Sin embargo, en esta descripción no se toman en cuenta las imperfecciones que puede haber en las capas y que pueden ser causa de efectos de dispersión parcial de la luz. Para simular los espectros de reflectancia de manera más realista es necesario tomar en cuenta los efectos de la interferencia parcialmente incoherente de la luz debido a defectos en las capas, como la rugosidad por ejemplo. Por esta razón consideramos en este trabajo la adaptación de un modelo que extiende el método de matriz de transferencia para tomar en cuenta las imperfecciones de las capas: el modelo de espesores equidistantes propuesto por K. Kang et al. [10], implementando con un parámetro experimental la rugosidad en las interfaces de las capas.

Las estructuras fotónicas unidimensionales típicamente se fabrican mediante la deposición de capas alternantes de diferentes materiales como por ejemplo $\text{TiO}_2/\text{SiO}_2$ mediante técnicas de sputtering [11]. Con estas técnicas es posible la preparación de sustratos muy grandes, pero tienen la desventaja de que solamente son posibles valores discretos de los índices de refracción de los materiales. Se ha mostrado en cuantiosos trabajos que el silicio poroso es un material viable para la fabricación de estructuras fotónicas debido a la dependencia de su porosidad, y por lo tanto su índice de refracción, con las condiciones de su preparación [12–16]. De esta manera, al controlar las propiedades ópticas del silicio poroso es posible construir estructuras de multicapas con diferentes porosidades utilizando el mismo material facilitando los procesos de fabricación de los espejos fotónicos.

Es así como, tras dominar las condiciones de fabricación del silicio poroso, es de gran importancia la caracterización precisa de los valores de sus índices de refracción. Entre las técnicas más comunes para su determinación se destaca la elipsometría espectroscópica basada en la medición de la transformación de la polarización que ocurre después de la reflexión de un haz polarizado sobre un sustrato [17]. Sin embargo, mostramos en este trabajo mediante la evaluación con una métrica como factor de calidad, que esta técnica no es adecuada para la obtención de valores de los índices de refracción del silicio poroso para la fabricación de espejos fotónicos. Exploramos consecuentemente otros métodos para la aproximación de los índices de refracción mediante diferentes métodos de medio efectivo y utilizando el factor de calidad proponemos un procedimiento de evaluación para el desempeño de dichos índices [14].

Finalmente, al conocer las propiedades ópticas de los materiales y con una herramienta de diseño optimizada es posible la fabricación de estructuras fotónicas reflectivas para su uso en diferentes aplicaciones. Algunos ejemplos de dispositivos ópticos que pueden fabricarse son las guías de onda [18–20], microcavidades y espejos de Bragg [16], espejos para láseres [21], espejos de banda ancha [15, 22], sensores químicos y biológicos [23, 24] entre muchos otros.

En este trabajo presentamos la exploración de tres diferentes aplicaciones para espejos fotónicos de silicio poroso con el propósito de abrir posibilidades futuras y aportar mayor información sobre algunas de sus propiedades. Presentamos un estudio experimental del uso de espejos fotónicos como sustratos de nanoantenas metálicas para mejorar su desempeño [25]. Mediante una caracterización térmica y eléctrica evaluamos la capacidad de las nanoantenas sobre diferentes sustratos para captar energía. Con el mismo arreglo experimental analizamos el transporte de calor en espejos fotónicos de banda ancha para su empleo en aplicaciones de concentración solar [3]. Adicionalmente contribuimos con la fabricación de micromotores fotónicos compuestos por dos espejos de Bragg autosoportados para la creación de oscilaciones autosostenidas y forzadas [26, 27]. Los resultados obtenidos del estudio de estas aplicaciones presentan un preámbulo para trabajo futuro.

En lo referente al contenido de esta tesis, en el primer capítulo proporcionamos los fundamentos teóricos necesarios para entender la interacción de la luz con las estructuras fotónicas reflectivas y detallamos como estas deben estar conformadas para lograr una máxima reflexión. Mediante la descripción del método de matriz de transferencia y con la implementación de dos modelos donde se consideran las imperfecciones en las capas que conforman las estructuras, es posible la simulación de espectros de reflectancia más realistas. Aquí presentamos la

comparación de ambos modelos donde el modelo de espesores equidistantes es favorecido y consecuentemente es utilizado para calcular todos los espectros de reflectancia teóricos en este trabajo.

Para la producción de los espejos fotónicos con silicio poroso, en el segundo capítulo describimos el procedimiento experimental para la fabricación de las multicapas de silicio poroso mediante ataque electroquímico. Debido a la importancia de una caracterización precisa de los índices de refracción presentamos una novedosa evaluación del desempeño de diferentes valores de índices de refracción obtenidos por elipsometría espectroscópica y diversos métodos de medio efectivo [14]. Mediante una métrica definida como factor de calidad realizamos la valoración de los índices y presentamos los resultados obtenidos. De esta manera obtenemos valores precisos de los índices de refracción del silicio poroso, necesarios para la fabricación de estructuras fotónicas de alta calidad.

En el tercer capítulo presentamos el método de optimización estocástica desarrollado en este trabajo para diseñar espejos fotónicos de banda ancha altamente reflectivos. Introducimos los tres parámetros estructurales que definen los posibles arreglos de multicapas que conforman un espejo fotónico, mismos que optimizamos mediante un algoritmo híbrido de búsqueda global y local. Con la definición de una función objetivo que busca la máxima reflectancia del espectro de reflectancia de los espejos fotónicos evaluamos las diversas posibilidades hasta el hallazgo de una estructura óptima. Haciendo uso de esta práctica herramienta de diseño se fabrican diferentes estructuras fotónicas reflectivas con silicio poroso y demostramos muy buena coincidencia con la teoría mediante una función de mérito probando exitosamente la viabilidad del método.

Proporcionamos en el cuarto capítulo la exploración experimental de tres diferentes aplicaciones con estructuras fotónicas reflectivas. Aquí analizamos el uso de espejos fotónicos como sustratos para nanoantenas buscando mejorar su desempeño en la captación de energía. Mediante una caracterización térmica, donde se realizan mediciones de temperatura con una cámara infraroja con una alta resolución espacial, evaluamos la capacidad de las nanoantenas para capturar energía al estar depositadas sobre diferentes sustratos. También analizamos el transporte de calor en espejos fotónicos optimizados de banda ancha para su empleo como espejos secundarios en concentradores solares. Además de presentar resultados interesantes, en este capítulo proporcionamos un procedimiento experimental que abre la posibilidad de trabajo futuro en el estudio de la transferencia de calor en microestructuras. Presentamos también otro proyecto en el cual se ha colaborado con el grupo de J. E. Lugo et al. con la fabricación de espejos fotónicos autosoportados para la producción de micromotores fotónicos [26, 27].

En este estudio se analizaron oscilaciones autosostenidas y forzadas en los micromotores proporcionando así mayor información sobre estos dispositivos que pueden ser de utilidad en diversas aplicaciones.

Finalmente, exponemos las conclusiones de esta tesis donde se resumen las aportaciones y los resultados más importantes de este trabajo de investigación.

Capítulo 1

Estructuras fotónicas

En este capítulo presentamos algunos de los aspectos más importantes para comprender la interacción de las ondas electromagnéticas (EM) con estructuras fotónicas unidimensionales, en particular con estructuras reflectivas: espejos de Bragg y de banda ancha. Aquí describimos cómo se conforman los espejos de banda ancha y presentamos una manera de distribuir las longitudes de onda centrales para lograr espejos fotónicos con espectros de alta reflectancia. Proporcionamos además los fundamentos teóricos necesarios para poder simular los espectros de reflectancia en dichas estructuras. Para esto hemos implementado el uso de dos modelos que consideran las imperfecciones del material logrando así cálculos teóricos más realistas.

1.1. Estructuras fotónicas reflectivas

Los cristales fotónicos, llamados también estructuras fotónicas, son materiales diseñados de tal manera que controlan la propagación de las ondas EM dentro de la estructura. Esto es posible gracias a la periodicidad de su índice de refracción que actúa como un potencial periódico generando brechas de transmisión prohibidas. Los fotones con longitudes de onda comparables al periodo y al tamaño característico de la estructura no pueden propagarse debido a estas brechas fotónicas [1]. Únicamente las ondas EM con ciertas frecuencias permitidas, que corresponden a las bandas de energía del cristal fotónico, pueden viajar

dentro de la estructura. La propagación de la luz puede controlarse al modificar las brechas y bandas fotónicas cambiando el diseño y los materiales de la estructura fotónica. De esta forma es posible diseñar diferentes arreglos fotónicos para crear diversos dispositivos como filtros de longitudes de onda específicas [16], microcavidades [19], biosensores [23], espejos de Bragg [14] y espejos de banda ancha [15], micromotores fotónicos [26, 27], entre otros.

El control de las ondas EM solamente es posible en la dirección de la periodicidad del índice de refracción; puede ser en 1, 2 o 3 dimensiones. Las estructuras más sencillas son las unidimensionales que están formadas por capas alternantes de índice de refracción altas (η_a) y bajas (η_b) con espesores repetidos d_a y d_b respectivamente. Estos arreglos de multicapas pueden diseñarse de tal manera que reflejen ondas EM con longitudes de onda específicas Λ formando así los llamados espejos de Bragg.

En este trabajo nos enfocamos en el diseño, fabricación y algunas aplicaciones de estructuras fotónicas reflectivas: espejos de Bragg y espejos de banda ancha. A continuación se describe cómo se constituyen los diferentes tipos de espejos fotónicos.

1.1.1. Espejos de Bragg

Cuando una onda EM con una longitud de onda específica entra al arreglo de multicapas, esta es parcialmente reflejada en las interfaces de cada capa debido a la periodicidad del índice de refracción. Para lograr un máximo de reflexión es necesario que las reflexiones provenientes de toda la estructura sean constructivas y para ello el espesor de cada capa d_i debe satisfacer la relación del camino óptico: $\eta_i d_i = \Lambda/4$; donde $i = a, b$ para las capas de índice de refracción alto η_a y bajo η_b respectivamente. Adicionalmente es necesario que el contraste de los índices entre las capas (η_a/η_b) sea alto para poder formar una brecha fotónica amplia alrededor de una longitud de onda central Λ creando así un espejo perfecto. A la estructura de multicapas, como la mostrada en la figura 1.1, que satisface estas propiedades se le llama espejo de Bragg. El espejo de Bragg mostrado en el esquema de la figura 1.1 está formado por 6 periodos, i.e. 6 capas de η_a y 6 capas de η_b .

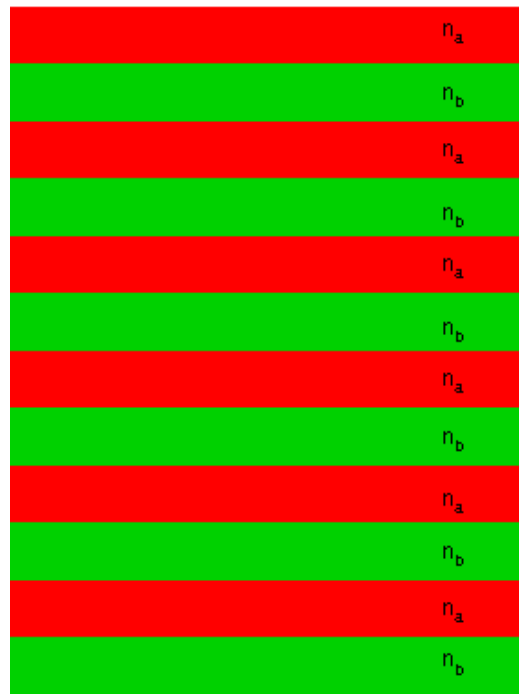


Figura 1.1: Esquema de un espejo de Bragg formado por capas alternantes de índice de refracción alto (η_a) y bajo (η_b).

1.1.2. Espejos de banda ancha

El ancho de la banda fotónica de un espejo de Bragg está definido como el rango de longitudes de onda donde hay máxima reflectancia y depende del contraste de índices de refracción entre las capas que forman la nanoestructura. Cuando se busca diseñar espejos con una banda fotónica mayor, por ejemplo para aplicaciones de concentración solar [3], es necesaria la superposición de varios espejos de Bragg, resultando en una banda fotónica más ancha. Sin embargo, no es sencillo escoger la configuración de los espejos de Bragg tal que se superpongan adecuadamente para cubrir todo el rango de longitudes de onda deseado. En la figura 1.2 se muestra un esquema de un espejo de banda ancha, formado por n_s número de espejos de Bragg (llamados en este contexto *subespejos*), donde cada uno refleja alrededor de una longitud de onda central Λ . La elección adecuada de cada Λ representa uno de los aspectos más importantes para cumplir con dicho objetivo. Ya hemos abordado este problema en un trabajo anterior [15] donde proponemos el uso del aproximante de Padé como una solución para

encontrar diferentes maneras de distribuir las Λ de los subespejos. A continuación detallamos esta metodología, ya que conforma parte de nuestra propuesta de optimización estocástica.

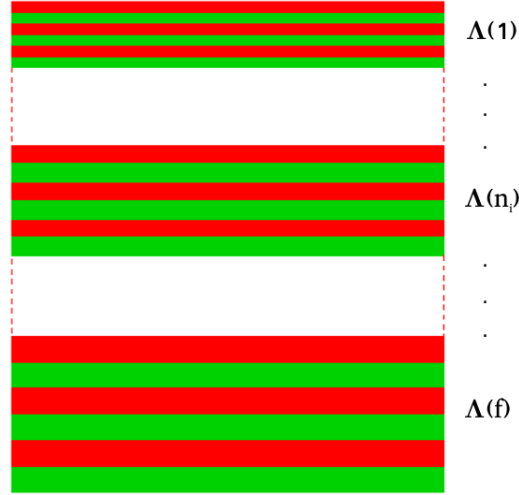


Figura 1.2: Esquema de un espejo fotónico de banda ancha formado por f subespejos de 3 periodos cada uno.

Distribución de longitudes de onda de Padé

La distribución de longitudes de onda centrales $\Lambda(n_s)$ adecuada para diseñar un espejo fotónico de banda ancha puede encontrarse mediante el método basado en el aproximante de Padé [15]. Aquí se asigna la longitud de onda central de cada subespejo ($n_s = 1, \dots, n_i, \dots, f$) mediante la siguiente relación:

$$\Lambda(n_s) = \frac{a + a_1 n_s}{1 + b_1 n_s}, \quad (1.1)$$

donde a , a_1 y b_1 son coeficientes desconocidos; que pueden ser unívocamente definidos al resolver el siguiente sistema de ecuaciones:

$$\Lambda(1) = \frac{a + a_1 1}{1 + b_1 1}, \quad \Lambda(n_i) = \frac{a + a_1 n_i}{1 + b_1 n_i}, \quad \Lambda(f) = \frac{a + a_1 f}{1 + b_1 f}. \quad (1.2)$$

El rango de longitudes de onda del espejo está delimitado por la longitud de onda central del primer $\Lambda(1)$ y último subespejo $\Lambda(f)$ definiendo así su banda fotónica. Para resolver el sistema de ecuaciones 1.2 también es necesario conocer

cual subespejo es intermedio n_i y su correspondiente longitud de onda central $\Lambda(n_i)$. El cambio de estos dos parámetros (n_i y $\Lambda(n_i)$) establecen la forma de la distribución $\Lambda(n_s)$ de manera que su elección influye directamente en la continuidad y la reflectancia de la brecha fotónica del espejo. En este trabajo proponemos un método de optimización estocástica donde buscamos los valores óptimos de ambos parámetros para diseñar espejos de banda ancha altamente reflectivos. Este método estocástico está descrito más adelante en el capítulo 3.

Dentro de los aspectos importantes para el diseño de los espejos fotónicos está la simulación de sus espectros de reflectancia. Estos nos permiten visualizar gráficamente el porcentaje de reflectancia para cada longitud de onda incidente en la estructura, mostrando así las bandas fotónicas de los espejos. Para calcular la reflectancia de una estructura de multicapas se utiliza comunmente la teoría de matriz de transferencia basada en las ecuaciones de Maxwell. En la siguiente sección mostramos en que consiste este método para calcular los espectros de reflectancia. Posteriormente incluimos una manera de considerar imperfecciones en las multicapas para simular los espectros de reflectancia de manera más realista.

1.2. Espectros de reflectancia teóricos

Uno de los métodos más usados para calcular los espectros de dispersión en estructuras de multicapas es el método de matriz de transferencia (MMT). Esta metodología consiste en analizar la propagación de los campos electromagnéticos (EM) totales a través de una estructura de multicapas. De acuerdo a las ecuaciones de Maxwell, los componentes transversales de los campos eléctrico \mathbf{E} y magnético $\mathbf{H} = \mathbf{M}/\mu$ deben ser continuos en la interfaz de cada capa, de manera que si se conocen los campos EM incidentes es posible determinar los campos EM al final de cada capa mediante la matriz característica \mathbf{M}_{d_j} [28]. Al tomar en cuenta que una onda EM linealmente polarizada que incide en una capa dieléctrica delgada experimenta un cambio de fase, se obtiene la expresión para \mathbf{M}_{d_j} de una capa. La deducción matemática de esta descripción es explicada por Hecht en [28]. Para un campo eléctrico transversal TE a incidencia normal, \mathbf{M}_{d_j} es una función del índice de refracción complejo $\eta_j = n + ik$, el espesor d_j de la capa j y la longitud de onda λ de \mathbf{E} :

$$\mathbf{M}_{d_j} \equiv \mathbf{M}_{d_j}(\eta_j, \lambda) = \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{2\pi\eta_j d_j}{\lambda}\right) & i \sin\left(\frac{2\pi\eta_j d_j}{\lambda}\right)/Y_j \\ iY_j \sin\left(\frac{2\pi\eta_j d_j}{\lambda}\right) & \cos\left(\frac{2\pi\eta_j d_j}{\lambda}\right) \end{pmatrix}. \quad (1.3)$$

Aquí Y_j está determinado por $Y_j = \sqrt{\frac{\varepsilon_0}{\mu_0}} \eta_j$, donde ε_0 y μ_0 son la permitividad y permeabilidad en el vacío. La propagación de \mathbf{E} en una estructura de l capas es representada por la matriz de transferencia \mathbf{M} como:

$$\begin{bmatrix} E_I \\ H_I \end{bmatrix} = \mathbf{M} \begin{bmatrix} E_{(l+1)} \\ H_{(l+1)} \end{bmatrix}, \quad (1.4)$$

donde $E_I, H_I, E_{(l+1)}, H_{(l+1)}$ son los campos \mathbf{E} y \mathbf{H} de la primer y última interfaz, respectivamente. La matriz de transferencia \mathbf{M} se define como el producto de las matrices características \mathbf{M}_{d_j} de cada capa desde $j = 1, 2, \dots, l$ como:

$$\mathbf{M} = \mathbf{M}_{d_1} \mathbf{M}_{d_2} \cdots \mathbf{M}_{d_l}. \quad (1.5)$$

Debido a que los espejos fotónicos están formados por n_s subespejos con p número de periodos compuestos por capas de alto (\mathbf{A}) y bajo (\mathbf{B}) índice de refracción; la matriz de transferencia total de una estructura de este tipo se construye al multiplicar iterativamente las matrices de cada subespejo:

$$\mathbf{M} = (\mathbf{M}_{d_A(1)} \mathbf{M}_{d_B(1)})^p (\mathbf{M}_{d_A(2)} \mathbf{M}_{d_B(2)})^p \cdots (\mathbf{M}_{d_A(f)} \mathbf{M}_{d_B(f)})^p. \quad (1.6)$$

Reformulando la ecuación 1.4 en términos de las condiciones de frontera y al expandir las matrices resultantes, se obtienen las siguientes relaciones:

$$1 + r = m_{11}t + m_{12}Y_s t \quad (1.7)$$

y

$$(1 - r)Y_0 = m_{21}t + m_{22}Y_s t, \quad (1.8)$$

donde Y_a representa el medio incidente (aire) y Y_s a la interfaz con el sustrato; r y t son los coeficientes de reflexión y transmisión, o también llamados coeficientes de Fresnell. Resolviendo el sistema de ecuaciones se puede escribir el coeficiente de reflexión en términos de los elementos m_{ij} de \mathbf{M} como:

$$r = \frac{Y_a m_{11} + Y_a Y_{(l+1)} m_{12} - m_{21} - Y_{(l+1)} m_{22}}{Y_a m_{11} + Y_a Y_{(l+1)} m_{12} + m_{21} + Y_{(l+1)} m_{22}}. \quad (1.9)$$

Finalmente se calcula la reflectancia R elevando al cuadrado el coeficiente de reflexión:

$$R = |r|^2. \quad (1.10)$$

El espectro de reflectancia de una estructura de multicapas se puede simular al calcular R para todas las longitudes de onda definidas en el rango deseado. Cabe mencionar que la ecuación 1.9 contempla que todas las capas que conforman la estructura son perfectas.

1.2.1. Espectros de reflectancia considerando imperfecciones

El método MMT descrito antes considera la propagación coherente de la luz en la estructura de multicapas que conforma un espejo fotónico. Sin embargo, en esta descripción no se toma en cuenta las imperfecciones como la rugosidad que pueden presentar las capas de diferentes materiales, como el silicio poroso por ejemplo, y que son causantes de efectos de dispersión parcial de la luz. Para simular los espectros de manera más realista es necesario tomar en cuenta los efectos de la interferencia parcialmente incoherente de la luz debido a la rugosidad y/o defectos. Nuestra meta aquí es calcular los espectros de reflectancia de espejos fotónicos fabricados con silicio poroso y a continuación presentamos dos modelos diferentes que hemos implementado en nuestros cálculos para lograr dicho objetivo.

Modelo de fase aleatoria

El método de fase aleatoria propuesto por M. Claudia Troparevsky et al [29] se caracteriza por introducir la parcial o total incoherencia de la luz al sumar una fase aleatoria δ en los elementos de la matriz de transferencia:

$$\mathbf{M}_{d_j} \equiv \mathbf{M}_{d_j}(\eta_j, \lambda) = \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{2\pi\eta_j d_j}{\lambda} + \delta\right) & i \sin\left(\frac{2\pi\eta_j d_j}{\lambda} + \delta\right)/Y_j \\ iY_j \sin\left(\frac{2\pi\eta_j d_j}{\lambda} + \delta\right) & \cos\left(\frac{2\pi\eta_j d_j}{\lambda} + \delta\right) \end{pmatrix}.$$

Aquí definimos la fase δ como un parámetro aleatorio que obedece una distribución normal con media cero y desviación estándar $\sigma = \beta/2$, donde β es un valor desconocido. En los límites, cuando $\beta = \pi$ se considera incoherencia total y cuando $\beta = 0$ se recupera el caso de coherencia total donde no hay rugosidad en las capas. Si se escoge un valor para β es posible calcular la reflectancia de una estructura de multicapas una cierta cantidad de veces, obteniendo así un espectro de reflectancia diferente por cada δ aleatoria. Este conjunto de espectros es promediado obteniendo al final un espectro de reflectancia efectivo $T_{ef}(\lambda)$.

En este trabajo fabricamos espejos fotónicos con silicio poroso (p-Si), un material cuya morfología es similar al de un coral marino y presenta rugosidades en las interfaces de las capas que pueden causar la dispersión parcial de la luz [30]. Para conocer cual valor de β es más adecuado para describir la incoherencia en las capas del p-Si realizamos una evaluación donde comparamos los espectros

teóricos efectivos con diferentes valores de β con un espectro experimental de un espejo fotónico de p-Si. Encontramos que la mejor concordancia entre simulaciones y experimento se dieron cuando $\beta = 0.1$. En la figura 1.3 mostramos la comparación entre un espectro de reflectancia teórico calculado con MMT ($T(\lambda)$) y un espectro de reflectancia efectivo ($T_{ef}(\lambda)$) de un espejo fotónico donde $\Lambda(1) = 400$ nm y $\Lambda(f) = 2000$ nm.

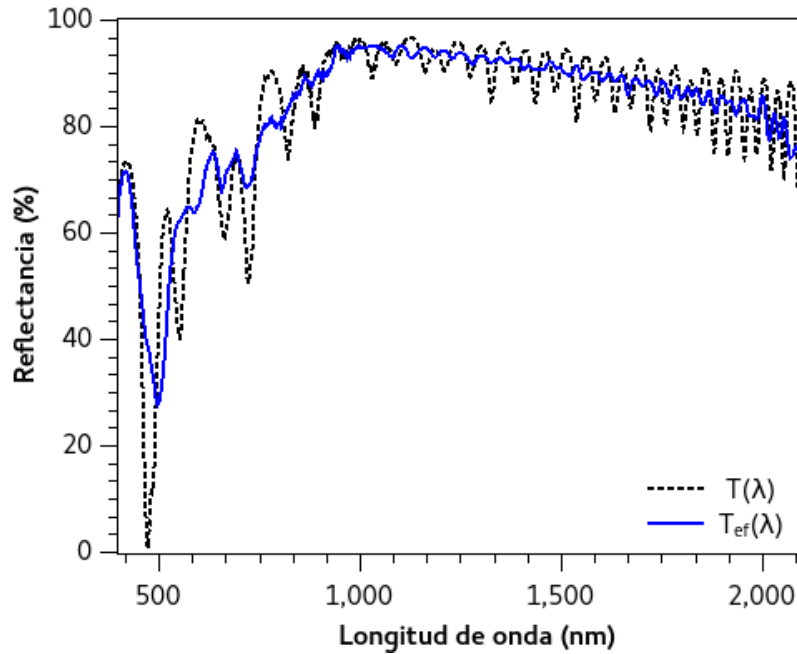


Figura 1.3: Comparación entre espectros de reflectancia: teórico $T(\lambda)$ calculado con MMT y teórico efectivo $T_{ef}(\lambda)$ de un espejo fotónico de p-Si.

En esta comparación podemos observar que el espectro de reflectancia efectivo mostrado en la figura 1.3 es más suave que el espectro teórico calculado con MMT. Así vemos que el modelo de la fase aleatoria es útil para calcular espectros teóricos efectivos donde se considera la dispersión incoherente de la luz. Sin embargo, puede ser más conveniente si se cuenta con un modelo que considere algún parámetro experimental de la estructura para así describir todavía mejor su interacción con las ondas EM. A continuación presentamos otro modelo donde incluimos mediciones de la rugosidad de las capas.

Modelo de espesores equidistantes

Implementamos adicionalmente el modelo de espesores equidistantes propuesto por K. Kang et al. [10] para calcular los espectros de reflectancia teóricos de manera más realista al considerar un parámetro experimental de la estructura. Aquí se incluyen variaciones equidistantes en el espesor de las capas y utilizando el formalismo de la MMT se calculan los espectros de reflectancia considerando cada variación promediando después sobre el número de espesores equidistantes para obtener un espectro teórico efectivo equidistante $T_{eq}(\lambda)$.

Para incorporar el método de espesores equidistantes redefinimos el espesor de cada capa de cada subespejo como:

$$d_k(n_s) = \Lambda(n_s)/4\eta_k(n_s) + \Delta,$$

donde $k = A, B$ y Δ representa la variación en el espesor debido a la rugosidad S o imperfecciones de la superficie. Una manera de determinar S es midiendo las variaciones máximas del espesor de las capas utilizando imágenes SEM transversales. Encontramos que la rugosidad de nuestras muestras de p-Si corresponde a un valor de $S = 7.6 \pm 0.1$ nm. Definimos entonces Δ como una función de la rugosidad de las capas S :

$$\Delta = S \cdot i / X_d$$

donde i toma valores desde 1 hasta X_d , el número de valores equidistantes. Para cada valor de i , calculamos un espectro de reflectancia correspondiente usando la descripción de MMT. El conjunto de X_d espectros obtenidos los promediamos sobre el número de espesores equidistantes para obtener finalmente un espectro de reflectancia efectivo equidistante $T_{eq}(\lambda)$ del espejo fotónico. Utilizamos en todos los cálculos $X_d = 5$ después de encontrar que un número mayor no cambia significativamente las simulaciones. Un ejemplo de un espectro teórico efectivo equidistante $T_{eq}(\lambda)$ se muestra en la figura 1.4 donde lo comparamos con un espectro de reflectancia teórico calculado con MMT ($T(\lambda)$), un espectro de reflectancia experimental ($E_{xp}(\lambda)$) y un espectro obtenido por el método de fase aleatoria $T_{ef}(\lambda)$. Podemos inferir que el modelo de espesores equidistantes es incluso más adecuado que el modelo de la fase aleatoria, ya que hay mayor concordancia con el espectro experimental. Utilizamos consecuentemente este modelo en todos los cálculos teóricos de reflectancia de este trabajo.

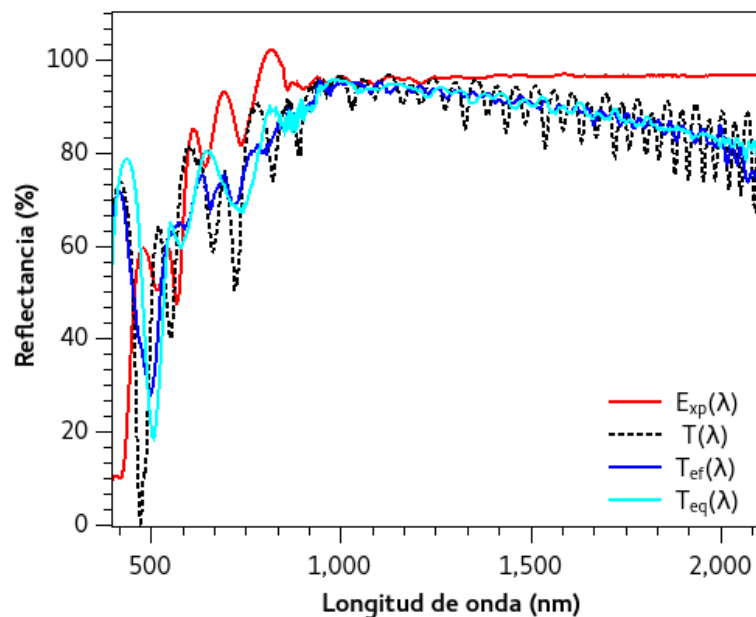


Figura 1.4: Espectros de reflectancia experimental $E_{xp}(\lambda)$, teórico $T(\lambda)$ calculado con MMT, teórico efectivo $T_{ef}(\lambda)$ y teórico efectivo equidistante T_{eq} de un espejo fotónico de p-Si.

En este capítulo describimos cómo se conforman los espejos fotónicos y presentamos los fundamentos teóricos para simular sus espectros de reflectancia. Mediante el uso del modelo de espesores equidistantes, donde se consideran las imperfecciones en las capas que constituyen las estructuras, podemos realizar cálculos más realistas de los espejos de p-Si que elaboramos en este trabajo. En el capítulo siguiente presentamos las condiciones de fabricación de las estructuras de multicapas de p-Si donde incluimos un estudio de caracterización de los índices de refracción de este material.

Capítulo 2

Espejos fotónicos de silicio poroso

Existen muchos tipos de materiales dieléctricos usados para la fabricación de estructuras fotónicas, tales como algunos semiconductores (grupos II-VI, III-V y IV), así como óxidos, polímeros y estructuras metalodieléctricas [11]. En este trabajo utilizamos el silicio, uno de los materiales dominantes en la industria de semiconductores, para producir silicio poroso (p-Si). Las propiedades ópticas de este material están directamente relacionadas a su proceso de fabricación; lo cual permite el control de dichas propiedades para la producción de estructuras fotónicas 1D.

En este capítulo se presentan las características más importantes del p-Si y los detalles de la fabricación de este material para la producción de espejos fotónicos. La necesidad de conocer las propiedades ópticas, tales como el índice de refracción, es muy importante en el proceso de diseño y fabricación de las estructuras fotónicas con p-Si. Por tal motivo, la caracterización adecuada de estas propiedades es esencial y aquí se presenta un procedimiento práctico para evaluar los índices de refracción, obtenidos por diferentes métodos, al utilizarlos para predecir la reflectancia de espejos de Bragg.

2.1. Silicio poroso

La morfología del p-Si se asemeja a la de una esponja o un coral marino, donde se observan ramificaciones desordenadas de silicio cristalino (c-Si) rodeadas de

aire. El p-Si es un material nanoestructurado donde, dependiendo de las condiciones de fabricación, es posible producir columnas desde 1 nm hasta 1 μm de diámetro con porosidades de 10 - 95 % [31]. La producción del p-Si se realiza mediante un proceso de anodizado electroquímico de c-Si utilizando comúnmente un electrolito compuesto por una solución de ácido fluorhídrico (HF) que se encarga de generar los poros en el c-Si. Las características del p-Si dependen de la densidad de corriente aplicada durante el proceso de anodizado, el tipo de sustrato de c-Si (impurificado tipo n o p, resistividad y orientación cristalográfica) y la composición del electrolito [12]. Para obleas de c-Si tipo p, al aumentar la densidad de corriente (si la concentración del electrolito es constante) la porosidad del p-Si aumenta. Por consiguiente, el espesor de la muestra de p-Si incrementa con el tiempo de ataque electroquímico.

El proceso de la formación del p-Si es complejo por lo que existe algo de incertidumbre en la comprensión de la química de la reacción. Para describir este proceso se han propuesto varios modelos, entre los cuales destaca el planteado por Lehmann y Gösele donde manifiestan que para que se realice el ataque electroquímico y la formación de poros es necesaria la presencia de huecos electrónicos. En este modelo se explica cómo al inducir un campo eléctrico, los átomos de Si de la superficie del sustrato de c-Si se oxidan permitiendo que los ataque un ion de flour (formado en el electrolito debido a la corriente aplicada), generando así los poros. Los huecos se mantienen en la punta de los poros formados debido al campo eléctrico, favoreciendo así el ataque en la dirección del crecimiento del poro. Consecuentemente, la capa formada de p-Si no será afectada si se comienza un nuevo ataque electroquímico con otras condiciones, permitiendo de esta manera la fabricación de muchas capas de diferentes porosidades. Debido a la relación directa de la porosidad con el índice de refracción del p-Si es posible la formación de multicapas con índices de refracción diferentes y así fabricar estructuras fotónicas 1D con un mismo material. Esto presenta una enorme ventaja sobre el uso de otros materiales para la producción de este tipo de estructuras, donde las capas de índices de refracción alternantes deben estar compuestas por dos materiales diferentes. En la mayoría de los casos las multicapas deben ser depositadas mediante técnicas como la deposición química de vapor, donde la razón de depósito es de 5 a 30 μm por hora y la fabricación incluso de una estructura muy sencilla puede tardar desde 2 hasta 12 horas [32]. Sin mencionar los posibles problemas de deslaminación e inestabilidad mecánica de otros materiales, el p-Si es de los más viables para la producción de estructuras fotónicas 1D. A continuación describimos el proceso experimental que hemos implementado en este trabajo para la fabricación de espejos de multicapas de p-Si.

2.1.1. Fabricación de multicapas de p-Si

El proceso para la fabricación de los espejos de p-Si comienza con la preparación de los sustratos. Aquí usamos sustratos de c-Si tipo p^+ , impurificados con Boro, con orientación (100) y una resistividad de $< 0.005 \Omega \cdot cm$. Para asegurar una adecuada conducción eléctrica durante el ataque electroquímico, depositamos mediante evaporación una película delgada de aluminio en la parte trasera de las obleas de c-Si y las horneamos a $500^\circ C$ durante 30 min en una atmósfera de nitrógeno. Después de cortar el tamaño adecuado de la muestra, esta se coloca sobre una placa de cobre, que actúa como ánodo, en una celda de teflón en donde se realiza el ataque electroquímico, como se muestra en la figura 2.1. Dentro de la celda se vierte el electrolito que está formado por etanol, HF (diluído en agua al 48%) y glicerina en una razón volumétrica de 7:3:1 (si el volumen total del electrolito es 110 ml, usamos 70 ml de etanol, 30 ml de HF y 10 ml de glicerina). El HF, como mencionamos antes, es el encargado de la generación de los poros; mientras que la función del etanol es infiltrar mejor los poros debido a que la superficie del c-Si es de carácter hidrofóbico. Adicionalmente se agrega glicerina para mejorar la uniformidad de las muestras al ayudar a disminuir la hidrofobicidad del sustrato [31].

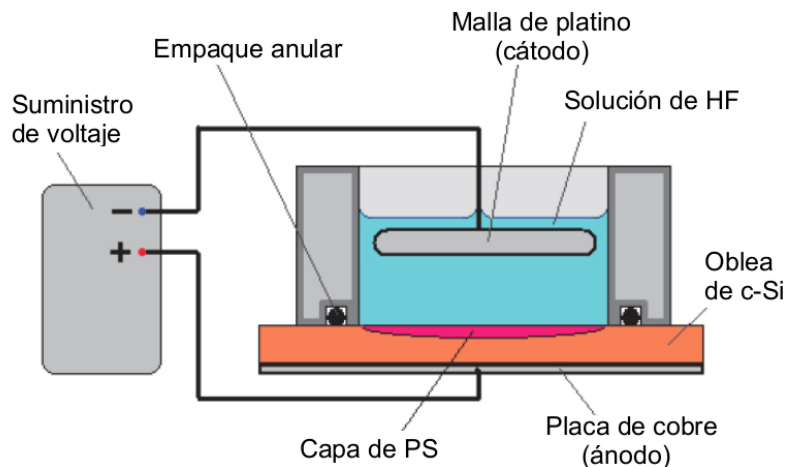


Figura 2.1: Esquema de la celda electroquímica donde se fabrica el p-Si [33].

Para comenzar con el proceso de ataque electroquímico también es necesario colocar una malla de platino que actúa como cátodo a una cierta distancia

sobre la oblea de c-Si. Entre ambos electrodos (la placa de cobre y la malla de platino) hay una diferencia de voltaje controlada que genera una densidad de corriente constante (J). Al alternar los valores de J entre 3.0 y 40.0 mA/cm^2 podemos formar capas de alta (P_a) y baja (P_b) porosidad, como las mostradas en la figura 2.2, obteniendo como consecuencia capas alternantes de índices de refracción η_a y η_b respectivamente.

Las porosidades P_i ($i = a, b$) producidas con cada una de estas corrientes pueden obtenerse mediante el método gravimétrico utilizando la siguiente relación [34]:

$$P_i = \frac{(m_1 - m_2)}{(m_1 - m_3)}. \quad (2.1)$$

Aquí se define m_1 como la masa del sustrato (c-Si) antes del ataque electroquímico, m_2 como la masa del sustrato con p-Si (después del ataque) y m_3 es la masa del sustrato después de remover la capa de p-Si. Fabricamos diferentes muestras con capas de $5\mu\text{m}$ de espesor para cada J y medimos m_1 , m_2 y m_3 con una microbalanza Sartorius (modelo MC 5) con una precisión de 0.0005 mg. Cabe mencionar que para quitar la capa porosa utilizamos una solución 3 molar de hidróxido de potasio. Los valores que obtuvimos corresponden a las porosidades $P_b = 59.4\%$ para las capas de baja porosidad y $P_a = 79.2\%$ para las de alta porosidad.

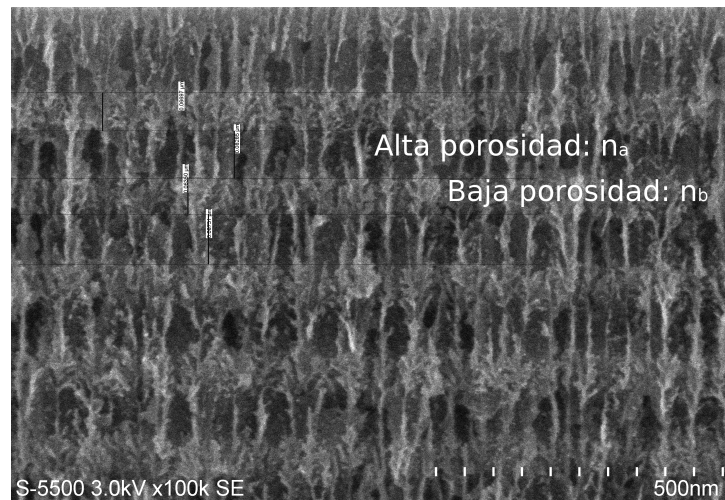


Figura 2.2: Imagen SEM de una estructura de multicapas de altas P_a y bajas porosidades P_b , con índices de refracción η_a y η_b respectivamente.

Además de la importancia de conocer las porosidades generadas al aplicar las diferentes densidades de corriente, es necesario caracterizar el espesor de las capas formadas de p-Si. Para esto tomamos micrografías con un microscopio electrónico de barrido SEM (Hitachi S5500) de la sección transversal de monocapas de p-Si de alta y baja porosidad y medimos sus respectivos espesores. Los resultados muestran un espesor promedio de $5.11\mu m$ para las capas de baja porosidad y $5.08\mu m$ para las capas de alta porosidad. Utilizando estos valores (y conociendo el tiempo de ataque t) pudimos calcular la velocidad de ataque electroquímico para la fabricación de las muestras, donde $v = d/t$ y obtuvimos las velocidades $v_a = 14.5\text{ nm/s}$ y $v_b = 1.72\text{ nm/s}$ para las capas de alta y baja porosidad respectivamente. Con estos valores podemos calcular el tiempo necesario que debe aplicarse la densidad de corriente correspondiente para obtener el espesor requerido de cada capa de p-Si. Adicionalmente, debido a que la concentración del HF disminuye con el tiempo y la profundidad de la muestra de p-Si [31], implementamos pausas de 1 segundo al tiempo de ataque para permitir que la concentración del electrolito se restaure. De esta manera, logramos minimizar el gradiente de porosidad que se genera en el p-Si obteniendo mayor uniformidad en las capas.

Una vez conocidas todas las condiciones experimentales descritas anteriormente sólo nos queda determinar los valores de los índices de refracción que tienen las capas de alta y baja porosidad. Entre algunas de las técnicas que se utilizan comúnmente para encontrar estos valores se destacan la elipsometría espectroscópica o las aproximaciones de medio efectivo. Mediante el uso de cada método hay diferencias significativas en los valores obtenidos de los índices de refracción. Debido a que nuestro objetivo es diseñar y fabricar espejos fotónicos optimizados la necesidad de obtener valores precisos de los índices de refracción es de gran importancia. En este trabajo proponemos un método para evaluar los diferentes índices de refracción mediante parámetros cuantitativos, el cual se presenta en la siguiente sección.

2.2. Caracterización del índice de refracción

La importancia de determinar con precisión el índice de refracción $\eta(\lambda)$ de los materiales usados para la fabricación de estructuras fotónicas trasciende directamente en la calidad de los dispositivos y en el control eficiente de la propagación de la luz. En muchos trabajos el uso de valores constantes de los índices de refracción es muy común, donde la dependencia con la longitud de onda no es

considerada; mientras que en otros casos es usual la propuesta de valores arbitrarios para ajustar el comportamiento experimental [35, 36]. Sin embargo, hay muchos ejemplos donde el uso de este tipo de enfoques son difíciles de reproducir o se presentan diferencias significativas entre experimentos y teoría que requieren de explicaciones más profundas [37–39]. Debido a que el índice de refracción es una función compleja de la longitud de onda, $\eta(\lambda) = n(\lambda) - ik(\lambda)$, es necesario hacer uso de métodos que permitan medir el coeficiente de extinción k que se relaciona directamente con el coeficiente de absorción del material. Tradicionalmente se realizan mediciones de las líneas de interferencia en los espectros de reflectancia (R) y transmitancia (T) de una capa delgada para la obtención de la parte real de $\eta(\lambda)$. Sin embargo, esta metodología presenta ciertas restricciones cuando el material tiene una alta absorción óptica o cuando hay efectos de dispersión considerables [40]. Una alternativa al método mencionado es la elipsometría espectroscópica (SE), que adicionalmente a la obtención del índice de refracción complejo permite analizar la anisotropía del material. En este trabajo realizamos mediciones elipsométricas para determinar $\eta(\lambda)$ de las capas de alta y baja porosidad de p-Si; a continuación se describen los detalles de estas mediciones. Más adelante se presentan los métodos de medio efectivo que utilizamos para calcular valores de $\eta(\lambda)$ más precisos que los obtenidos con SE y la metodología para evaluarlos cuantitativamente.

2.2.1. Elipsometría espectroscópica de p-Si

La elipsometría es una técnica de caracterización óptica basada en la medición de la transformación de la polarización (ρ) que ocurre después de la reflexión de un haz polarizado sobre una muestra. Los ángulos elipsométricos ψ y Δ_S son parámetros propios de la SE y relacionan los coeficientes de reflexión complejos (r_p y r_s) con la polarización mediante la ecuación fundamental de la elipsometría [17]: $\rho = \tan \psi e^{i\Delta_S}$. Los parámetros elipsométricos son ajustados a un modelo óptico teórico que considera las características propias del material y a partir de este se obtiene el índice de refracción complejo [41].

En este trabajo fabricamos dos muestras de p-Si de cada porosidad (P_a y P_b) con un espesor de 500 nm para las mediciones elipsométricas realizadas en un elipsómetro α -SE, J.A. Woollam Co. Para fines estadísticos realizamos tres mediciones diferentes en cada muestra de manera que obtuvimos 6 mediciones elipsométricas para cada porosidad. En el modelo óptico definimos al p-Si como un medio efectivo de Bruggeman (EMA) compuesto por Si y aire. El análisis de los datos fue realizado en el software Complete EASE [42] donde se variaron los

parámetros de espesor y porosidad de tal manera que el ajuste entre los datos experimentales y teóricos del modelo óptico coincidieran en la mayor medida posible presentando un error cuadrático medio (MSE) mínimo.

La morfología del p-Si es complicada y varía con la porosidad como claramente puede apreciarse en la figura 2.2. La estructura de las capas P_b se asemeja a ramas entrelazadas de Si, mientras que las capas de P_a tienen formaciones similares a la de los corales marinos presentando percolación. Debido a las diferencias en la morfología del p-Si son necesarios modelos distintos para describirlos, tales como modelos isotrópicos, anisotrópicos o de porosidad gradual, entre otros. Aquí probamos las tres anteriores posibilidades para las capas de P_b y encontramos los menores valores de MSE utilizando un modelo de porosidad gradual. Para las capas de P_a similares a corales marinos, utilizamos un modelo anisotrópico. Estos dos modelos han sido típicamente usados para describir las propiedades ópticas de p-Si mediante SE [17, 41] y aquí utilizamos los modelos de la siguiente manera:

a) Para las capas de baja porosidad modelamos un gradiente de porosidad dependiente de la profundidad al considerar 10 subcapas con un cambio gradual en la porosidad. La capa graduada se encuentra sobre otra capa de porosidad más baja y esta sobre un sustrato de c-Si como se muestra en una representación sinóptica en la figura 2.3a. El espesor obtenido del ajuste SE fue de 493 nm en promedio, mientras que el medido de imágenes SEM fue de 511 nm. Los valores de MSE obtenidos al ajustar el modelo teórico a las mediciones experimentales alcanzaron valores entre 35 y 40.

b) El modelo de porosidad gradual no es apropiado para las capas de mayor porosidad ya que la morfología del p-Si deja de ser isotrópica cambiando a columnas delgadas de Si donde se genera una dependencia direccional del índice de refracción complejo [41]. Debido a esto ahora utilizamos un modelo anisotrópico uniaxial para las capas con estas características. En la figura 2.3.b se muestra el modelo que utilizamos, donde encima de la capa anisotrópica uniaxial incluimos una capa delgada de baja porosidad para tomar en cuenta la capa de óxido de silicio que se forma en la superficie del p-Si. Al considerar un material anisotrópico, como en el caso del modelo usado para las capas de alta porosidad, del software se obtienen dos índices de refracción, el ordinario n_{ord-SE} y el extraordinario n_{ext-SE} . El promedio de estos valores representa un índice de refracción efectivo para cualquier polarización n_{ef-SE} . En este trabajo, debido a que consideramos únicamente la incidencia normal en las estructuras fotónicas, utilizamos el índice de refracción ordinario sin tomar en cuenta la contribución de n_{ext-SE} . Del software obtuvimos espesores ajustados de 407 nm en promedio, que en comparación

con las mediciones de imágenes SEM de 507 nm, presentan grandes diferencias.

El proceso de ajuste con este modelo no parece ser adecuado para las capas de P_a ya que se obtuvieron valores de MSE entre 88 y 100, a pesar de considerar una corrección debido a la depolarización que surge del porcentaje de la luz que no es polarizada debido a inhomogeneidades en la muestra como la rugosidad. En la figura 2.4 mostramos un espectro de depolarización representativo considerado en el modelo óptico. Surge entonces la necesidad de utilizar un modelo diferente para la obtención de los índices de refracción de p-Si de alta porosidad.

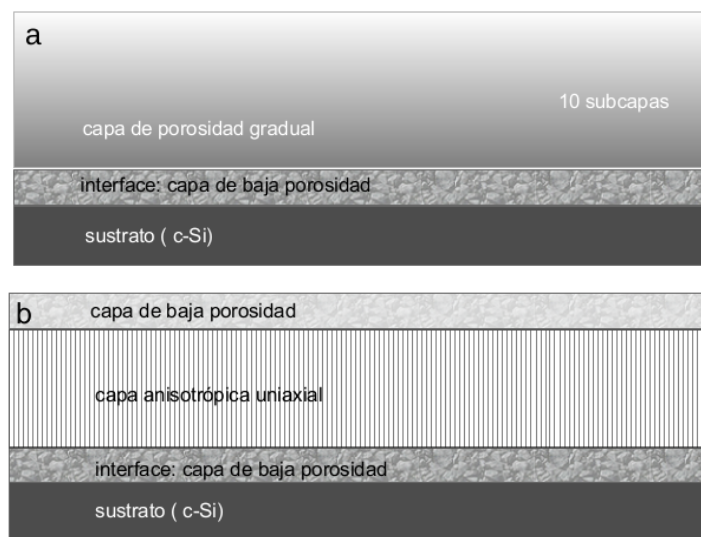


Figura 2.3: Representación sinóptica del modelo óptico de p-Si de a) baja porosidad con un modelo de porosidad gradual y b) de alta porosidad con un modelo anisotrópico uniaxial.

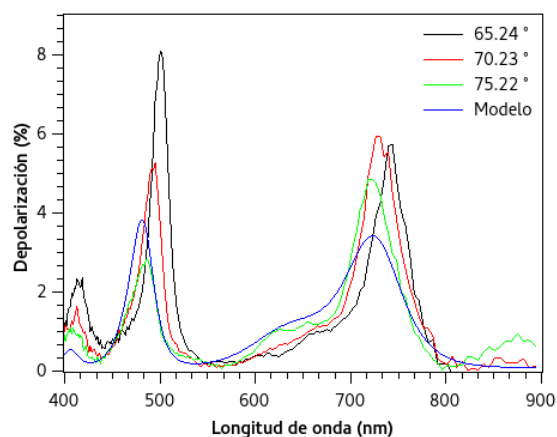


Figura 2.4: Espectro de depolarización representativo de una monocapa de alta porosidad de p-Si.

En la figura 2.5 se muestran dos comparaciones representativas entre los ángulos elipsométricos medidos de las monocapas de p-Si de alta y baja porosidad con los respectivos modelos ópticos. Los índices de refracción de las capas de p-Si se adquieren de los espectros de ψ y Δ_s y al calcular el promedio de todas las mediciones de las muestras de cada porosidad obtuvimos los índices de refracción presentados en la figura 2.6 e indicados como SE.

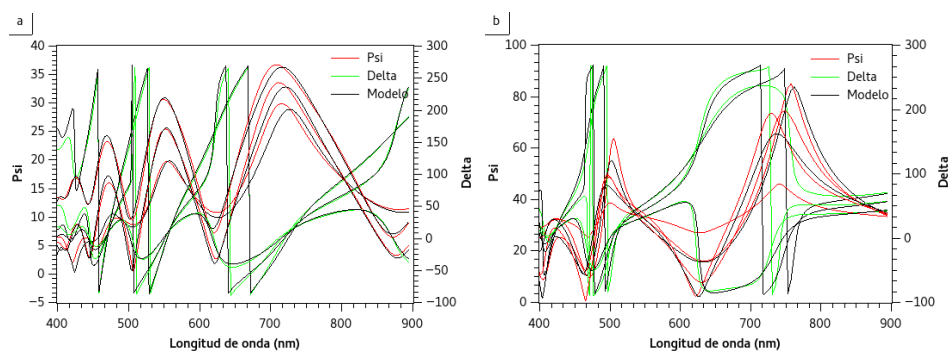


Figura 2.5: Ejemplo de la comparación entre los ángulos elipsométricos ψ y Δ_s de una muestra de p-Si de a) baja porosidad y b) de alta porosidad.

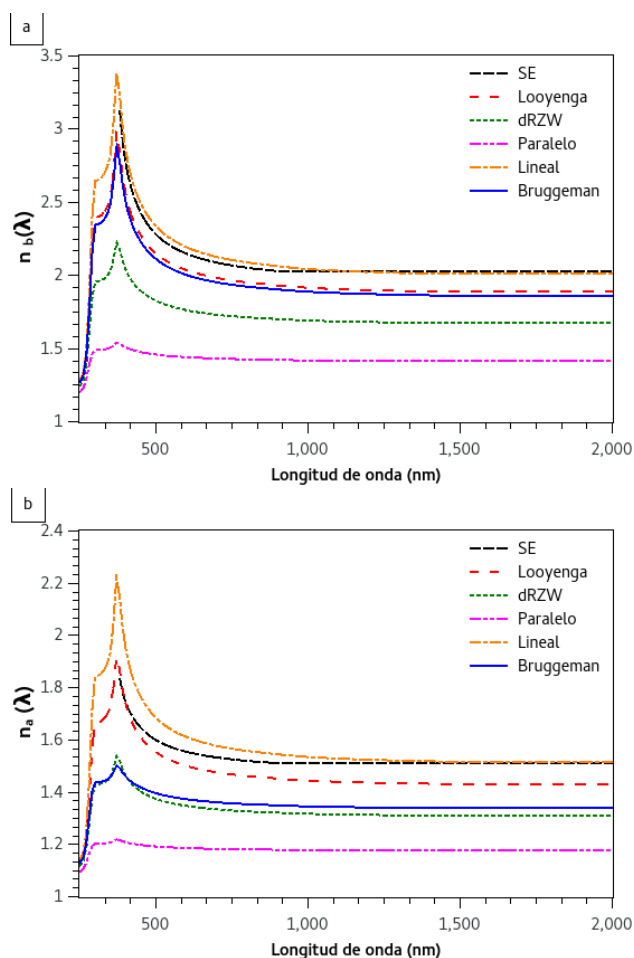


Figura 2.6: Espectros del índice de refracción de p-Si obtenidos por SE, y los diferentes métodos de medio efectivo: Looyenga, la formula dRZW, las interpolaciones paralela y lineal y la aproximación de Bruggeman para a) capas de baja porosidad P_b , y b) capas de alta porosidad P_a .

Nuestro interés para el proceso de la fabricación de espejos fotónicos con p-Si es encontrar los valores precisos de los índices de refracción del p-Si de manera que logremos producir espejos de alta calidad. Demostramos más adelante, en la sección 2.2.3, que los índices de refracción que obtuvimos por SE no son adecuados para este objetivo. Sin embargo, además de la técnica de SE también es posible aproximar los valores de los índices de refracción mediante métodos de medio efectivo y en este trabajo buscamos la manera de comparar el

desempeño de los diferentes valores que pueden obtenerse. A continuación presentamos los distintos modelos de medio efectivo que empleamos y los criterios que desarrollamos para la evaluación de los índices de refracción obtenidos.

2.2.2. Modelos de medio efectivo para p-Si

La morfología del p-Si cambia en función de la porosidad y cuando el tamaño de los poros es mucho más pequeño que la longitud de onda de la luz, es posible describir al p-Si como un medio efectivo donde las propiedades ópticas dependen de la fracción volumétrica del Si y la del medio que llena los poros (aire). Para aproximar este comportamiento es posible utilizar diferentes métodos de medio efectivo (EMA). Sin embargo, como no tenemos suficiente información sobre la interacción entre el p-Si con la luz para distinguir cual método es más apropiado, en este trabajo evaluamos los diferentes modelos mediante la fabricación de espejos de Bragg y proponemos una medida cuantitativa para determinar cual EMA es más adecuada para la determinación de los índices de refracción del p-Si.

Los diversos EMAs han sido desarrollados para obtener soluciones teóricas de la función dieléctrica ϵ_r que está relacionada al índice de refracción como $\epsilon_r \sim n_{eff}^2$ cuando se considera baja absorción. Entre algunas EMAs que han sido expresadas en términos de n_{eff} se destacan los de Maxwell-Garnett y Looyenga [43, 44], la fórmula de del Río et al. [45], Bruggeman [46] y las interpolaciones lineal [44] o paralelas [46]. La interpolación lineal se calcula utilizando la porosidad P que indica la fracción de volumen del aire en el Si como:

$$n_{eff}(\lambda) = Pn_{air}(\lambda) + (1 - P)n_{Si}(\lambda), \quad (2.2)$$

donde n_{Si} es el índice de refracción del Si y n_{air} del aire. Por otro lado, la interpolación paralela se obtiene al calcular:

$$\frac{1}{n_{eff}(\lambda)} = \frac{P}{n_{air}(\lambda)} + \frac{1 - P}{n_{Si}(\lambda)}. \quad (2.3)$$

Para porosidades altas es recomendable utilizar el modelo de Looyenga definido como:

$$n_{eff}^{2/3}(\lambda) = (1 - P)n_{Si}^{2/3}(\lambda) + Pn_{air}^{2/3}(\lambda). \quad (2.4)$$

El modelo de Maxwell-Garnett considera partículas esféricas no interactuantes, por lo que la percolación del p-Si no es contemplada en este modelo de manera que no es relevante utilizarlo para la obtención del índice de refracción de este material [44, 47]. Una alternativa es la fórmula propuesta por del Río et al.

(dRZW) que está basada en el teorema de reciprocidad de Keller para la conductividad efectiva de un material compuesto. Aquí no se considera ninguna forma o geometría particular de inclusión, por lo que puede ser aplicada a materiales con una microestructura arbitraria como el p-Si. Nosotros utilizamos esta fórmula para aproximar el índice de refracción efectivo en la forma:

$$n_{eff}(\lambda) = n_{Si}(\lambda) \frac{1 + P \left(\sqrt{\frac{n_{air}(\lambda)}{n_{Si}(\lambda)}} - 1 \right)}{1 + P \left(\sqrt{\frac{n_{Si}(\lambda)}{n_{air}(\lambda)}} - 1 \right)}. \quad (2.5)$$

Una de las EMAs más utilizadas para la determinación de materiales compuestos como el p-i es la aproximación de Bruggeman [46, 48]. La fórmula simétrica de Bruggeman es aplicable a cualquier porosidad porque considera inclusiones esféricas de diferentes tamaños inmersas en un medio continuo:

$$P \frac{n_{air}^2(\lambda) - n_{eff}^2(\lambda)}{n_{air}^2(\lambda) + 2n_{eff}^2(\lambda)} + (1 - P) \frac{n_{Si}^2(\lambda) - n_{eff}^2(\lambda)}{n_{Si}^2(\lambda) + 2n_{eff}^2(\lambda)} = 0. \quad (2.6)$$

Hasta ahora hemos presentado algunas fórmulas de EMAs para la obtención del índice de refracción real. Sin embargo, sabemos que el índice de refracción es complejo y está relacionado al coeficiente de extinción como $\eta(\lambda) = n(\lambda) - ik(\lambda)$. Una aproximación útil para determinar $k(\lambda)$ del p-Si es la fórmula de Bruggeman antisimétrica [46]:

$$\frac{k^2(\lambda)}{k_{Si}^2(\lambda)} - \frac{k_{air}^2(\lambda)}{k_{Si}^2(\lambda)} = (1 - P) \left[\left(1 - \frac{k_{air}^2(\lambda)}{k_{Si}^2(\lambda)} \right) \left(\frac{k^2(\lambda)}{k_{Si}^2(\lambda)} \right)^{\frac{1}{3}} \right]. \quad (2.7)$$

En este trabajo calculamos los índices de refracción $n_a(\lambda)$ y $n_b(\lambda)$ para las capas de alta y baja porosidad del p-Si utilizando las siguientes EMAs: el modelo de Looyenga, la fórmula de dRZW, las interpolaciones lineal y paralela y el modelo de Bruggeman simétrico, ver figura 2.6. Mediante la fórmula 2.7 de Bruggeman antisimétrico calculamos el coeficiente de extinción para obtener valores de los índices de refracción complejos. Los valores para $n(\lambda)$ y $k(\lambda)$ del Si (no dopado) y aire se tomaron de la literatura [49, 50]. Cabe notar que $n(\lambda)$ tiene una pequeña dependencia tanto de la temperatura como del dopaje del Si, pero no la consideramos en este trabajo.

Como nuestro principal objetivo es la fabricación de espejos fotónicos 1D de alta calidad, además de la obtención de valores precisos de los índices de refracción, también es necesario un contraste alto entre los índices de refracción

$n_a(\lambda)/n_b(\lambda)$ de las capas. Al asegurar una razón $n_a(\lambda)/n_b(\lambda)$ pequeña se genera el potencial periódico que es indispensable para crear la brecha fotónica del espejo [51, 52]. Sabemos de nuestra experiencia experimental que las condiciones de las capas de P_a y P_b del p-Si presentan un alto contraste de índices de refracción ya que hemos fabricado diferentes estructuras fotónicas [15, 27, 52]. Debido a que obtuvimos diferentes valores de índices de refracción nos interesa conocer su contraste como una manera de verificar que estos reproducen las condiciones experimentales. Entonces, calculamos la razón $n_a(\lambda)/n_b(\lambda)$ para todos los índices de refracción y los comparamos en la figura 2.7. Aquí se destacan los índices de Looyenga y de Bruggeman que presentan la razón de índices más baja, indicando que el contraste de índices es suficientemente grande para reproducir la calidad fotónica que hemos observado en reportes anteriores.

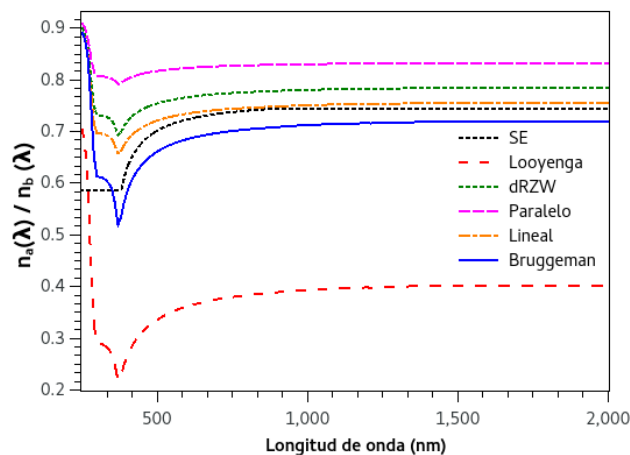


Figura 2.7: Razón de índices de refracción ($n_a(\lambda)/n_b(\lambda)$) de p-Si obtenidos por SE, Looyenga, la formula dRZW, las interpolaciones paralela y lineal y la aproximación de Bruggeman

La comparación entre los valores de $n_a(\lambda)$ y $n_b(\lambda)$ calculados con los diversos EMAs y los obtenidos de SE es mostrada en la figura 2.6. Se distinguen diferencias significativas entre las metodologías utilizadas por lo que requerimos de un procedimiento para evaluar cuales valores son los más adecuados para su utilización en la fabricación de espejos de p-Si. Este procedimiento será descrito en la siguiente sección.

2.2.3. El factor Q_e

Cuando conocemos los valores de $n_a(\lambda)$ y $n_b(\lambda)$ del p-Si, y los demás parámetros experimentales están adecuadamente caracterizados, es posible fabricar espejos de Bragg cuyos espectros de reflectancia experimentales estén centrados en la longitud de onda Λ para la cual fueron diseñados, coincidiendo en la mayor medida posible con su espectro de reflectancia teórico. De esta manera, si hay pocas diferencias entre los espectros teóricos y experimentales, es posible determinar la precisión de los valores de $n(\lambda)$ mediante una medida cuantitativa que evalúa la calidad de las estructuras fotónicas fabricadas. En este trabajo proponemos una métrica inspirada en el factor de calidad fotónico, donde buscamos validar la confianza de todos los índices de refracción obtenidos mediante los diferentes métodos. Definimos a esta métrica como el factor Q_e de la siguiente manera:

$$Q_e = \frac{|\Lambda_T - \Lambda_E|}{a_T}. \quad (2.8)$$

Aquí Λ_T es la longitud de onda central teórica, Λ_E es la experimental y a_T es la media del ancho de banda teórico a 50 % de reflectancia. Mientras más pequeño sea el factor- Q_e para un espejo de Bragg, se tiene mayor confianza en los valores de los índices de refracción. De esta manera, estamos proponiendo un parámetro cuantitativo para evaluar el desempeño de los índices de refracción de p-Si utilizando estructuras fotónicas reflectivas.

Para evaluar la validez de la aplicación de los diferentes índices de refracción obtenidos por SE y los modelos de EMAs fabricamos diferentes espejos de Bragg y comparamos sus espectros de reflectancia experimentales y teóricos. Diseñamos conjuntos de tres espejos fotónicos centrados en $\Lambda_T = 600, 800$ y 1000 nm, formados por 15 bicapas con los diferentes $n_a(\Lambda_T)$ y $n_b(\Lambda_T)$. El espesor de las capas satisface la condición del cuarto de longitud de onda $d_i = \Lambda_T/4n_i$ de tal manera que cada espejo de Bragg diseñado con los correspondientes índices de refracción (de los diferentes métodos) tienen capas de espesores diferentes. Sin embargo, debido a que las porosidades fabricadas P_a y P_b son la misma para todos los espejos, sus espectros de reflectancia experimentales no serán iguales, a pesar de ser diseñados para reflejar alrededor de la misma Λ_T . Si medimos las diferencias que presentan estos espectros experimentales con sus espectros teóricos respectivos mediante el factor- Q_e podemos encontrar cuales índices de refracción coinciden mejor con los valores experimentales de las capas P_a y P_b . A continuación se presentan los espectros de reflectancia experimentales y teóricos, así como los valores del factor- Q_e obtenidos para cada espejo fabricado con

índices de refracción diferentes.

Resultados y análisis

Con el objetivo de evaluar la exactitud de los índices de refracción obtenidos fabricamos conjuntos de tres espejos de Bragg centrados en $\Lambda_T = 600, 800$ y 1000 nm con los diferentes $n_a(\Lambda_T)$ y $n_b(\Lambda_T)$. Simulamos los espectros de reflectancia teóricos mediante el método de matriz de transferencia descrito en la sección 1.2 del capítulo anterior y los comparamos con los espectros experimentales medidos con un espectrofotómetro UV-Vis-IR (Shimadzu UV1601). De manera general, la reflectancia se reporta como un valor porcentual, en donde el 100 % corresponde al máximo de reflexión de un espejo estándar de aluminio adecuado para el equipo que se utiliza para calibrar el espectrofotómetro. Es decir, los valores de reflectancia obtenidos están referidos al espectro del espejo de aluminio ($Al(\lambda)$), de manera que medimos una reflectancia relativa. Los espejos de p-Si que nosotros fabricamos son en algunas regiones del espectro más reflectivos que el espejo de referencia tal que observamos valores que sobrepasan el 100 %. Para evitar esto normalizamos los espectros experimentales ($T_E(\lambda)$) calculando $T_E(\lambda) \cdot Al(\lambda) / 100$. Cabe mencionar que esta normalización es utilizada en todos los espectros experimentales que presentamos en este trabajo. Adicionalmente, para los espejos de Bragg que fabricamos aquí, adimensionalizamos los espectros de reflectancia al presentarlos en función de Λ_E / Λ_T . Así, donde $\Lambda_E / \Lambda_T = 1$ se encuentra el máximo de reflectancia teórico y podemos observar más claramente si hay diferencias con los espectros experimentales.

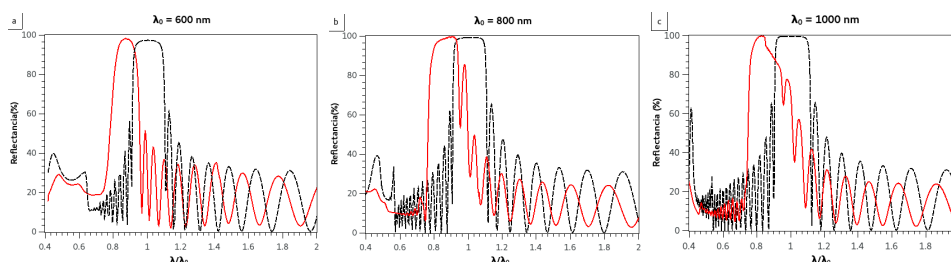


Figura 2.8: Espectros de reflectancia teóricos (línea negra punteada) y experimentales (línea roja continua) de los espejos de Bragg fabricados con los índices de refracción obtenidos por SE centrados en a) $\Lambda_T = 600$ nm, b) 800 nm y c) 1000 nm.

Primero fabricamos el conjunto de los tres espejos utilizando los valores obtenidos de las mediciones de SE y comparamos los espectros experimentales

con sus correspondientes espectros teóricos en la figura 2.8. En todos estos espectros se observa un corrimiento hacia longitudes de onda cortas lo cual sugiere que los índices de refracción obtenidos por SE no son adecuados. Los valores del factor Q_e de todos los espejos están mostrados en las tablas 2.1-2.3 donde podemos confirmar la insuficiencia de las mediciones de SE al observar sus valores del factor $-Q_e$ que son grandes en comparación con los demás. Las diferencias entre teoría y experimento en estos espejos pueden entenderse como el resultados de la complejidad de modelar las nanoestructuras de p-Si y ajustar de manera exacta los datos elipsométricos para estimar los índices de refracción. A pesar de que la técnica de SE se ha utilizado para una gran variedad de estructuras de p-Si e incluso hay reportes basados en los modelos que utilizamos en este trabajo con buenas coincidencias [41]; en este trabajo no obtuvimos los resultados esperados. Desde nuestro punto de vista, se requiere de un mayor análisis para comprender las razones por las cuales no pudimos encontrar coincidencia en los espejos de Bragg preparados con los índices de refracción de SE.

Métodos:	Λ_E (nm)	a_T (nm)	factor- Q_e
SE	521.8	114.7	0.6831
Looyenga	593.1	110.0	0.0624
dRZW	656.6	104.7	0.5404
Bruggeman	593.6	137.1	0.0466

Tabla 2.1: El factor- Q_e calculado para los espejos de Bragg centrados en $\Lambda_T = 600$ nm fabricados con los índices de refracción obtenidos por SE y los diferentes EMAs.

Métodos:	Λ_E (nm)	a_T (nm)	factor- Q_e
SE	705.7	159.0	0.5928
Looyenga	785.2	157.0	0.0943
dRZW	905.0	143.7	0.7305
Bruggeman	797.7	186.2	0.0124

Tabla 2.2: El factor- Q_e calculado para los espejos de Bragg centrados en $\Lambda_T = 800$ nm fabricados con los índices de refracción obtenidos por SE y los diferentes EMAs.

Métodos:	Λ_E (nm)	a_T (nm)	factor- Q_e
SE	880.3	215.2	0.5564
Looyenga	933.1	183.4	0.3647
dRZW	1127.0	180.9	0.7038
Bruggeman	1028.1	231.0	0.1216

Tabla 2.3: El factor- Q_e calculado para los espejos de Bragg centrados en $\Lambda_T = 1000$ nm fabricados con los índices de refracción obtenidos por SE y los diferentes EMAs.

El corrimiento hacia el azul de los espectros de reflectancia experimentales en la figura 2.8 sugieren que los valores de los índices de refracción deben ser menores para desplazar los espectros a longitudes de onda más largas y coincidir con su equivalente teórico. Por lo tanto escogemos los índices de refracción de Looyenga, de la fórmula dRZW y la aproximación de Bruggeman para fabricar otros conjuntos de espejos de Bragg. En las figuras 2.9-2.11 mostramos la comparación entre los espectros de reflectancia teóricos y experimentales de cada espejo que fueron diseñados utilizando los mencionados índices de refracción.

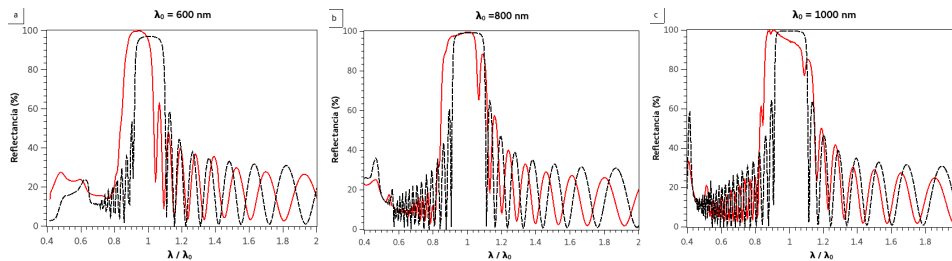


Figura 2.9: Espectros de reflectancia teóricos (línea negra punteada) y experimentales (línea roja continua) de los espejos de Bragg fabricados con los índices de refracción obtenidos por la fórmula de Looyenga centrados en a) $\Lambda_T = 600$ nm, b) 800 nm y c) 1000 nm.

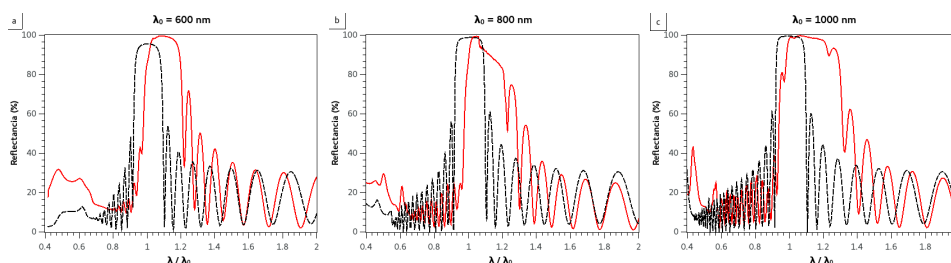


Figura 2.10: Espectros de reflectancia teóricos (línea negra punteada) y experimentales (línea roja continua) de los espejos de Bragg fabricados con los índices de refracción obtenidos por la fórmula de dRZW centrados en a) $\Lambda_T = 600$ nm, b) 800 nm y c) 1000 nm.

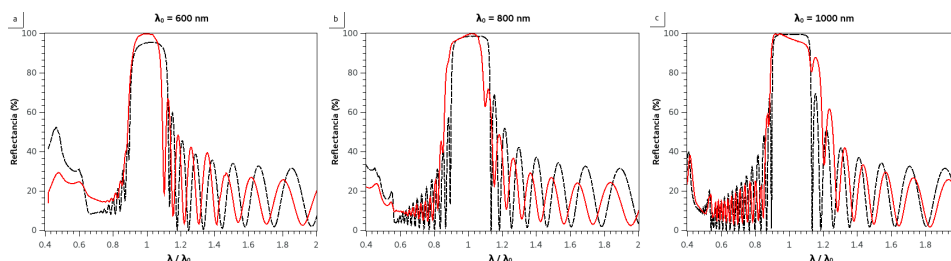


Figura 2.11: Espectros de reflectancia teóricos (línea negra punteada) y experimentales (línea roja continua) de los espejos de Bragg fabricados con los índices de refracción obtenidos de la aproximación de Bruggeman centrados en a) $\Lambda_T = 600$ nm, b) 800 nm y c) 1000 nm.

El mejor ajuste entre experimento y teoría corresponde a los espejos fabricados con los índices de refracción de Bruggeman. De los valores del factor Q_e para los espejos de Bruggeman podemos concluir que los índices de refracción obtenidos por este EMA son los más adecuados para la fabricación de espejos de Bragg de p-Si. La coincidencia cualitativa (observada en las figuras 2.11) y cuantitativa (factor- Q_e) de los índices de Bruggeman es claramente mejor que la obtenida de las otras fórmulas. Con este análisis mostramos que la aproximación de Bruggeman representa mejor las propiedades efectivas de las multicapas de p-Si, ya que considera inclusiones esféricas o cilíndricas promediadas sobre las morfologías que pueden observarse en el p-Si.

Las diferencias obtenidas del método de Looyenga vienen de la naturaleza empírica de la fórmula y en cuanto a la ineficiencia del modelo de dRZW

podría ser causada por la consideración de todas las posibles configuraciones estructurales y su promedio estadístico. Esto representa una ventaja cuando la estructura es aleatoria, pero aparenta una desventaja de otra manera.

2.2.4. Espejo de banda ancha

En algunas aplicaciones, como en dispositivos de concentración solar [3] por ejemplo, se requieren espejos selectivos de banda ancha. Este tipo de reflectores se construyen a partir de un conjunto de subespejos de manera que sus bandas fotónicas se superpongan cubriendo todo el rango de longitudes de onda que se busca reflejar. Sin embargo, encontrar la configuración y propiedades óptimas de capas para formar dicha estructura no es sencillo. Una manera para asegurar un cubrimiento completo del rango deseado es mediante la fabricación de un gran número de subespejos. Mediante el método de distribución de longitudes de onda de Padé descrito en [15] es posible encontrar las longitudes de onda centrales de cada subespejo y así obtener una configuración de capas para formar el espejo de banda ancha. Aquí hemos fabricado un espejo Vis-NIR hecho de p-Si y definimos su rango de longitudes de onda de $\Lambda(1) = 400$ nm a $\Lambda(f) = 2000$ nm. El espejo está formado por 20 subespejos de 5 periodos cada uno utilizando los índices de refracción de Bruggeman y las mismas condiciones de fabricación del p-Si descritas arriba. Escogimos el parámetro $n_i = 10$ y encontramos $\Lambda(n_i) = 1466$ como en [15].

Presentamos los espectros experimentales y teóricos en la figura 2.12 donde observamos un buen ajuste en el rango de longitudes de onda del espejo, a pesar de presentar pequeñas diferencias a longitudes de onda abajo de 600 nm debido a la absorción del p-Si en el rango visible. Encontramos también que la banda fotónica presenta un ensanchamiento hacia longitudes de onda largas, probablemente debido a un gradiente de porosidad en la estructura de multicapas. Hemos encontrado este problema en reportes recientes [15] y requiere de mayor investigación, sin embargo, esta problemática no será abordada en este trabajo.

En un espejo de banda ancha la concordancia entre experimento y teoría no puede ser medida utilizando el criterio del factor- Q_e . Necesitamos otra manera de evaluar las diferencias entre los espectros y una medida que hemos propuesto

antes [15] está basada en una función de mérito dada por:

$$N = \sqrt{\frac{\int_{\Lambda(1)}^{\Lambda(f)} (S(\lambda) - E(\lambda))^2 d\lambda}{\left(\int_{\Lambda(1)}^{\Lambda(f)} S(\lambda) d\lambda\right)^2}}, \quad (2.9)$$

donde $S(\lambda)$ y $E(\lambda)$ son los espectros de reflectancia simulados y experimentales respectivamente. Aquí N debe ser pequeño para que coincidan ambos espectros. Calculamos la función de mérito para el espejo de banda ancha fabricado con los índices de Bruggeman obteniendo un valor de $N = 0.0047$ indicando que hay buena coincidencia entre experimento y teoría. De esta manera podemos asegurar que los índices de Bruggeman también funcionan para el diseño y fabricación de estructuras fotónicas más complicadas como los espejos de banda ancha.

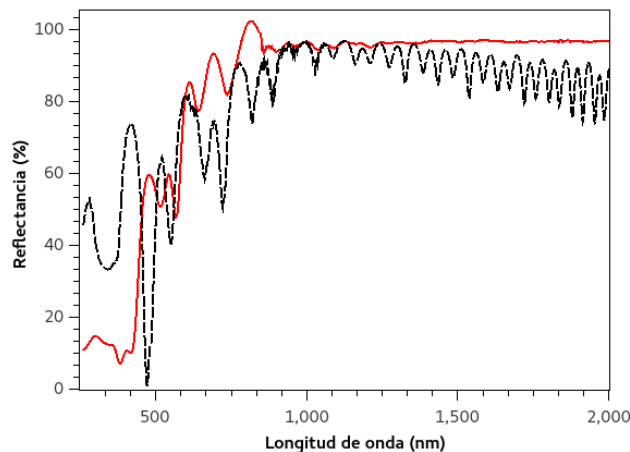


Figura 2.12: Espectros de reflectancia teóricos (línea negra punteada) y experimentales (línea roja continua) del espejo de banda ancha fabricado con los índices de refracción de Bruggeman.

En este capítulo hemos descrito todas las propiedades del p-Si necesarias para la fabricación de estructuras fotónicas reflectivas 1D de alta calidad. Propusimos parámetros cuantitativos para evaluar los aspectos experimentales y teóricos de espejos fotónicos y a continuación presentamos una metodología para optimizar su diseño mediante un proceso de optimización estocástica.

Capítulo 3

Optimización estocástica de espejos fotónicos

El diseño óptimo para producir espejos fotónicos de alta calidad es complicado debido a la diversidad de posibles arreglos periódicos y la configuración correcta de capas que cada espejo diferente necesita. Cuando se busca diseñar espejos con una brecha fotónica amplia, por ejemplo para aplicaciones de concentración solar, es necesaria la superposición de varios espejos de Bragg. Sin embargo, no es sencillo escoger la configuración óptima de los espejos de Bragg tal que se superpongan adecuadamente para cubrir todo el rango de longitudes de onda deseado. En la literatura se encuentran diversas maneras de diseñar este tipo de estructuras, pero muchas incluyen métodos complicados o poco prácticos. Algunos procedimientos se basan en arreglos compuestos por estructuras escalonadas donde los espesores de las capas varían de acuerdo a una progresión aritmética o geométrica [4, 5]. Sin embargo, la dependencia entre el ancho de la banda fotónica y los parámetros estructurales, como el número de capas o la cantidad de subespejos, son difíciles de analizar llevando a complicaciones para un diseño práctico. Otros métodos [6–8] consideran un perfil de incremento gradual de espesores de las capas modulado por una función exponencial donde comúnmente se utilizan parámetros estructurales predeterminados además de una dependencia de las funciones que describen el incremento de espesores con parámetros experimentales limitando así la versatilidad de los métodos.

En este capítulo presentamos un procedimiento práctico para diseñar estructuras fotónicas reflectivas que puede ser aplicado para diferentes materiales dieléctricos y, además, puede ser modificado para diseñar otro tipo de estructuras fotónicas como filtros por ejemplo.

3.1. Diseño de espejos fotónicos

Generalmente las mayores dificultades en el diseño de espejos de banda ancha consisten en seleccionar los parámetros estructurales como el óptimo número de capas o determinar sus espesores que están relacionados al rango de longitudes de onda del espejo fotónico. Para propósitos prácticos se busca que únicamente sea necesario definir el rango del espejo para la aplicación deseada; también se procura el menor tamaño de la multicapa total ya que se relaciona directamente con el tiempo de fabricación.

En este trabajo proveemos una herramienta para diseñar espejos fotónicos altamente reflectivos basada en un método de optimización estocástica [22]. En esta metodología consideramos cuatro parámetros estructurales que definen los diferentes arreglos de multicapas posibles para la formación de un espejo de banda ancha: el número de periodos p , el número de subespejos n_s , y dos medidas de la distribución de longitudes de onda de Padé λ_{ni} y n_i ; a diferencia de trabajos previos donde se consideraron solamente dos parámetros [15]. La relevancia de cada parámetro está relacionada a las características del arreglo de multicapas que conforma al espejo fotónico como mencionamos a continuación.

Número de periodos

Un espejo de banda ancha está formado por una superposición de n_s número de subespejos, donde cada subespejo cubre un rango de longitudes de onda y está formado por bicapas de baja y alta porosidad, llamadas periodos p . El número de periodos de cada subespejo determina que tan definida es la brecha fotónica. Cuando el número de p aumenta de 1 hasta $p \leq 5$ también aumenta la reflectancia de su espectro. Para ilustrar esto calculamos el espectro de reflectancia de un subespejo centrado en $\Lambda_T = 400$ nm incrementando el número de periodos, y en la figura 3.1 a) se observa como al aumentar p se define mejor la brecha fotónica. Sin embargo, a partir de 5 periodos y después de 6 p el cambio que se observa en la reflectancia es mínimo, por lo que definimos el número óptimo de periodos como $p = 5$. Si consideramos periodos mayores esto también impli-

ca mayor tiempo de fabricación, ya que aumenta el número de las capas en la estructura y con ello la absorción en las mismas.

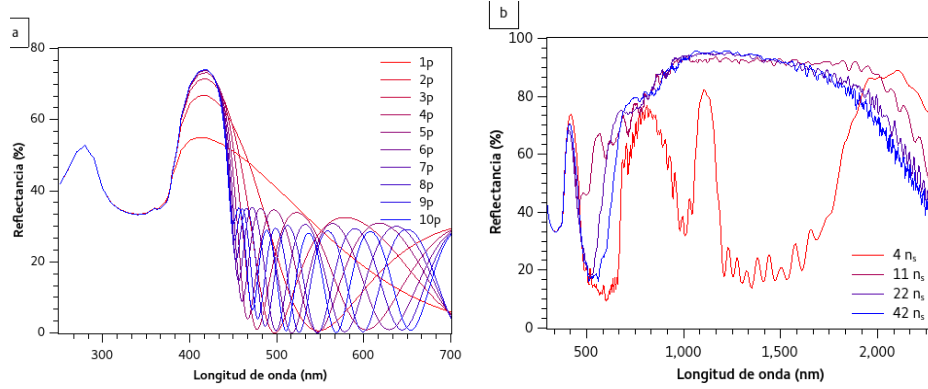


Figura 3.1: Espectros teóricos de a) un subespejo centrado en 400 nm con diferente número de periodos. b) un espejo de banda ancha de 400 a 2000 nm, con diferente número de subespejos.

Número de subespejos

El ancho de la banda fotónica de cada subespejo depende de su longitud de onda central $\Lambda(n_s)$ y del contraste de índices de refracción como lo especificamos en el capítulo 2.2.2. Antes en el capítulo 2.2 determinamos los índices de refracción del p-Si y mostramos que los valores que empleamos para el diseño y fabricación de los espejos presentan un contraste de índices suficientemente alto para asegurar una buena calidad fotónica. Entonces, si se desea diseñar un espejo de banda ancha se debe escoger un adecuado número de n_s para cubrir el rango de longitudes de onda deseado. Por esta razón definimos el número de n_s como el primer parámetro de optimización en la búsqueda del arreglo óptimo de multicapas durante el proceso de optimización estocástica que describiremos en breve. Además es también importante definir un rango adecuado de n_s para evitar la exploración de valores innecesarios. Para un espejo diseñado de $\Lambda(1) = 400$ a $\Lambda(f) = 2000$ nm, con un ancho de banda total de 1600 nm, calculamos el ancho de la banda del primer ($\Lambda(1)$) y último ($\Lambda(f)$) subespejo a un 90 % de reflectancia, obteniendo valores de 38.25 y 448.5 nm respectivamente. Para cubrir todo el rango de longitudes de onda del espejo, calculamos el máximo número de subespejos como $1600 \text{ nm} / 38.25 \text{ nm} \simeq 42 n_s$ y el mínimo como $1600 \text{ nm} / 448.5 \text{ nm} \simeq 4 n_{se}$. De esta forma definimos el rango de la búsqueda de n_s entre $\{4, 42\}$.

Para ilustrar el efecto de n_s en un espejo de $\Lambda(i) = 400$ a $\Lambda(f) = 2000$ nm, calculamos los espectros de reflectancia para una misma configuración con $p = 5$, una distribución de longitudes de onda con $n_i = 8$ y $\Lambda(n_i) = 1458$ y cambiando el número de subespejos. En la figura 3.1 b) notamos que al aumentar el número de n_s la reflectancia disminuye hacia longitudes de onda largas y lo comprobamos calculando la integral de cada espectro de reflectancia; concluimos que el espejo con $n_s = 11$ presenta el mayor valor de la integral y por lo tanto la mayor reflectancia de todos. De esta manera mostramos que para una configuración dada hay un valor óptimo de n_s que además no es necesariamente el valor mayor de subespejos.

3.1.1. Subespejo intermedio de la distribución de longitudes de onda de Padé

En el capítulo 1.1.2 presentamos una manera de definir las longitudes de onda centrales de cada subespejo mediante el aproximante de Padé con el sistema de ecuaciones 1.2. Para poder resolver las ecuaciones simultáneas es necesario definir primero el rango de longitudes de onda para el cual se desea diseñar el espejo de banda ancha y después determinar cuál de todos los n_s subespejos es el intermedio (n_i) y cual es su longitud de onda central ($\Lambda(n_i)$). Estos dos parámetros definen la forma de la distribución $\Lambda(n_s)$ influyendo directamente en la reflectancia de la brecha fotónica del espejo. Entonces, estas variables, $\Lambda(n_i)$ y n_i , representan dos parámetros de optimización más en la exploración de la mejor estructura fotónica para construir un espejo de banda ancha.

Finalmente consideramos tres parámetros para nuestro método de optimización estocástica: $\Lambda(n_i)$, n_s y n_i . El conjunto de estos parámetros representa las coordenadas de “partículas” en un espacio tridimensional (espacio de soluciones de la optimización) para todas las posibles estructuras fotónicas en un rango de longitudes de onda determinado. Cabe mencionar que aquí usaremos el término “partículas” haciendo referencia a los elementos del espacio de soluciones que representan las diferentes composiciones de subespejos de las posibles estructuras fotónicas. El proceso de optimización se realiza evaluando la integral de los espectros de reflectancia teóricos de cada partícula, con el objetivo de encontrar la partícula con la mayor reflectancia (mayor integral del espectro) en todo el rango de longitudes de onda para el cual está diseñado el espejo $\Lambda(f) - \Lambda(i)$.

Para esto calculamos los espectros de reflectancia teóricos mediante el método de espesores equidistantes descrito en el capítulo 1.2.1. Después realizamos una integración numérica del espectro de reflectancia efectivo equidistante y lo utilizamos como criterio de desempeño de reflectancia RP (función objetivo) en la optimización estocástica de la siguiente manera: Aplicamos una interpolación lineal al espectro efectivo y después integramos sobre el rango de longitudes de onda del espejo fotónico como:

$$RP = \int_{\Lambda(1)}^{\Lambda(f)} R d\lambda. \quad (3.1)$$

El objetivo del algoritmo de optimización es evaluar RP para cada estructura fotónica diferente en el espacio tridimensional y mediante la búsqueda estocástica encontrar la estructura más reflectiva que corresponde al espejo con el mayor valor de RP . Al finalizar el proceso usamos las coordenadas $(\Lambda(n_i), n_s, n_i)$ de la partícula óptima para fabricar con p-Si el espejo fotónico optimizado.

3.2. Optimización estocástica

En esta sección describimos con detalle el método de optimización estocástica que es una de las contribuciones principales de esta tesis. El método que desarrollamos está basado en la búsqueda del mejor arreglo de multicapas para fabricar espejos fotónicos altamente reflectivos. Aquí exploramos qué valores para los tres parámetros de optimización $(\Lambda(n_i), n_s, n_i)$ definen la mejor estructura fotónica de manera que se forme un espejo altamente reflectivo. Para lograr esta tarea se requiere de una optimización topológica donde se busca la mejor distribución de un material dado un objetivo específico. Esto implica que el diseño está localmente parametrizado de tal forma que las propiedades del material en cada punto espacial de la estructura es una variable optimizable [53]. Muchos estudios orientados a la optimización topológica se han enfocado en el uso de algoritmos basados en métodos de gradiente mediante un análisis de sensibilidad [53–56] donde se consideraron estructuras fotónicas lineales para brechas cortas. En estos casos no se presenta la complejidad adicional de multimodalidad (*i.e.* que tiene múltiples mínimos locales); mientras que nosotros exploramos brechas mucho más amplias que presentan no linealidades resultando en multimodalidad del espacio de soluciones. Los algoritmos basados en gradientes son eficientes en muchos casos, pero presentan dos principales inconvenientes en nuestra investigación. Primero, la naturaleza del método del gradiente es de búsqueda local, lo cual es ideal

cuando confrontado con tareas de optimización convexas donde el objetivo y las restricciones son funciones convexas; sin embargo, el problema presentado en nuestro estudio es altamente no lineal y no convexo. Segundo, la combinación de cálculos de derivadas y evaluaciones con derivadas implica trabajo computacional intenso en nuestra aplicación. Además, dado que las simulaciones de reflectancia consisten en funciones con gradientes agudos (exponentes, senos y cosenos), las aproximaciones de primer orden podrían ser ineficientes llevando a problemas de convergencia en el marco de referencia de la búsqueda lineal [57]. Por consiguiente realizamos en este trabajo una optimización topológica mediante un algoritmo de optimización estocástica particularmente adaptado para la presente aplicación.

Nuestro algoritmo de optimización estocástica explora el espacio de soluciones de todas las posibles estructuras fotónicas, con respecto al criterio de desempeño presentado en la ecuación 3.1. El mayor valor de RP está relacionado a la máxima reflectancia del espejo fotónico que buscamos optimizar mediante nuestro algoritmo. Este debe tener tanto buenas capacidades de exploración como de explotación para buscar eficientemente la solución. El proceso de exploración se refiere a la habilidad de un algoritmo de optimización para buscar un óptimo global en el espacio de soluciones de un problema desconocido de optimización; mientras que el proceso de explotación alude a la capacidad de aplicar el conocimiento de soluciones previas o actuales para buscar aún mejores soluciones. A pesar de que los dos tipos de procesos tienen objetivos que parecen estar en conflicto si permanecen bien balanceados es posible lograr una buena optimización [57].

Pueden comprenderse mejor estos dos procesos cuando se comparan un método de gradiente con una búsqueda aleatoria. Por un lado, el método de gradiente tiene mejores capacidades de explotación ya que explora eficientemente la información de soluciones previas y actuales, sin embargo, queda atrapado fácilmente en mínimos locales. Por el otro lado, un algoritmo de búsqueda aleatoria puede encontrar una solución global si se explora extensamente el espacio, pero en general es un algoritmo ineficiente debido a su completa falta de explotación. Para afrontar las dificultades mencionadas y obtener un buen desempeño de optimización, combinamos tres métodos estocásticos para obtener un algoritmo híbrido. Este utiliza un número de N partículas con coordenadas $(\Lambda(n_i), n_s, n_i)$ como su agente y busca en el espacio de soluciones mediante una forma combinada de tres métodos: a) búsqueda aleatoria (BA) [58], b) optimización de enjambre de partículas (OEP) [59] y c) recocido simulado (RS) [60]. Adicionalmente, cuando el algoritmo determina que no hay buenas soluciones fuera de

un dominio específico, la búsqueda se reduce para enfocarse en áreas con mayor probabilidad de encontrar una solución de alta calidad. En la siguiente sección se describe el algoritmo, la justificación e implementación de la combinación de los tres métodos.

3.2.1. Algoritmo de optimización estocástica

El algoritmo propuesto para encontrar la partícula óptima que caracteriza una estructura fotónica utiliza tres fases principales: Inicialización, Evaluación y Clasificación y Exploración del espacio.

- *Inicialización*
 - En esta fase se escogen aleatoriamente N_p partículas en el espacio de todas las posibles estructuras fotónicas (dadas las condiciones iniciales: $\Lambda(1)$ y $\Lambda(f)$).
- *Evaluación and Clasificación*
 - El criterio de desempeño RP de cada partícula es evaluado y clasificado en esta fase. Después de calcular el área bajo la curva del espectro de reflectancia RP de las N_p partículas estas se clasifican en tres grupos.
 - Cada grupo determina la estrategia de búsqueda que seguirá en las siguientes n iteraciones:
 - N_{RS} número de partículas con el mayor valor de RP siguen una búsqueda de recocido simulado (RS).
 - N_{BA} número de partículas con el menor valor de RP siguen una búsqueda aleatoria (BA).
 - El resto de las N_{OEP} partículas siguen una búsqueda tipo enjambre de partículas (OEP).

Los tipos de búsquedas son explicados a continuación.

- *Exploración del espacio*

- La clasificación anterior funciona de tal manera que la posición de cada partícula es mejor aprovechada al proveer información al enjambre como un todo.
- Las N_{RS} partículas deben ser un número pequeño de partículas que se asumen están cerca de soluciones de alta calidad y por lo mismo se debería explorar intensivamente su vecindario. Para este propósito utilizamos un algoritmo de RS con naturaleza de búsqueda local implementado del trabajo reportado en [60].
- Para las N_{OEP} se aplica un razonamiento similar. En el espacio de soluciones, estas partículas están ubicadas en regiones lejanas a soluciones óptimas. Sin embargo, al utilizar la información de otras partículas que ya han sido evaluadas en el enjambre estas pueden buscar mejores soluciones en áreas donde no han explorado otras partículas. OEP es un algoritmo diseñado para este propósito, está inspirado en una bandada de pájaros que colectivamente intercambian información en búsqueda de comida, acercándose de esta forma a un óptimo. En otras palabras, las N_{OEP} partículas se acercan a las mejores partículas ya evaluadas y en su camino buscan mejores opciones. La implementación del OEP en este trabajo viene de [59].
- Finalmente, las N_{BA} partículas son las que se asumen están más alejadas de las soluciones de alta calidad y por lo tanto la exploración de su vecindario no aporta ningún beneficio al enjambre. Del *No Free Lunch Theorem* [61] se establece una prueba teórica que un algoritmo de optimización es en promedio tan bueno como su estrategia de búsqueda aleatoria y que la ventaja de un algoritmo especializado es utilizar y obtener conocimiento del problema en cada iteración. Dado que las partículas N_{BA} están muy lejos de soluciones óptimas difícilmente pueden proveer información útil, por lo tanto son desechadas y reinicializadas de manera aleatoria.

- *Repetición*

- Después de n iteraciones el algoritmo regresa a la fase de Evaluación y Clasificación o finaliza.

- *Reducción de espacio*
 - Durante el algoritmo, las mejores posiciones de cada partícula en cada ciclo son guardadas. Después de N_{cycle} iteraciones, se determina cuál partícula de todas las que han sido evaluadas es la mejor globalmente (llamamos a esta partícula p_{best}). El espacio de la búsqueda es después reducido al dominio más pequeño que contiene la posición de todas las p_{best} del actual ciclo de acuerdo a los siguientes parámetros que afectan un ciclo:
 - a) El número de iteraciones permitidas en que la p_{best} sea la misma. Si se cumple el número de iteraciones permitidas y p_{best} sigue siendo la misma entonces el dominio de la búsqueda se reduce. Esta reducción la hace tomando en cuenta la mejor posición que han tenido todas las partículas. Por ejemplo supongamos que las 3 mejores posiciones corresponden a 3 partículas con las siguientes coordenadas: (630, 5, 2), (1467, 26, 13), (1999, 17, 11). Para determinar el nuevo espacio de búsqueda se consideran los más altos y más bajos valores de cada coordenada, y el nuevo dominio reducido se define como:

Coordenada $\Lambda(n_i) \rightarrow \{630 - 1999\}$

Coordenada $n_s \rightarrow \{5 - 26\}$

Coordenada $n_i \rightarrow \{2 - 11\}$

.
 - b) El número de ciclos que se repiten en todo el algoritmo. Un ciclo se acaba cuando se cumplen cualesquiera de las dos opciones: i) cuando se alcanza el máximo número de iteraciones ó ii) porque la partícula p_{best} no cambió durante el número de iteraciones permitidas. Finalmente el algoritmo se acaba por completo cuando se termina el último ciclo definido por el número de ciclos.

En resumen, el algoritmo funciona de la siguiente manera: en cada iteración se escogen N partículas al azar en todo el dominio y de acuerdo al valor de su función de desempeño RP se categorizan como buenas (N_{RS}), malas (N_{BA}) o regulares (N_{OEP}). Después de cada iteración se determina cuál partícula es la

p_{best} globalmente y se reduce el espacio de soluciones. Finalmente, al concluir el número de ciclos se determinan las coordenadas de la mejor partícula. En la figura 3.2 se muestra un diagrama de flujo del algoritmo de optimización.

De esta manera, dado que BA, OEP y RS están en orden ascendente de exploración y en orden descendente de explotación se logra un balance en el paradigma de exploración-explotación. Adicionalmente, la reducción del espacio permite al algoritmo enfocarse en las áreas que tienen mayor probabilidad de tener un óptimo de alta calidad (con un valor alto de RP).

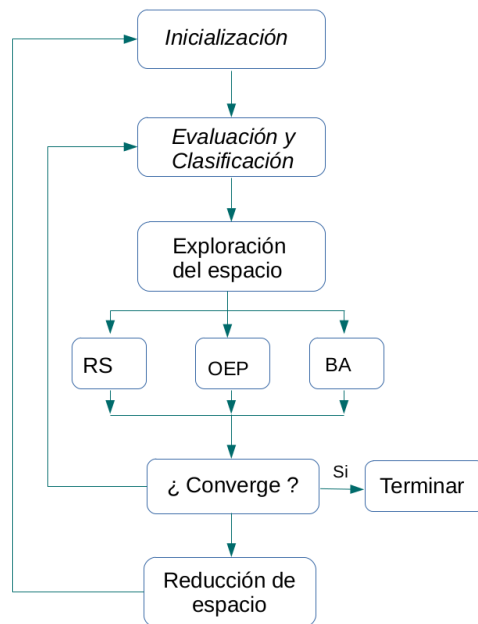


Figura 3.2: Diagrama de flujo del algoritmo de optimización.

3.3. Validación experimental

Para validar el método de diseño que hemos desarrollado fabricamos tres estructuras fotónicas diferentes utilizando la optimización estocástica descrita antes. Aquí escogimos $N_p = 10$ número de partículas y corrimos cada algoritmo con 200 iteraciones, 5 ciclos que se repiten y con 30 iteraciones permitidas. Dadas estas condiciones sólo es necesario definir el rango de longitudes de onda donde se desea inhibir la transmisión de las ondas EM. El primer espejo M_1

está diseñado para reflejar de $\Lambda(1) = 400$ a $\Lambda(f) = 2000$ nm, el segundo M_2 de $\Lambda(1) = 600$ a $\Lambda(f) = 1200$ nm y el tercero M_3 de $\Lambda(1) = 800$ a $\Lambda(f) = 1800$ nm. Corrimos el algoritmo de optimización dos veces (A y B) para cada rango de longitudes de onda y obtuvimos partículas optimizadas p_{best} con algunas diferencias en sus coordenadas, pero con valores de RP muy similares entre cada par de espejos. De esta manera inferimos que el algoritmo de optimización encuentra estructuras óptimas en cada búsqueda a pesar de que tengan pequeñas diferencias en su distribución de longitudes de onda. En la tabla 3.1 resumimos los parámetros optimizados de los tres pares de espejos.

Tabla 3.1: **Parámetros optimizados ($\Lambda(n_i)$, n_i , n_s) de los espejos fotónicos M_1 , M_2 y M_3 diseñados con la optimización estocástica. El criterio de desempeño RP de cada espejo también está enlistado.**

Espejo	$\Lambda(n_i)$ (nm)	n_s	n_i	RP
M_{1A}	966	12	5	136'506
M_{1B}	1114	12	5	136'507
M_{2A}	838	8	3	55'022
M_{2B}	929	8	4	55'021
M_{3A}	1076	8	3	94'521
M_{3B}	1508	8	6	94'519

Conociendo los parámetros optimizados es posible calcular la distribución de longitudes de onda $\Lambda(n_s)$ de cada espejo y utilizando la condición del cuarto de longitud de onda $\eta_j d_j = \Lambda(n_s)/4$ se obtiene el espesor de las capas de cada subespejo que conforman la estructura fotónica. Finalmente utilizamos esta información para fabricar los diferentes espejos con p-Si y comparamos sus espectros experimentales y teóricos correspondientes en las figuras 3.3-3.5. Mediante una función de mérito N (misma que usamos en la ecuación 3.3) medimos de manera cuantitativa las diferencias entre la teoría y el experimento:

$$N = \sqrt{\frac{\int_{\Lambda(1)}^{\Lambda(f)} (T(\lambda) - E(\lambda))^2 d\lambda}{\left(\int_{\Lambda(1)}^{\Lambda(f)} T(\lambda) d\lambda\right)^2}}$$

Los valores de N de todos los espejos están presentados en la tabla 3.2 donde observamos diferencias de 10^{-5} entre los espejos A y B de M_1 y M_3 respectivamente

y diferencias del orden de 10^{-4} entre los espejos de M_2 . Al haber al menos un orden de magnitud de diferencia entre los mismos espejos A , B y C con respecto a los valores de N de cada estructura podemos decir que logramos una buena reproducibilidad de los experimentos con la teoría. De esta manera mostramos la viabilidad de nuestro método de optimización estocástica para diseñar y fabricar espejos fotónicos de banda ancha y altamente reflectivos.

Tabla 3.2: Valores de la función de mérito N y tiempo de fabricación (t_f) de los espejos fotónicos optimizados.

PC	$N (\times 10^{-3})$	t_f (h)
M_{1A}	4.41	1.78
M_{1B}	4.36	1.78
M_{2A}	3.83	0.93
M_{2B}	3.23	0.93
M_{3A}	1.11	1.30
M_{3B}	1.20	1.30

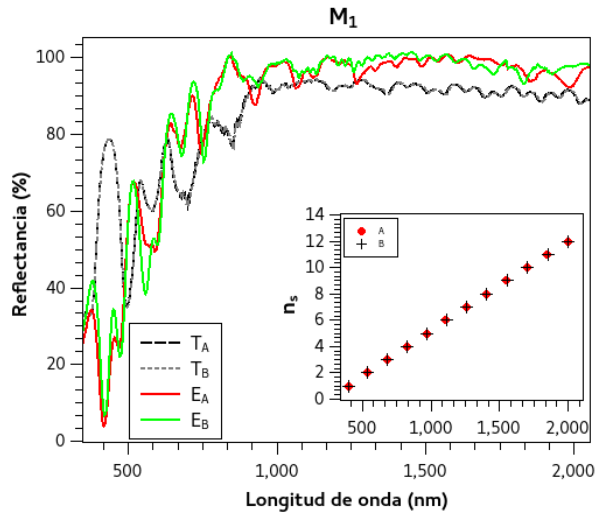


Figura 3.3: Espectros de reflectancia teóricos (T_A , T_B) y experimentales (E_A , E_B) de los espejos M_1 diseñados para reflejar el rango de 400 a 2000 nm. Sus distribuciones de longitud de onda $\Lambda(n_s)$ (figura en el recuadro) son obtenidos de los parámetros optimizados.

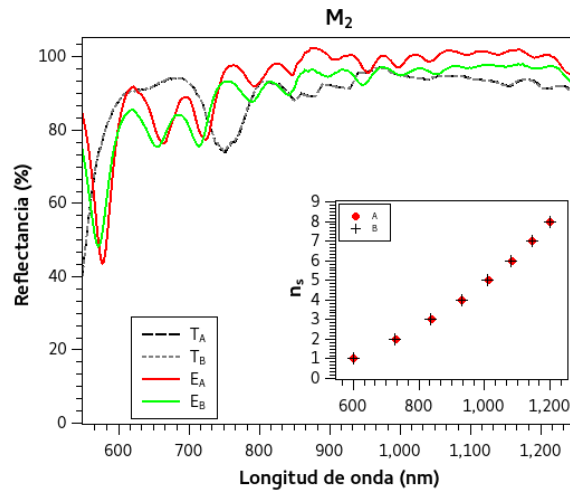


Figura 3.4: Espectros de reflectancia teóricos (T_A , T_B) y experimentales (E_A , E_B) de los espejos M_2 diseñados para reflejar el rango de 600 a 1200 nm. Sus distribuciones de longitud de onda $\Lambda(n_s)$ (figura en el recuadro) son obtenidos de los parámetros optimizados.

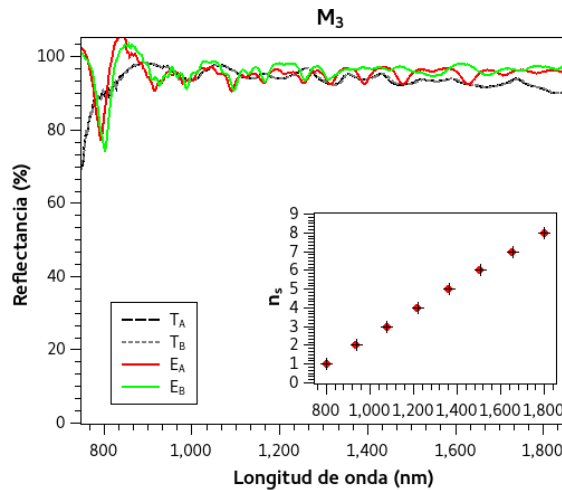


Figura 3.5: Espectros de reflectancia teóricos (T_A , T_B) y experimentales (E_A , E_B) de los espejos M_3 diseñados para reflejar el rango de 800 a 1800 nm. Sus distribuciones de longitud de onda $\Lambda(n_s)$ (figura en el recuadro) son obtenidos de los parámetros optimizados.

Adicionalmente a la calidad de fabricación y reproducibilidad, es importante también considerar el tiempo de fabricación. En trabajos anteriores [15] reportamos espejos fotónicos de p-Si tan reflectivos como los espejos optimizados que presentamos aquí, pero su estructura de multicapas es mucho más grande debido a la gran cantidad de subespejos ($n_s = 20$) que los conforman. Estos espejos tardan mínimo 3.5 horas en fabricarse, el cual es el doble del tiempo de fabricación que utilizamos para producir los espejos optimizados que reportamos aquí (ver tabla 3.2). Por lo tanto, al utilizar nuestro método de optimización estocástica también hemos mejorado la eficiencia en el proceso de fabricación de los espejos.

Hemos desarrollado un novedoso algoritmo de optimización estocástica para optimizar estructuras fotónicas 1D altamente reflectivas que pueden ser fabricadas con p-Si u otros materiales dieléctricos. Esta metodología puede utilizarse también para optimizar otros sistemas no lineales y no convexos y, mediante algunas modificaciones simples es posible emplearlo para diseñar otro tipo de estructuras fotónicas para todo tipo de aplicaciones diversas.

En este trabajo hemos explorado algunas de las aplicaciones donde pueden utilizarse estructuras fotónicas reflectivas unidimensionales. Se presentan en el siguiente capítulo la evaluación del uso de espejos fotónicos acoplados a nanoantenas, el estudio de algunos aspectos de transferencia de calor en espejos optimizados para aplicaciones de concentración solar y la fabricación de micromotores fotónicos.

Capítulo 4

Aplicaciones de espejos fotónicos

Las propiedades únicas de los espejos fotónicos para controlar la reflectancia de las ondas EM permiten su uso en diversas aplicaciones. Entre ellas se destacan los espejos para láseres [21], donde se requieren espejos de alta reflectancia para mantener la luz oscilando en la cavidad y, espejos (conocidos como acopladores de salida) con una reflectancia menor para permitir la salida de la radiación láser de la cavidad. También pueden producirse biosensores basados en el cambio del índice de refracción efectivo en presencia de moléculas en la estructura modificando así su respuesta espectral [24, 62]. Los espejos fotónicos pueden, además, aumentar la sensibilidad de los modos en polaritones de superficie plasmónicos [63] para su uso en espectroscopía o fotovoltaicos por ejemplo. Otro tipo de dispositivos comúnmente utilizados son las guías de onda formadas por dos reflectores de Bragg separados por un defecto que confinan las ondas EM entre ellos [18–20].

Entre muchas otras aplicaciones, en este trabajo hemos centrado nuestro interés en el uso de espejos fotónicos como sustratos para nanoantenas para mejorar su desempeño [25], el transporte de calor en espejos fotónicos de banda ancha para su empleo como espejos secundarios en concentradores solares [3], y en la fabricación de micromotores fotónicos compuestos por dos espejos de Bragg autosoportados [26, 27]. En este capítulo se presentan los aspectos que hemos explorado de cada una de estas tres aplicaciones con espejos fotónicos de p-Si.

4.1. Nanoantenas

Las nanoantenas al igual que las antenas de radio o de microondas son dispositivos que tienen la capacidad de convertir la radiación que se propaga libremente en el espacio a energía localizada y viceversa. A pesar de que tienen propiedades y parámetros similares a sus contrapartes macroscópicas, las nanoantenas presentan importantes diferencias relacionadas a su tamaño y a los efectos de resonancia que surgen en las nanoestructuras metálicas. Entre los aspectos más importantes que las distinguen se encuentra que a frecuencias muy altas ya no es válida la suposición que los metales son conductores perfectos. El campo eléctrico puede penetrar en los metales causando transiciones de energía en los electrones de conducción y la disipación de la energía EM [64]. Otro aspecto de gran relevancia surge cuando la luz interactúa con la nanoestructura metálica causando que sus electrones libres oscilen colectivamente produciendo los llamados plasmones de superficie (PS). Las ondas EM son atrapadas en la superficie debido a su interacción con los electrones del conductor los cuales responden oscilando en resonancia con las ondas EM dando lugar a propiedades únicas [65]. Los PS pueden causar alteraciones en el patrón de radiación de las ondas EM incidentes, el calentamiento de la nanoestructura metálica o la dispersión de las ondas EM. Además, pueden acoplarse a los campos EM emitidos por partículas u otras nanoestructuras en su vecindad tal que modifican las propiedades radiativas del emisor, así como la transferencia de energía EM del campo cercano al lejano y viceversa [64]. Con un arreglo de muchas nanoantenas es posible amplificar los campos EM locales cercanos gracias al efecto de los PS.

Todas las características que presentan las nanoantenas conllevan a utilizarlas en aplicaciones en varios campos, tales como en espectroscopía vibracional sobre nanoestructuras metálicas SERS [66] mediante el incremento de la señal Raman; o en celdas solares plasmónicas donde las nanoantenas ayudan a concentrar y guiar la radiación EM para reducir el espesor de las celdas y mejorar su absorción [64]; también pueden usarse en la nanomedicina donde se aprovechan las propiedades de los PS para crear imágenes de muestras biológicas [64, 67]; o para la detección de radiación infrarroja en dispositivos de cosecha de energía mediante nanoantenas Seebek [68].

A pesar de la gran aplicabilidad de las nanoantenas, su ausencia en la tecnología está vinculada directamente a desafíos relacionados al material. Debido a que la respuesta EM es dictada por las resonancias de los PS, las nanoantenas son fuertemente dependientes de la forma que tengan y del material del que estén hechas. En el diseño de las nanoantenas el objetivo es equivalente al de las

antenas clásicas: optimizar la transferencia de energía entre una fuente localizada o un receptor y el campo de radiación libre [69]. Sin embargo, las nanoantenas impresas, fabricadas sobre un sustrato, presentan una gran diferencia con respecto a las antenas ordinarias porque tienden a radiar gran parte de su energía hacia el sustrato. Debido a esto cambia su distribución de corriente y la velocidad de onda de la nanoantena afectando directamente su eficiencia.

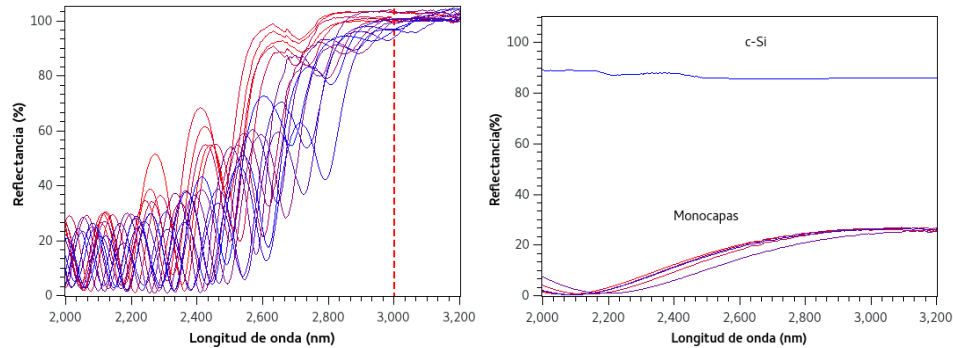
En este contexto nos interesa explorar el uso de espejos fotónicos para mejorar la eficiencia de las nanoantenas. Con este objetivo diseñamos y fabricamos espejos de p-Si sobre los cuales depositamos nanoantenas pretendiendo mejorar el desempeño de las nanoantenas al evitar pérdidas de energía debido al sustrato. La radiación emitida/recibida por la antena puede ser reflejada en el espejo aumentando la directividad de la antena para así utilizar la energía que en el caso contrario es absorbida en el sustrato [25]. Para el diseño de los espejos fotónicos tomamos en cuenta las frecuencias de resonancia de las nanoantenas y así aprovechamos únicamente la radiación con longitudes de onda deseadas. A continuación se presentan los aspectos experimentales de la fabricación y caracterización de las nanoantenas para evaluar la viabilidad de su uso sobre espejos fotónicos como sustratos.

4.1.1. Fabricación de nanoantenas

Los procesos de fabricación de las nanoantenas se limitan al tamaño y al material de las mismas. La manera más común de producir estos nanodispositivos es mediante litografía de haz de electrones, donde se depositan las antenas sobre un sustrato. Sin embargo, este tipo de nanoantenas tienden a radiar gran parte de su energía hacia el sustrato, disminuyendo así su eficiencia. Para evitar la pérdida de energía o bien, para incrementar la cantidad de radiación que incide en los nanoreceptores, exploramos aquí la viabilidad de fabricar nanoantenas sobre espejos fotónicos. En este trabajo evaluamos tres diferentes sustratos sobre los cuales depositamos las nanoantenas: monocapas de p-Si, espejos fotónicos de p-Si y obleas de c-Si.

Los espejos fotónicos fueron diseñados para reflejar alrededor de la longitud de onda central $\Lambda = 3000$ nm y están formados por 10 bicapas de índices de refracción alternantes ($n_a = 1.2658$ y $n_b = 1.6691$). Fabricamos 15 espejos de p-Si, cuyos espectros de reflectancia mostramos en la figura 4.1a. Adicionalmente fabricamos 5 monocapas de p-Si de baja porosidad ($n_b = 1.6691$) con un espesor $d = 898.69$ nm tal que se cumple la condición $\Lambda/2 = nd$. Sus espectros de reflectancia se muestran en la figura 4.1b donde los comparamos con el espectro

de reflectancia de una oblea de c-Si con las mismas características que los sustratos usados para la fabricación del p-Si de los espejos y las monocapas. Puede observarse una muy baja reflectancia en las monocapas mientras que los espejos de p-Si presentan una reflectancia mayor que el c-Si alrededor de los 3000 nm.



(a) Espejos fotónicos de p-Si (b) Monocapas de p-Si y oblea de c-Si.
 $\Lambda = 3000$.

Figura 4.1: Espectros de reflectancia de los tres diferentes sustratos sobre los cuales depositamos las nanoantenas.

Depósito de Nanoantenas mediante litografía por haz de electrones

La litografía por haz de electrones consiste en imprimir un patrón sobre un sustrato cubierto con un resisor que es químicamente alterado al ser expuesto a un haz de electrones. Para esto, generalmente se utiliza una resina de polímero: polymethyl methacrilato (PMMA). Depositamos la resina sobre los diferentes sustratos mediante un spin coater (Specialty Coating Systems 6800) a 1500 rpm para formar una película de 300 nm de espesor. Debido a que el PMMA está disuelto en Anisol fue necesario calentar la muestra a 135° C durante 5 minutos para evaporarlo y dejar el PMMA puro. A continuación imprimimos el patrón deseado de las nanoantenas (mostrado en la figura 4.2a) mediante el haz de electrones en un Microscopio Electrónico de Barrido (Inspect F50).

El área que fue expuesta al haz fue químicamente alterada al romperse los enlaces del polímero (ver figura 4.2b) y es posible disolver los fragmentos del PMMA con un revelador compuesto de Metil-isobutil-cetona (MIBK) e Isopropanol (IPA) en una relación 1:3. De esta forma queda el patrón libre de resina como se muestra en la figura 4.2c. Posteriormente depositamos una capa de plata de 60 nm

de espesor sobre las muestras utilizando una evaporadora Intercovamex TE12. En las áreas que fueron expuestas al haz, se adhirió la plata depositada sobre el sustrato y en las áreas no expuestas la plata se unió a la superficie del resistor (ver figura 4.2d). Finalmente disolvimos el resistor remanente en un solvente agresivo (acetona) durante 6-8 horas logrando que solamente la plata adherida al sustrato permanezca sobre el, así como puede apreciarse en la figura 4.2e.

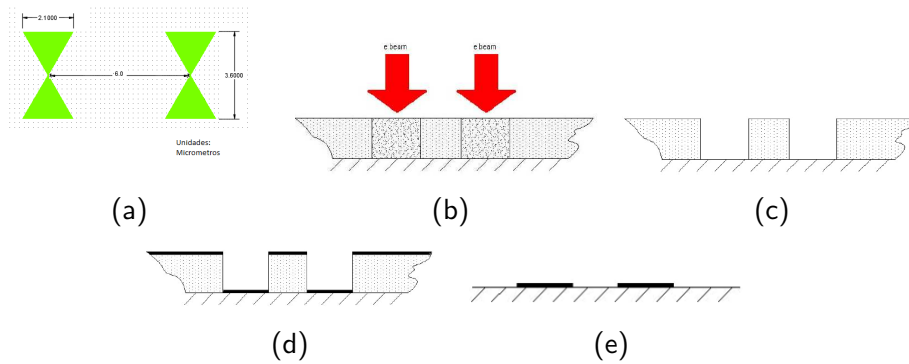


Figura 4.2: Esquema de los pasos de fabricación de nanoantenas mediante litografía de haz de electrones [70].

La posibilidad de imprimir cualquier patrón con el haz de electrones nos permite producir nanoantenas de diferentes geometrías e incluso arreglos o matrices de muchas nanoantenas. Esto último fue nuestro objetivo, ya que buscamos captar la mayor cantidad de energía con las antenas. De esta manera fabricamos matrices de 150×150 nanoantenas tipo *Bowtie* sobre los diferentes sustratos. La geometría *Bowtie* es una de las más sencillas y estudiadas, por lo cual escogimos imprimir este patrón sobre nuestras muestras. En las imágenes de la figura 4.3 se muestran las nanoantenas que fabricamos, tomadas con el microscopio electrónico de barrido (imágenes SEM), donde puede apreciarse la forma *Bowtie* que tienen y sus dimensiones como su longitud L . La resonancia teórica de las nanoantenas puede calcularse usando la relación [71]:

$$Res = L / \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right), \quad (4.1)$$

donde $\alpha = 30$ en nuestro caso. Usando esta ecuación encontramos que las nanoantenas con una longitud $L = 3.6 \mu m$ tienen una resonancia máxima teórica de $4.16 \mu m$. Las nanoantenas tienen una resonancia espectral tipo gaussiana,

donde el ancho de la banda de resonancia es aproximadamente de 20 THz para la geometría Bowtie [72]. Transformando a longitudes de onda, las nanoantenas presentan resonancias desde 3.65 hasta 4.8 μm . Cabe mencionar que estos cálculos son una estimación robusta donde se consideran nanoantenas suspendidas en el aire, no depositadas sobre algún sustrato, por lo que podría ser posible un corrimiento en los rangos de resonancia de las nanoantenas. Además, debido a que el rango de reflectancia de los espejos de p-Si cubren un rango muy amplio mayor a 3 μm , podemos asumir que la resonancia de las nanoantenas y la reflectancia de los espejos se superponen para algunas longitudes de onda.

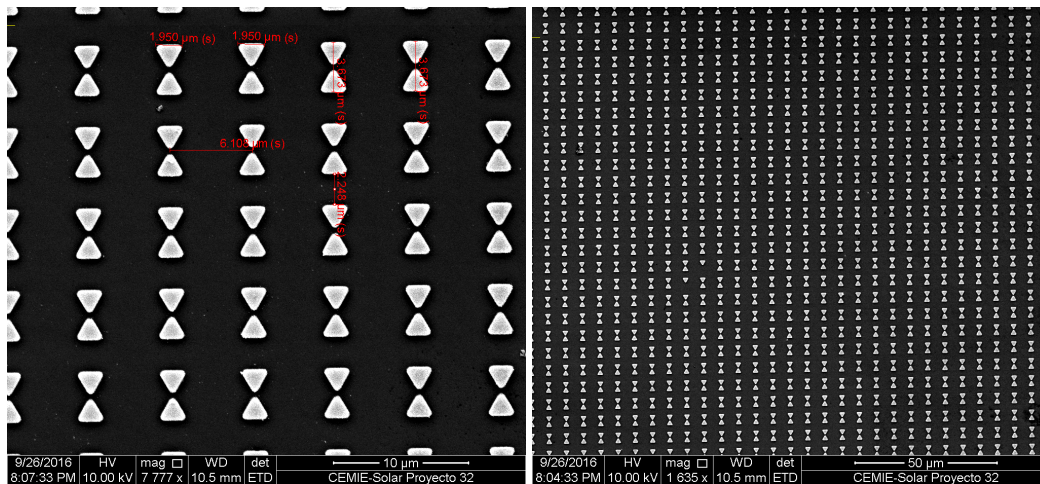


Figura 4.3: Imágenes SEM de una sección de la matriz de 150×150 nanoantenas tipo *Bowtie* fabricadas mediante litografía de haz de electrones.

La evaluación del funcionamiento de las nanoantenas con respecto a los sustratos sobre los cuales fueron depositadas puede realizarse mediante una caracterización térmica. A continuación describimos el trabajo que realizamos para determinar experimentalmente la capacidad de capturar radiación térmica de las nanoantenas depositadas sobre los diferentes sustratos.

4.1.2. Caracterización térmica de nanoantenas

La interacción de la radiación con una nanoantena provoca una resonancia a una frecuencia específica causando una alteración en los campos EM de la radiación. Este efecto puede aprovecharse por ejemplo para amplificar una señal o capturar radiación infrarroja para acoplarla con un dispositivo fotovoltaico y

generar electricidad [64]. La resonancia plasmónica generada en las nanoantenas al excitar los PS causa el calentamiento de la nanoestructura metálica debido a un aumento en la absorción de la radiación. De esta manera es posible capturar la energía térmica en las nanoantenas para su posible aprovechamiento en algún otro dispositivo. La cosecha de la energía térmica de desecho es uno de nuestros intereses y por ello enfocamos la caracterización de las nanoantenas en esta dirección. Buscamos entonces evaluar el funcionamiento de las nanoantenas como receptoras de la radiación térmica en función del aumento de temperatura que presentan al absorber dicha energía. Para lograr este objetivo es necesario un instrumento de medición de temperatura adecuado. Los termómetros o termopares comunes no sirven para detectar cambios de temperatura en estructuras tan pequeñas, por lo que recurrimos al uso de una cámara infrarroja (IR) de alta sensibilidad térmica. Las cámaras de este tipo detectan la radiación IR que emite un objeto y calculan la temperatura asociada mediante las leyes de Planck y Wien como descrito en [73] mediante la ecuación 4.6. De esta forma, es posible visualizar las diferencias de temperatura en la superficie de un objeto, que en nuestro caso son las matrices de nanoantenas con dimensiones de 1.2×0.9 mm sobre los diferentes sustratos. La cámara IR que utilizamos para poder detectar los arreglos de nanoantenas es una FLIR modelo X6540sc con una lente de 5X de aumento con la cual se logra una resolución espacial de $3 \mu m$ por pixel.

La radiación térmica que mide la cámara IR (W_t) es una suma de la radiación emitida por la muestra (E_{obj}), la radiación reflejada en la muestra del ambiente (E_{ref}) y la emisión de la atmósfera (E_{atm}) y se calcula como [74]:

$$W_t = E_{obj} + E_{ref} + E_{atm}. \quad (4.2)$$

La emisión del objeto es función de su emisividad e y de la transmisión de la atmósfera τ_{atm} y puede ser calculada usando la ley de Stefan-Boltzmann donde σ es la constante de Boltzmann:

$$E_{obj} = e \cdot \tau_{atm} \cdot \sigma \cdot (T_{obj})^4 \quad (4.3)$$

El segundo componente de la ecuación 4.2 está asociado a la emitancia de los alrededores del objeto y puede calcularse mediante:

$$E_{ref} = (1 - e) \cdot \tau_{atm} \cdot \sigma \cdot (T_{ref})^4. \quad (4.4)$$

La emisión de la radiación proveniente de la atmósfera puede expresarse de la siguiente manera:

$$E_{atm} = (1 - \tau_{atm}) \cdot \sigma \cdot (T_{atm})^4. \quad (4.5)$$

Al sustituir las ecuaciones 4.3-4.5 en la ecuación 4.2 la temperatura del objeto puede obtenerse como [74]:

$$T_{obj} = \sqrt[4]{\frac{W_t - (1 - e) \cdot \tau_{atm} \cdot (T_{ref})^4 - (1 - \tau_{atm}) \cdot (T_{atm})^4}{e \cdot \tau_{atm} \cdot \sigma}}. \quad (4.6)$$

Para obtener mediciones precisas de temperatura con la cámara IR es necesario determinar la emisividad e , la temperatura reflejada T_{ref} y la temperatura de la atmósfera T_{atm} . La transmitancia de la atmósfera τ_{atm} puede estimarse utilizando la distancia del objeto a la cámara, pero generalmente aplica que $\tau_{atm} \sim 1$ y de esta manera puede desprejarse la expresión con T_{atm} de la ecuación 4.6. Sin embargo, deben medirse los valores de e y T_{ref} de manera muy precisa debido a su gran influencia en el cálculo de la temperatura y aquí determinamos sus valores mediante el trabajo descrito a continuación.

La emisividad de un material es una medida que indica cuanta radiación IR es absorbida, transmitida y emitida. Puede tener valores desde 0 hasta 1, donde 1 es la emisividad de un cuerpo negro que absorbe toda la energía. Para conocer la e de las nanoantenas utilizamos el método de la cinta de aislar que consiste en lo siguiente: se coloca un pedazo de cinta de aislar sobre la muestra y se espera unos minutos hasta que estén en equilibrio térmico. A continuación se mide la temperatura de la cinta con la cámara IR, usando un valor de $e = 0.95$ para la cinta de aislar. Finalmente se mide la temperatura de un área adyacente a la cinta donde se encuentra el material cuya e se desconoce y se ajusta el valor de e hasta que la temperatura indique la misma que la de la cinta. El valor encontrado es la emisividad de la muestra, que en nuestro caso es el arreglo de nanoantenas de plata. Sin embargo, no es posible detectar las nanoantenas individuales con la cámara IR ya que son más pequeñas que la resolución espacial de la cámara. Por esta razón consideramos al arreglo de todas las nanoantenas como el objeto cuya emisividad desconocemos. Debido a que las nanoantenas se encuentran sobre diferentes sustratos y en la imagen IR del arreglo están incluidas las nanoantenas con el sustrato, consideramos necesario obtener valores diferentes de e en función del sustrato. Siguiendo el procedimiento de la cinta de aislar encontramos que la e de los arreglos de nanoantenas si tienen valores diferentes dependiendo del sustrato sobre el cual se encuentran depositadas las nanoantenas:

- Nanoantenas sobre espejo fotónico $e_{ef} = 0.78$
- Nanoantenas sobre monocapa de p-Si $e_{p-Si} = 0.91$

- Nanoantenas sobre c-Si $e_{c-Si} = 0.58$

Cuando un objeto no es totalmente opaco, i.e. cuando la emisividad es diferente de uno ($e \neq 1$), entonces la radiación térmica del ambiente es reflejada sobre la superficie del objeto. Una forma para determinar cual es la T_{ref} es medir la temperatura de un folio de aluminio arrugado y definir su emisividad como $e = 1$. Debido a que el aluminio refleja la radiación del ambiente proveniente de todos los ángulos (por eso se arruga) su temperatura promedio, medida con la cámara IR, es una aproximación para la T_{ref} . En nuestro caso, como la muestra debe estar a una distancia muy cercana a la lente de aumento, la mayor parte de la radiación reflejada proviene de la cámara misma. Encontramos que la $T_{ref} \sim 7^{\circ}\text{C}$ y suponemos que la temperatura es tan baja debido al sistema de enfriamiento interno que tiene la cámara. Usamos este valor de T_{ref} para las condiciones iniciales de los experimentos. Adicionalmente, también medimos la temperatura reflejada T_{refC} con una fuente de calor (cautín) cercana a la muestra ya que la temperatura reflejada es modificada bajo condiciones ambientales diferentes. De esta forma, obtuvimos valores de $T_{refC} \sim 20^{\circ}\text{C}$. Utilizamos los valores de T_{ref} , T_{refC} y los de la emisividad para los experimentos que a continuación se describen.

Primeros experimentos de caracterización térmica

La evaluación térmica de las nanoantenas que realizamos en este trabajo se basó en exponer las muestras a radiación térmica, medir las diferencias de la temperatura en las nanoantenas con la cámara IR y finalmente comparar las mediciones entre las muestras con nanoantenas sobre los diferentes sustratos. Implementamos diferentes arreglos experimentales con fuentes de calor diversas para llevar a cabo la caracterización térmica. Aquí presentamos únicamente los dos más representativos comenzando con el arreglo donde usamos como fuente térmica un cautín. Este primer arreglo experimental consistió en la cámara IR con la lente de aumento colocada frente a la muestra con las nanoantenas. Debido a que la lente de aumento tiene una distancia focal de 18 mm fue necesaria una montura adecuada para posicionar la muestra frente a la lente de manera muy precisa. Para cumplir con tales requerimientos utilizamos una montura traslacional de 3 ejes de Thorlabs (modelo PT3) que permite ajustar la posición de la muestra en las tres direcciones x , y , z con precisión micrométrica. La muestra se sujetó a la montura con una pinza modelo PC2 (Thorlabs). A un ángulo de 45° con respecto a la normal (eje de la cámara) y a la misma altura montamos un cautín modelo

Weller WLC100 que permaneció a una temperatura constante de 150°C. En la figura 4.4.a mostramos una fotografía del arreglo experimental con el caudín.

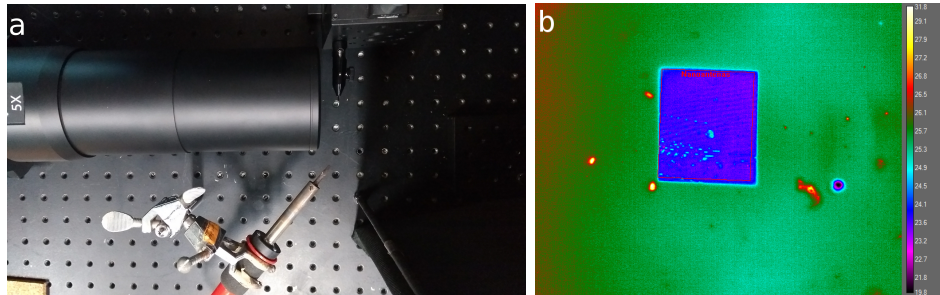


Figura 4.4: a) Arreglo experimental para medir el cambio de temperatura en las nanoantenas sobre diferentes sustratos al someterlas a radiación infrarroja mediante un caudín. b) Imagen IR del arreglo de nanoantenas tomada con la cámara IR. El área donde se encuentran las nanoantenas fue seleccionado para realizar las mediciones de temperatura en esa zona.

Utilizando la configuración descrita arriba realizamos mediciones de temperatura de las nanoantenas sobre los tres sustratos expuestas a la radiación del caudín durante 5 minutos. Mediante el software ResearchIR 4 realizamos la obtención y el análisis de los datos de las mediciones de temperatura. A continuación describimos los experimentos y resumimos los resultados que obtuvimos.

Resultados preliminares

En cada experimento tomamos un video con una duración de 5 min con la cámara IR. Al inicio del video la muestra no estaba expuesta a la radiación térmica del caudín ya que lo tapamos con una pantalla de corcho paralela al eje de la cámara. Algunos segundos después de iniciar el video removimos la pantalla y permitimos que la muestra quedara expuesta a la radiación. Haciendo uso del software ResearchIR 4 fue posible analizar el video y determinar la temperatura en la zona de interés de las imágenes termográficas obtenidas con la cámara IR. Seleccionamos el área rectangular que conforma la matriz de nanoantenas, como mostrado en la figura 4.4.b, y calculamos para cada video, la diferencia de temperatura entre el tiempo inicial (T_0) y el final (T_f) como $\delta T = T_f - T_0$. Cabe mencionar que usamos los valores de la temperatura reflejada de T_{ref} para la determinación de T_0 y para T_f usamos T_{refC} ; además utilizamos los valores de la emisividad que obtuvimos para las muestras sobre los diferentes sustratos.

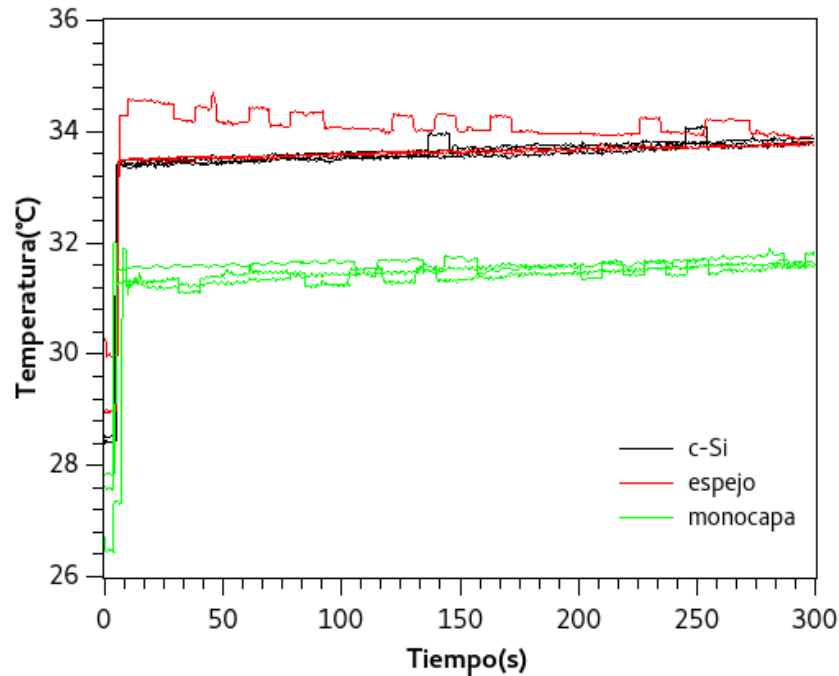


Figura 4.5: Mediciones representativas del cambio de temperatura en el tiempo de las nanoantenas sobre los sustratos: espejos fotónico de p-Si, monocapa de p-Si y oblea de c-Si. Las muestras se calentaron con un caudín a un ángulo de 45° respecto al eje de la cámara IR.

En la figura 4.5 se muestran las mediciones de temperatura vs tiempo de un experimento representativo realizado con el arreglo descrito anteriormente. Podemos observar que la temperatura inicial T_0 de las nanoantenas sobre los diferentes sustratos no son iguales y tampoco coinciden con la temperatura del ambiente $T_{amb} \sim 24 - 26^\circ \text{C}$ (medido con un termopar). Las mediciones de T_0 de las nanoantenas deberían cumplir la condición de equilibrio $T_0 = T_{amb}$ antes de estar expuestas a la radiación térmica, sin embargo no observamos dicho cumplimiento. Suponemos que la causa de la falta de coincidencia en las condiciones iniciales es debido a la falta de mejores estimaciones de la emisividad e en los diferentes sustratos.

Por otro lado, al calcular el cambio de temperatura δT en los diferentes experimentos obtuvimos resultados diversos en cada medición (ver ejemplo en tabla 4.1), de tal forma que no logramos encontrar un comportamiento típico de

Tabla 4.1: Ejemplo de cálculos de δT de dos mediciones de temperatura a y b de las nanoantenas sobre los diferentes sustratos.

Sustrato	δT_a	δT_b
c-Si	1.0	5.4
espejo	5.5	4.5
monocapa	4.6	4.1

calentamiento. En algunos experimentos las nanoantenas depositadas sobre p-Si presentaron un δT mayor y en otras las nanoantenas sobre los demás sustratos. Posiblemente esta falta de reproducibilidad se debió a la falta de precisión en algunos aspectos experimentales, como por ejemplo al remover la pantalla de corcho generando quizá alguna corriente de aire. Así nos dimos cuenta que se requieren más esfuerzos para mejorar el arreglo experimental y lograr una mejor reproducibilidad en las mediciones. Además notamos que las dificultades que surgieron para cumplir con la condición de equilibrio al inicio de las mediciones se deben principalmente a que todas nuestras muestras son altamente reflectivas. Debido a esto la cámara IR no detecta solamente la radiación térmica que emite la muestra sino también toda la radiación que refleja de sus alrededores. Este problema representa un gran reto experimental y se han propuesto algunos métodos para evitar este tipo de reflexiones mediante el uso de polarizadores IR [75] o simplemente cambiando el ángulo de incidencia de la cámara. Sin embargo, debido a que nosotros usamos la lente de 5X de aumento y la distancia focal es de 1.8 mm, no es posible modificar el ángulo de incidencia ya que se desenfoca la imagen y tampoco es posible considerar el uso de un polarizador.

Finalmente, para evitar los distintos problemas experimentales que surgieron modificamos el arreglo experimental e implementamos una manera diferente de analizar los resultados obtenidos al normalizar los datos de temperatura. A continuación se describe el nuevo arreglo y la normalización que usamos.

Arreglo experimental final

El cambio que realizamos en el arreglo experimental previo consistió en reemplazar el cautín por un foco infrarrojo de 235 W marca GE Commercial Materials que radia la muestra a un ángulo de 60° con respecto al eje. Nuevamente la cámara IR fue posicionada frente a la muestra para medir el cambio de temperatura en las nanoantenas. La muestra se sujetó a la base traslacional de 3 ejes a

una distancia de 18 mm de la lente de la cámara IR. Todo el arreglo se acomodó sobre una mesa óptica y asilado con cubiertas de tela negra para evitar corrientes de aire o mediciones erróneas debido a reflejos en la cámara. En la figura 4.6 puede apreciarse el arreglo experimental sin las cubiertas. La adquisición y el análisis de datos de las mediciones de la temperatura fueron realizadas utilizando el mismo software ResearchIR 4.

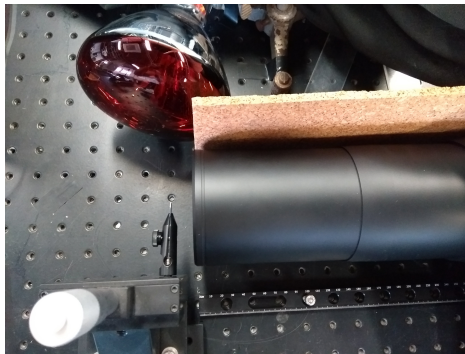


Figura 4.6: **Arreglo experimental para medir el cambio de temperatura en las nanoantenas sobre diferentes sustratos al someterlas a radiación infrarroja mediante un foco infrarrojo.**

Los experimentos fueron ejecutados mediante la siguiente metodología:

- Iniciamos la toma de un video con la cámara IR de duración total de 5 minutos para cada muestra. La temperatura inicial (T_0) de las muestras era la del ambiente.
- Segundos después prendimos la lámpara IR calentando así la muestra hasta la conclusión de los 5 minutos.
- Dejamos enfriar la muestra hasta tener nuevamente la temperatura del ambiente.
- Repetimos el procedimiento 3 veces por muestra.

Los videos fueron analizados con el software ResearchIR 4 donde seleccionamos el área rectangular donde se encuentran las nanoantenas y medimos su temperatura promedio para después graficar el cambio de la temperatura en el tiempo.

Para evitar el problema con los valores inexactos de la emisividad proponemos analizar el aumento de la temperatura $\Delta T(t)$ utilizando la siguiente relación de normalización:

$$\Delta T(t) = \frac{T(t) - T_0}{T_i - T_0}, \quad (4.7)$$

donde T_i es la temperatura 0.2 segundos después de prender la lámpara, elegidos arbitrariamente. Al utilizar esta normalización no es necesario introducir ningún valor de e y T_{ref} en los parámetros de la cámara, ya que $\Delta T(t)$, como una primera aproximación, es independiente de estos valores.

Analizemos lo siguiente para mostrar dicha independencia: la temperatura que detecta la cámara IR es calculada con la ecuación 4.6 donde al considerar $\tau_{atm} \sim 1$ es posible simplificar la ecuación como:

$$T_{obj} = \sqrt[4]{\frac{W_t - (1 - e) \cdot (T_{ref})^4}{e \cdot \sigma}} \quad (4.8)$$

De los valores de e que medimos antes observamos que $e > 0.5$ y si los valores de $e \sim 1$ como primera aproximación, podemos también despreciar el término $(1 - e) \cdot \tau_{atm} \cdot (T_{ref})^4$ ya que además $T_{ref} \ll T_{obj}$. De esta manera, la ecuación 4.8 se expresa como:

$$T_{obj} = \sqrt[4]{\frac{W_t}{e \cdot \sigma}}. \quad (4.9)$$

Para las diferentes mediciones en el tiempo usamos la ecuación 4.9 y obtenemos $T(t)$ de la siguiente manera:

- $t = 1: T(1) = \sqrt[4]{\frac{W(1)}{e \cdot \sigma}}$
- $t = 0: T_0 = \sqrt[4]{\frac{W(0)}{e \cdot \sigma}}$
- $t = i: T_i = \sqrt[4]{\frac{W(i)}{e \cdot \sigma}}$

Sustituyendo en la ecuación 4.7 podemos factorizar $\sqrt[4]{\frac{1}{e \cdot \sigma}}$ como:

$$\Delta T(1) = \frac{\sqrt[4]{\frac{1}{e \cdot \sigma}} \cdot \sqrt[4]{(W(1) - W(0))}}{\sqrt[4]{\frac{1}{e \cdot \sigma}} \cdot \sqrt[4]{(W(i) - W(0))}}.$$

A continuación es posible eliminar de la medición de temperatura el factor dependiente de la emisividad:

$$\Delta T(1) = \sqrt[4]{\frac{W(1) - W(0)}{W(i) - W(0)}}.$$

Al extender este análisis para cualquier medición en cualquier tiempo t mostramos así que la normalización en la ecuación 4.7 es independiente de los valores de emisividad.

4.1.3. Resultados y análisis

Realizamos los experimentos con tres muestras diferentes (A, B, y C) de cada tipo de sustrato. Las mediciones del aumento de la temperatura $\Delta T(t)$ de los tres tipos de muestras se presentan en la figura 4.7 y el promedio de todas las mediciones se muestra en la figura 4.8. Mediante un ajuste lineal al promedio de las mediciones encontramos los valores de la pendiente de cada recta:

- $m_{c-Si} = 2.208 \times 10^{-2} \pm 1.172 \times 10^{-5}$
- $m_{espejo} = 2.831 \times 10^{-2} \pm 1.217 \times 10^{-5}$
- $m_{p-Si} = 3.268 \times 10^{-2} \pm 1.366 \times 10^{-5}$

De acuerdo a estos valores podemos inferir que los resultados son estadísticamente diferentes y observamos en la figura 4.8, donde se presentan los promedios de las mediciones, una diferencia mayor de temperatura en las nanoantenas sobre los espejos fotónicos que las que se encuentran sobre el c-Si. Podemos concluir entonces que el espejo ayuda a mejorar el funcionamiento de las nanoantenas para capturar mayor cantidad de radiación térmica. Sin embargo, observamos también que las muestras de monocapas de p-Si presentan un incremento mayor de temperatura que las de los espejos fotónicos. Una posible explicación es que las monocapas, por tener espesores múltiplos de Λ , provocan una resonancia adicional en las nanoantenas incrementando así su temperatura. Otro aspecto que podría ser causa de estos resultados es el propio calentamiento de las monocapas que son altamente absorbentes. Sin embargo, la exploración más detallada del efecto de los sustratos sobre las nanoantenas es un tema que dejamos como trabajo futuro.

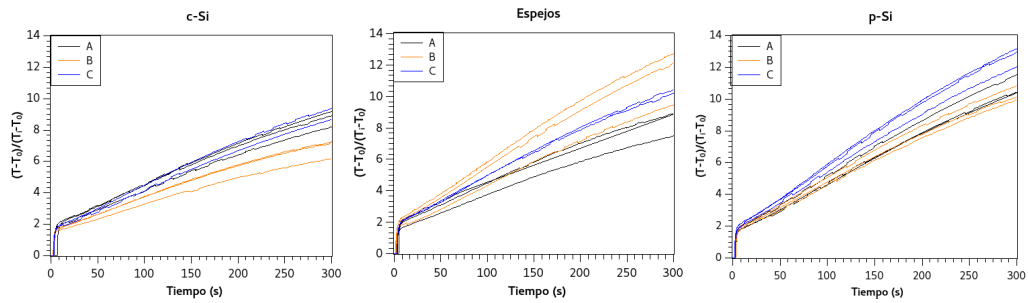


Figura 4.7: Mediciones del aumento de temperatura $\Delta T(t)$ de tres muestras (A, B, C) de cada sustrato de: c-Si, espejo fotónico y monocapas de p-Si.

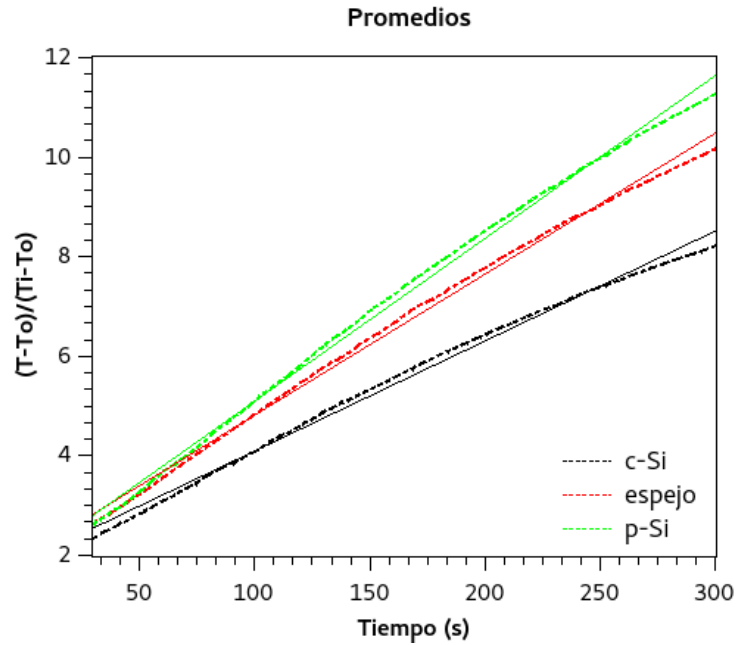


Figura 4.8: Promedio de las mediciones del aumento de temperatura $\Delta T(t)$ de todas los sustratos de c-Si, espejo fotónico y monocapas de p-Si. Se muestra el ajuste lineal de cada promedio con una línea continua.

Adicionalmente, con el objetivo de evaluar el desempeño de las nanoantenas mediante la exploración de sus propiedades eléctricas, fabricamos otro tipo de nanoantenas sobre otros sustratos y realizamos algunos experimentos para realizar la caracterización eléctrica de los dispositivos.

4.1.4. Caracterización eléctrica de nanoantenas

Otra manera de explorar nuevos usos para las nanoantenas es mediante caracterización eléctrica buscamos comparar las propiedades eléctricas en nanoantenas depositadas sobre diferentes sustratos: espejos fotónicos, esta vez diseñados mediante nuestro método de optimización estocástica, obleas de c-Si, monocapas de p-Si y un sustrato de óxido de silicio (SiO_2). Los espejos que diseñamos mediante el método de optimización estocástica fueron de dos tipos para reflejar en el cercano infrarrojo en los rangos $\Delta\Lambda$:

a) Espejo A: $\Lambda(1) = 4500$ nm, $\Lambda(f) = 5500$ nm, $\Lambda(n_i) = 4946$, $n_i = 2$, $n_s = 7$.

b) Espejo B: $\Lambda(1) = 2500$ nm, $\Lambda(f) = 3500$ nm, $\Lambda(n_i) = 3222$, $n_i = 4$, $n_s = 6$.

Fabricamos los espejos A y B con p-Si con las mismas condiciones experimentales descritas en el capítulo 2.1.1. Los espectros de reflectancia fueron medidos mediante un FTIR modelo Bruker Vertex 70 con módulo Hyperien y son mostrados en la figura 4.9.

Las monocapas que fabricamos tienen la propiedad de que el camino óptico no tiene múltiplos de ninguna Λ para evitar algún efecto de resonancia con las nanoantenas (como supusimos pasó con las monocapas anteriores). Escogimos que el espesor de las monocapas de p-Si M_A y M_B cumplieran con la condición: $d = \frac{\Lambda_i}{\phi}$, donde $\phi = 1.61803$ es el número áureo con $\Lambda_A = 5000$ y $\Lambda_B = 3000$ nm respectivamente. Esta condición fue escogida de esta manera para que estas monocapas no tuvieran ningún tipo de interferencia destructiva o constructiva con las ondas EM en las nanoantenas.

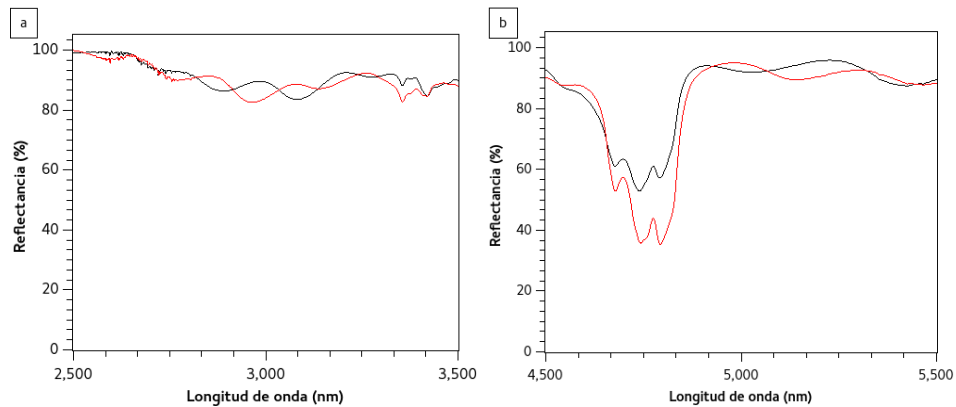


Figura 4.9: a) Espectros de reflectancia experimentales de los espejos B y b) de los espejos A.

Las nanoantenas que fabricamos sobre los nuevos sustratos se diferencian de las anteriores de plata en que estas son bimetalicas: una parte de platino y la otra de oro. La resonancia teórica de las nanoantenas se puede calcular usando la ecuación 4.1 tal que que las nanoantenas fabricadas sobre los espejos B con una longitud $L = 3.34\mu m$ tienen una resonancia máxima teórica de $3.3\mu m$, y las nanoantenas sobre los espejos A con una longitud $L = 7.3\mu m$ tienen una resonancia máxima teórica de $8.42\mu m$. Las nanoantenas con resonancia máxima en $3.3\mu m$ presentan un rango de resonancias desde 3.0 hasta $3.75\mu m$ y para las nanoantenas con la máxima en $8.42\mu m$ tienen un rango de resonancia desde 6.6 hasta $11.8\mu m$. Nuevamente, suponemos que la resonancia de las nanoantenas se superponen con la reflectancia de los espejos A y B ya que estos presentan un amplio rango de reflectancia.

En la figura 4.10 se muestra el arreglo de las nanoantenas que depositamos sobre los diferentes sustratos donde se distingue una línea que conecta todas las nanoantenas entre ellas. Esta línea se une a dos contactos de tamaño mucho mayor que las nanoantenas, que una vez conectados a una fuente de voltaje cierran el circuito permitiendo el flujo de una corriente.

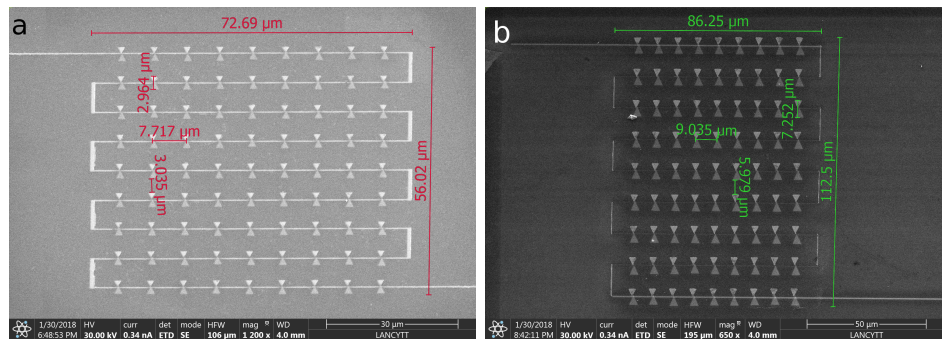


Figura 4.10: a) Arreglos de nanoantenas bimetálicas conectadas en serie sobre el espejo B y b) sobre el espejo A.

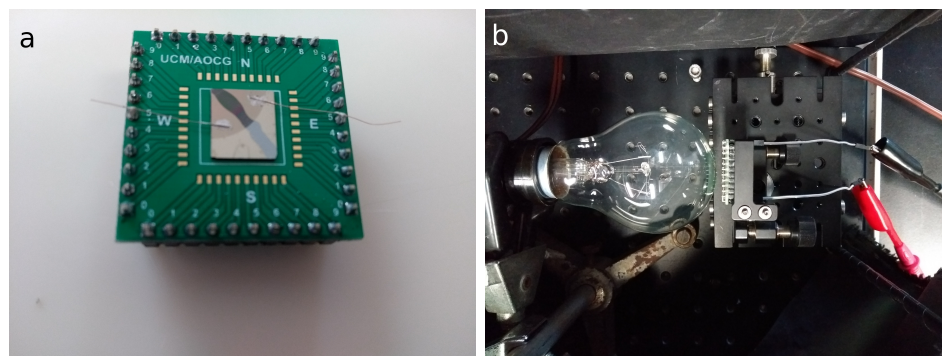


Figura 4.11: a) Chip con muestras de nanoantenas, b) Chip con nanoantenas conectado a un multímetro para medir el cambio en el voltaje.

Las muestras terminadas se montaron sobre un chip, como el mostrado en la figura 4.11 y con unos cables delgados y pintura conductiva de plata (Silver Conductive Pen CW2200STP, *Circuitworks*) se unieron los contactos al chip el cual sirve para conectar la muestra a una fuente de corriente o a un multímetro. A continuación describimos como realizamos la evaluación de las propiedades eléctricas de las nanoantenas.

Resultados y análisis de la caracterización eléctrica

Para evaluar el funcionamiento eléctrico de las nanoantenas sobre los diferentes sustratos realizamos mediciones del cambio de voltaje ΔV de las nanoantenas al ser sometidas a radiación infrarroja proveniente de un foco incandescente de 100 W. Como puede apreciarse en el arreglo mostrado en la figura 4.11b), el foco se montó frente al chip con las nanoantenas, las cuales se conectaron con caimanos a un multímetro para medir el ΔV generado en las nanoantenas. El voltaje en las nanoantenas es causado debido a que al incidir la radiación sobre ellas, los electrones libres son excitados y oscilan generando una corriente alterna que calienta las nanoantenas. Como las nanoantenas son bimetalicas, en la unión de los dos metales se crea un voltaje debido a la diferencia de temperatura causada por la oscilación de los electrones (efecto Seebeck). Si la diferencia de voltaje es suficientemente grande es posible medirlo con un multímetro. En los experimentos que realizamos, primero medimos la resistencia de cada muestra antes de ser sometida a la radiación y el voltaje inicial V_0 . Después prendimos el foco durante 3 minutos y medimos el voltaje final V_f .

En la tabla 4.2 mostramos el promedio de las mediciones de resistencia R , V_0 y $\Delta V = V_f - V_0$ de las nanoantenas sobre los diferentes sustratos de todos los experimentos realizados. Es importante mencionar que los resultados que mostramos corresponden únicamente a una muestra de cada tipo, de manera que no podemos asegurar reproducibilidad al no haber hecho experimentos con más muestras del mismo tipo. Estos resultados son preliminares y nos motivan a continuar con los estudios explorativos que hemos iniciado.

Tabla 4.2: Mediciones de R , V_0 y $\Delta V = V_f - V_0$ de las nanoantenas sobre diferentes sustratos al ser sometidas a radiación IR.

Sustrato	$R(\Omega)$	V_0 (mV)	ΔV (mV)
M_A	24.8	0.010	0.034
M_B	15.6	-0.007	0.048
Espejo A	45.9×10^3	0.002	0.085
Espejo B	48.54	0.014	0.045
c-Si	21.7	0.09	0.041
SiO_2	1.62×10^6	0.5	125

En la tabla 4.2 se aprecia un aumento mayor en el voltaje de las nanoantenas sobre el espejo fotónico A, en comparación con las monocapas y el c-Si, mostran-

do en estos resultados preliminares que el espejo ayuda al mejor funcionamiento eléctrico de las nanoantenas.

Por otro lado, notamos que las nanoantenas depositadas sobre el sustrato de SiO_2 tienen un cambio en el voltaje de varios órdenes de magnitud mayor que todos los demás sustratos. Estos sustratos de SiO_2 son los que usualmente se utilizan para depositar este tipo de nanoantenas ya que el SiO_2 es un muy buen aislante. Suponemos que hemos obtenido valores tan bajos de ΔV para p-Si debido a que el p-Si, con una conductividad térmica de aproximadamente $139 \frac{\text{W}}{\text{K}\cdot\text{m}}$ [76] no actúa como tan buen aislante como el SiO_2 con una conductividad térmica de $1.4 \frac{\text{W}}{\text{K}\cdot\text{m}}$. Debido a que el voltaje cambia por el aumento de temperatura de las nanoantenas al ser excitadas con la radiación, si el sustrato disipa mejor el calor, las nanoantenas no tendrán una diferencia de voltaje tan significativa como cuando el sustrato aísla el calor.

Con estos resultados y los obtenidos de la caracterización térmica concluimos que los espejos fotónicos posiblemente podrían ayudar a mejorar el desempeño de las nanoantenas al buscar un mejor acoplamiento entre ambos. Se requiere estudiar los efectos del sustrato sobre la resonancia y el funcionamiento de las nanoantenas bajo diferentes condiciones. Sin embargo, para todo esto es necesario un análisis más profundo que se sale de los objetivos de este proyecto de investigación.

En la siguiente sección se presenta otra aplicación de nuestro interés donde estudiamos algunos aspectos de la transferencia de calor en espejos para concentración solar.

4.2. Transferencia de calor en espejos para concentración solar

En los dispositivos de concentración solar es común el uso de espejos altamente reflectivos para redireccionar la radiación. Se ha probado la viabilidad de usar espejos hechos con p-Si como espejos secundarios en sistemas de concentración solar [3], sin embargo, estos espejos se calientan al ser sometidos a altas concentraciones de radiación solar. Motivados por este trabajo, realizamos anteriormente un estudio de la propagación de calor en espejos fotónicos hechos de multicapas de p-Si usando termografía, donde obtuvimos resultados cualitativos interesantes [77]. Ahí sometimos a diversos espejos fotónicos a radiación solar concentrada y medimos el aumento de temperatura de cada muestra usando una

cámara IR T300. El uso de termopares para estas aplicaciones no es adecuada ya que las muestras son muy frágiles, de manera que los métodos termográficos son los idóneos. En la figura 4.12 se muestran dos imágenes IR de las muestras que estudiamos en este trabajo. Como puede apreciarse el equipo que usamos no tiene una resolución térmica óptima y las muestras, marcadas con una cruz, no son adecuadamente perceptibles. Las imágenes IR se analizaron al considerar la evolución temporal de la temperatura de cada espejo. En la figura 4.12 (derecha) ejemplificamos el tipo de análisis, donde mostramos el incremento de temperatura en función de la difusividad térmica efectiva (α_{eff}) de cada espejo. Notamos que las mediciones son un promedio sobre el área de cada muestra y para estudiar cuantitativamente la transferencia de calor en los espejos fotónicos es necesario información más detallada del aumento de temperatura. En este contexto, nos interesa aportar un estudio más del transporte de calor en espejos de multicapas de p-Si y a continuación describimos los experimentos que realizamos para lograrlo.

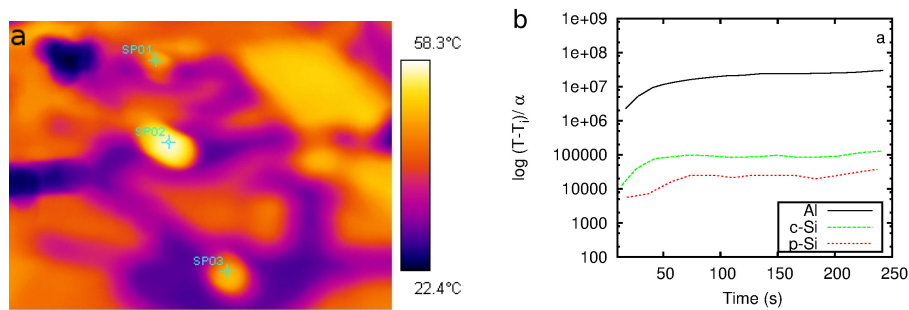


Figura 4.12: a) Imagen IR de tres espejos distintos sometidos a radiación solar concentrada. b) Medición de temperatura representativa de tres espejos sometidos a radiación solar concentrada. Los datos se analizaron considerando el aumento de temperatura en función de la difusividad térmica [77].

4.2.1. Experimentos de transferencia de calor en espejos fotónicos

Con ayuda de la cámara IR X6540sc y la lente de 5X es posible realizar experimentos más precisos para analizar cómo se propaga el calor a través de una estructura de multicapas. Para esto realizamos experimentos con el mismo arreglo experimental final que utilizamos para la caracterización térmica de las nanoantenas, descrito en la sección 4.1.2 y mostrado en la figura 4.13. Aquí

las muestras que fueron sometidas a la radiación del foco IR fueron montadas frente a la cámara de tal manera que se pudiera medir la temperatura de su sección transversal. Realizamos mediciones en diferentes muestras de un espejo optimizado de p-Si ($\Lambda(1) = 400\text{nm}$, $\Lambda(f) = 2000\text{nm}$, con las mismas condiciones que el espejo M_1 descrito en el capítulo 3.3) y de una oblea de c-Si.

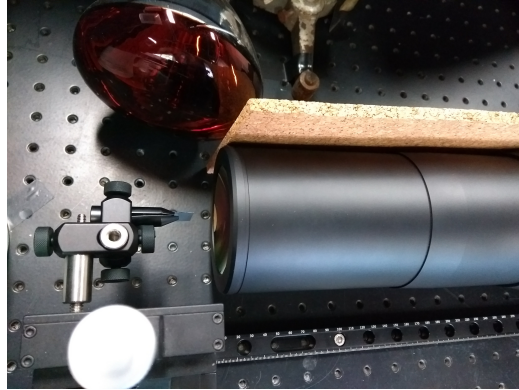


Figura 4.13: Arreglo experimental para medir la transferencia de calor en la sección transversal de un espejo fotónico de multicapas de p-Si y una oblea de c-Si.

Los experimentos que realizamos fueron ejecutados mediante la siguiente metodología:

- Iniciamos la toma de un video con la cámara IR de duración total de 3 minutos para cada muestra. La temperatura inicial (T_0) de las muestras era la del ambiente.
- Segundos después prendimos la lámpara IR calentando así la muestra hasta la conclusión de los 3 minutos.
- Dejamos enfriar la muestra hasta tener nuevamente la temperatura del ambiente.
- Repetimos el procedimiento 3 veces en diferentes secciones de cada muestra.

Los videos fueron analizados con el software ResearchIR 4. En cada video medimos la distribución de temperatura a lo largo de dos líneas transversales incluyendo una sección dentro y fuera de la muestra como mostrado en la figura 4.14. De

esta forma medimos la temperatura en función del número de pixeles que abarcan las líneas; el espejo abarca desde el pixel 1 hasta el pixel 24 aproximadamente y el c-Si desde el pixel 1 hasta el 19.

Después de analizar los datos observamos diferencias despreciables entre las mediciones de las dos líneas por lo que consideramos un promedio de las dos. Cabe mencionar que cada una de las mediciones se realizaron en diferentes lugares de cada muestra. Debido a que el perfil de temperatura cambia en el tiempo durante todo el video, comparamos únicamente tres imágenes IR que corresponden a las mediciones de temperatura al tiempo inicial $t_0 = 0$ min, al tiempo intermedio $t_m = 1.5$ min y al tiempo final $t_f = 3$ min. En la figura 4.14 se muestran tres imágenes IR en los tres tiempos característicos (t_0 , t_m y t_f) del experimento con un espejo fotónico centrado en la imagen con la radiación incidiendo por el lado derecho.

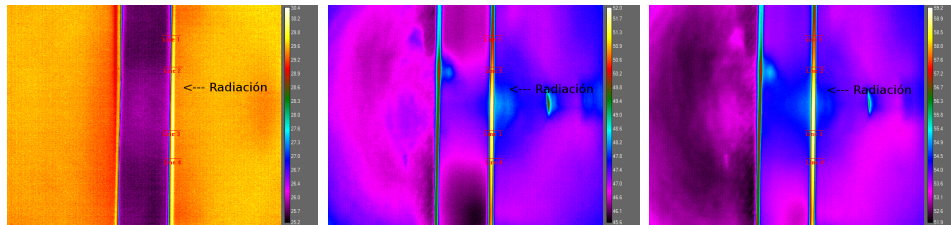


Figura 4.14: Imágenes IR de la sección transversal de un espejo de p-Si tomadas en los tres tiempos característicos del experimento: t_0 , t_m y t_f .

Nuevamente, para evitar los problemas antes mencionados con la emisividad y temperatura reflejada en las mediciones, definimos una normalización para el cambio de la temperatura $\Delta T(p)$ en función de cada pixel utilizando la siguiente relación:

$$\Delta T(p) = \frac{T(p) - T_{min}}{T_{max} - T_{min}}, \tag{4.10}$$

donde T_{max} es la temperatura máxima y T_{min} es la mínima en cada medición. A continuación se presentan los resultados que obtuvimos de los experimentos realizados.

Resultados

Realizamos los experimentos antes descritos para a) un espejo optimizado de multicapas de silico poroso con un espesor de $d= 22.6 \mu m$ con las mismas condiciones que el espejo M_1 ; cabe mencionar que el espejo se encuentra sobre un sustrato de c-Si y b) una oblea de c-Si (de las mismas características que el sustrato del espejo).

En las figuras 4.15 y 4.16 se muestra la comparación entre el cambio de la temperatura normalizada $\Delta T(p)$ de todas las mediciones en los espejos y en las muestras de c-Si en los tres tiempos característicos. Indicamos con una línea punteada vertical la posición donde se encuentra la interfaz entre las muestras y el aire. En las gráficas de los espejos se observan dos líneas punteadas indicando el área central donde se encuentra el espejo.

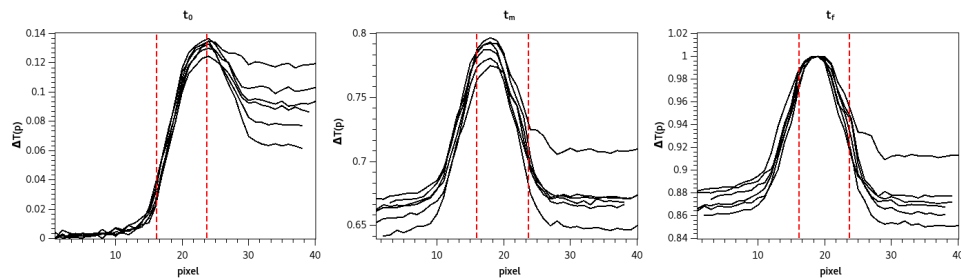


Figura 4.15: Cambio de temperatura $\Delta T(p)$ de la sección transversal de todas las mediciones del espejo fotónico en los tiempos característicos t_0 , t_m y t_f .

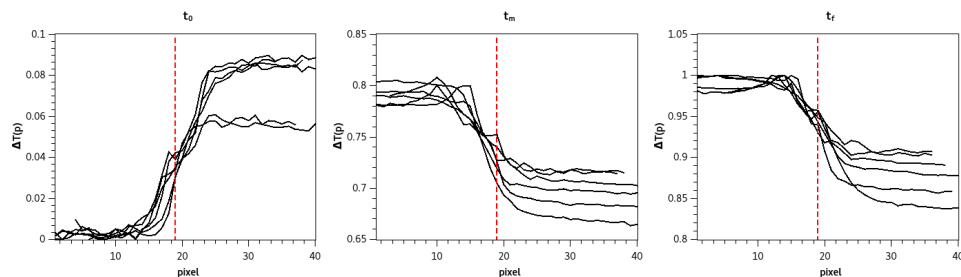


Figura 4.16: Cambio de temperatura $\Delta T(p)$ de la sección transversal de todas las mediciones del silicio cristalino en los tiempos característicos t_0 , t_m y t_f .

Al promediar todas las mediciones de cada muestra en los tiempos característicos podemos observar en la figura 4.17 el cambio de temperatura $\Delta T(p)$

del espejo fotónico y en la figura 4.18 del c-Si respectivamente.

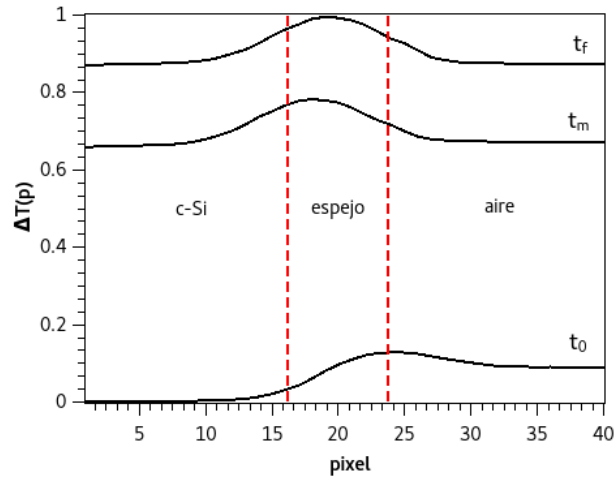


Figura 4.17: Promedio de todas las mediciones del cambio de temperatura $\Delta T(p)$ del espejo fotónico en los tres tiempos característicos. Las líneas rojas punteadas indican aproximadamente la interfaz entre el sustrato de c-Si, el espejo y el aire.

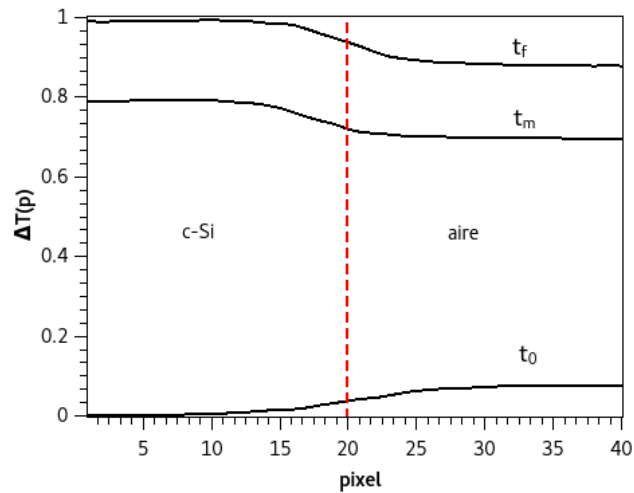


Figura 4.18: Promedio de todas las mediciones del cambio de temperatura $\Delta T(p)$ del c-Si en los tres tiempos característicos. La línea roja punteada indica la interfaz entre el c-Si y el aire.

Análisis

Las ondas EM que inciden en el espejo fotónico son una parte reflejadas y otras transmitidas a través de la estructura de multicapas. Las ondas EM de las mismas longitudes de onda que la brecha fotónica del espejo son reflejadas conforme atraviezan las capas de la nanoestructura interfiriendo destructivamente entre ellas. Las ondas EM de otras longitudes de onda se transmiten a través de las multicapas sin notar el efecto del espejo.

Mediante los experimentos realizados en este trabajo podemos mostrar el efecto de la radiación del foco IR sobre un espejo fotónico y sobre una oblea de c-Si. En el espejo fotónico, como puede observarse en la figura 4.17, las ondas EM absorbidas en el interior de las multicapas generan un aumento de temperatura dentro del espejo, y claramente se observa que no pueden pasar al resto del sustrato de c-Si. Por esta razón $\Delta T(p)$ es menor en el sustrato que en el espejo. En el caso del c-Si (figura 4.18), donde no hay ningún espejo, podemos observar que hay un incremento de temperatura creciente desde donde empieza la frontera de la muestra (indicado con la línea punteada). Recordemos que estas obleas de c-Si tienen una baja conductividad por lo que hay una tenue absorción que incrementa ligeramente la temperatura dentro de la oblea ante el paso de la radiación.

Con estos resultados hemos obtenido evidencia experimental para comprender mejor como interacciona la radiación IR con los espejos fotónicos para su uso en algún trabajo enfocado a aplicaciones de concentración solar. Con este estudio marcamos una pauta para a partir de él continuar explorando en un futuro la transferencia de calor en nanoestructuras de multicapas.

En la siguiente sección se presenta la tercer aplicación que exploramos en este trabajo: la fabricación de micromotores fotónicos con espejos de p-Si.

4.3. Micromotores fotónicos

Desde hace algunas décadas se han estudiado diferentes micromotores impulsados por la luz. Estos dispositivos aprovechan la presión que la radiación EM ejerce sobre una superficie dieléctrica para generar movimiento mecánico. Un ejemplo donde se utiliza la luz para producir una fuerza física son las pinzas ópticas, usadas para atrapar virus, bacterias o células [78]. Diversas aplicaciones para este tipo de motores han impulsado a varios grupos de investigación a desarrollar nuevos principios de funcionamiento, sin embargo la presión de la radiación es

demasiado pequeña para las aplicaciones deseadas. Para superar este obstáculo se pueden utilizar principios de resonancia para incrementar significativamente la fuerza de los micromotores. Para esto es posible utilizar una cavidad óptica de Fabry-Perot donde la fuerza solo aparece en las frecuencias resonantes de la estructura. Una cavidad óptica es un arreglo de espejos que forman un resonador, de manera que la luz confinada en la cavidad es reflejada múltiples veces produciendo una onda estacionaria para ciertas frecuencias de resonancia. Sólo ciertas frecuencias son sostenidas en el resonador, mientras que las otras son suprimidas por interferencia destructiva. Sin embargo, en este dispositivo la fuerza tiende a separar ambos espejos que forman la estructura mostrando como consecuencia una reducción de la fuerza [79].

Actualmente se ha desarrollado un enfoque diferente en el cual se utilizan espejos fotónicos 1D con defectos estructurales, donde modos localizados resultan en campos EM fuertes alrededor del defecto [80] aumentando así la fuerza tangencial y normal en la capa dieléctrica [81]. Recientemente una estructura de capas autoportadas de p-Si ha sido configurada para producir fuerzas que son 500 veces mayores a las medidas en pinzas ópticas convencionales [82]. Se puede utilizar este último enfoque para crear un dispositivo dinámico capaz de realizar auto-oscilaciones, u oscilaciones forzadas [83]. Este dispositivo vibrador puede formarse por dos espejos fotónicos de p-Si autoportados uno encima del otro, con una brecha de aire entre ellos. Este espacio de aire representa el defecto estructural en donde sólo radiación con cierta longitud de onda puede propagarse al quedar atrapada entre los espejos que la reflejan. Al chocar la radiación con los espejos ejerce presión sobre las capas de p-Si induciendo así oscilaciones mecánicas creando un micromotor.

En este trabajo hemos colaborado con el grupo de investigación dirigido por el Dr. J. Eduardo Lugo de la Universidad de Montreal fabricando los espejos autoportados para la formación de los micromotores fotónicos. Subsecuentemente realizaron estudios teóricos y experimentales para evaluar las oscilaciones formadas en los dispositivos [26,27]. A continuación se presentan las características de los espejos fotónicos autoportados que fabricamos para esta aplicación y se describen los aspectos más importantes de los experimentos y resultados que se obtuvieron.

Espejos autoportados para la formación de los micromotores

Las multicapas de p-Si autoportadas son estructuras muy frágiles y susceptibles a presentar cargas electrostáticas por lo que son difíciles de manipular. Para

lograr que las muestras sean autoportadas es necesario desprender la multicapa del sustrato aplicando una densidad de corriente de 550 mA/cm^2 durante 4 segundos. Posteriormente se elimina el electrolito de la celda electroquímica y la monocapa se coloca en etanol. Con ayuda de una pipeta se deposita la muestra autoportada de p-Si sobre un cubreobjetos de vidrio para facilitar su transporte y/o almacenamiento.

Para este estudio fabricamos 20 espejos autoportados de p-Si centrados en $\Lambda = 633 \text{ nm}$ (a la misma longitud de onda del láser utilizado en los experimentos) donde la mitad están formados por 6 periodos y los demás por 16 periodos. En la figura 4.19 se presentan los espectros de reflectancia experimentales de todos los espejos que enviamos al Dr. J.E. Lugo para la formación y experimentación de los micromotores como se describe a continuación.

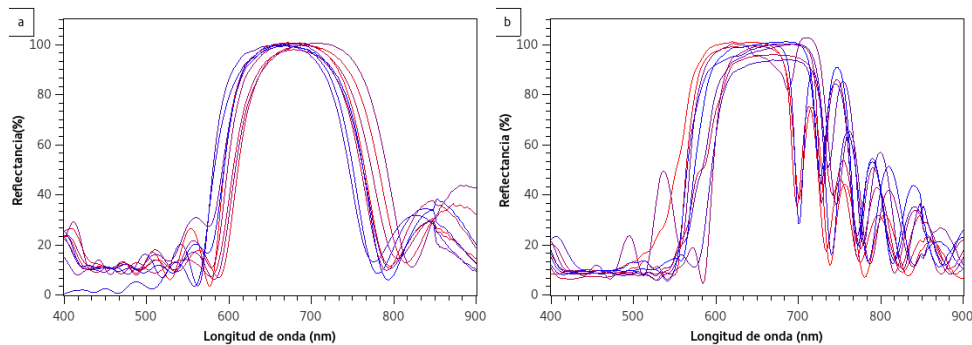


Figura 4.19: Espectros de reflectancia experimentales de espejos autoportados centrados en $\Lambda = 633 \text{ nm}$ formados por a) 6 periodos y b) 16 periodos.

El oscilador fotónico está formado por dos espejos de p-Si autoportados (sin el cubreobjetos) que fueron sujetos a un sustrato de vidrio con cinta adhesiva. Las membranas fueron adheridas desde lados opuestos como puede apreciarse en la figura 4.20 donde se muestra un esquema de cómo fue formado el micromotor. Debido a la forma en que se sobreponen los espejos, la separación L entre ellos no puede controlarse, sin embargo, en reportes previos [80] se midieron distancias entre $5 \mu\text{m}$ y 1 mm donde encontraron una dependencia entre las frecuencias que pueden acoplarse en la microcavidad con la longitud L de la misma.

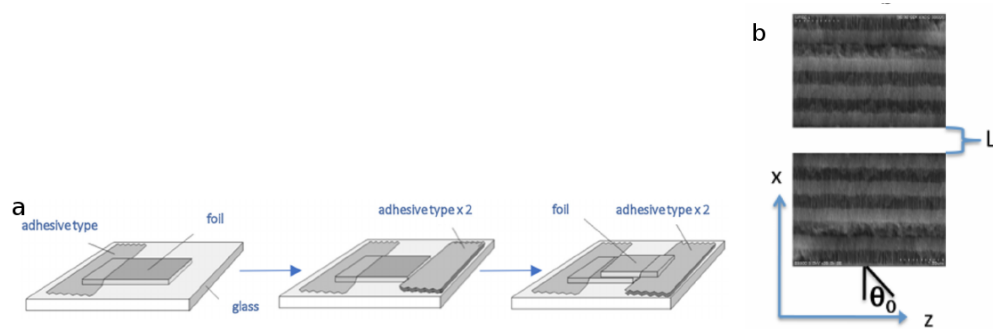


Figura 4.20: (a) Esquema del dispositivo vibrador formado por dos espejos de p-Si autoportados encimados [27], (b) Esquema de las multicapas de p-Si, donde cada una forma un espejo [83].

Oscilaciones autosostenidas en micromotores fotónicos

Cuando un sistema que recibe una fuerza comienza a oscilar éste se detiene después de cierto tiempo debido a fuerzas de fricción que amortiguan el movimiento. Si se continúa introduciendo energía al sistema, reponiendo la energía perdida, es posible contrarrestar la amortiguación logrando una oscilación autosostenida. Este tipo de sistemas se caracterizan porque la misma oscilación controla la fase con la cual actúa la fuente de energía que aplica la fuerza externa. Para lograr esto, por un lado se tiene un mecanismo regulador que controla el movimiento del sistema oscilatorio y por otro lado el movimiento mismo del sistema oscilatorio influye en la operación del mecanismo regulador [26].

En los experimentos que realizó el grupo de J. E. Lugo con los micromotores, incidieron la luz de un láser de $\lambda = 633 \text{ nm}$ sobre la estructura fotónica induciendo una vibración autosostenida. El impacto de la luz sobre la microcavidad crea una fuerza EM que empuja la estructura hacia abajo siendo el movimiento detectado por un vibrómetro de alta sensibilidad. Inmediatamente después la luz es bloqueada por medio de un “chopper” y la estructura regresa a su posición inicial lo cual permite nuevamente la incidencia de la luz y así sucesivamente. Una vez cerrado el ciclo el sistema oscila a diferentes frecuencias por un par de segundos y se estabiliza oscilando autosostenidamente a frecuencias específicas. En este trabajo en colaboración con J.E. Lugo et al. encontramos oscilaciones autosostenidas típicas de 16 Hz y 32 Hz [26]. Demostramos además mediante simulaciones computacionales y experimentos que no es necesario que las longitudes de onda de resonancia de la estructura fotónica coincida con la longitud

de onda del láser. Estimamos también dos propiedades mecánicas del p-Si de los experimentos realizados: la rigidez y el módulo de Young, encontrando resultados del mismo orden de magnitud que los reportados en la literatura.

Entre otros aspectos de los micromotores que hemos explorado en colaboración con el grupo de J.E. Lugo se destaca el estudio de oscilaciones forzadas en micromotores fotónicos donde analizaron la influencia de la modulación de la señal externa sobre el desempeño de estos dispositivos. A continuación se presentan los resultados más importantes obtenidos en ese trabajo [27].

Oscilaciones forzadas en micromotores fotónicos

Un sistema al cual se aplica continua y repetidamente una fuerza para generar oscilaciones en él es un oscilador forzado. Los micromotores fotónicos pueden presentar oscilaciones forzadas mediante un generador de señales que modula la forma y la frecuencia de la señal que incide sobre la estructura. En el arreglo experimental utilizado la señal de la luz incidente en el micromotor fue la convolución de la señal del láser con la del generador de señales. En este trabajo analizamos en colaboración con J.E. Lugo et al. tres tipos de formas de la onda de la señal proveniente del generador de señales: rectangular, sinusoidal y triangular; con el objetivo de encontrar las condiciones óptimas para la oscilación forzada en los micromotores. Estudiamos teórica y experimentalmente el sistema para tres frecuencias externas de 5 Hz, 10 Hz y 15 Hz. Los resultados que presentamos en el artículo [27] indicaron que para las dos frecuencias más bajas hubo un mayor desplazamiento de la estructura fotónica y una mayor amplitud de la velocidad cuando se utilizó una forma sinusoidal de la señal. Para el caso de la señal con una frecuencia de 15 Hz la mejor opción fue la señal con forma rectangular.

Los principios que estudiamos en estos trabajos podrían ser de utilidad en diversas aplicaciones como el uso de estructuras fotónicas sintonizables con dispositivos microelectromecánicos como sensores [27] o dispositivos que son activados únicamente con la luz [80]. Uno de los proyectos que buscamos explorar en un futuro es la fabricación de micromotores fotónicos magnéticos, donde el dispositivo vibrador está compuesto por dos espejos autosoportados con una capa delgada de oro sobre cada uno. El efecto de la capa metálica incrementa la fuerza EM que actúa sobre el micromotor mejorando así el desempeño del dispositivo fotónico.

Hemos expuesto en este capítulo la exploración de tres diferentes aplicaciones para estructuras fotónicas reflectivas donde hemos estudiado diferentes aspectos de cada uno mostrando la versatilidad en los usos de los espejos.

A continuación se presentan las conclusiones de esta tesis donde resumimos el trabajo y las aportaciones más destacadas que hemos presentado aquí.

Conclusiones

Las propiedades únicas de las estructuras fotónicas para controlar la propagación de la luz permiten la posibilidad de diseñar y fabricar dispositivos ópticos para una enorme variedad de aplicaciones. En particular, mediante la creación de estructuras que reflejan los rangos de longitudes de onda de la luz deseados, se ha explorado con gran éxito la utilización de espejos fotónicos en diferentes áreas. Sin embargo, su diseño implica generalmente procedimientos poco prácticos o dependientes de parámetros empíricos que restringen su empleo para varios materiales o diversos rangos de longitudes de onda. En este trabajo proporcionamos una novedosa y práctica metodología teórica y experimental para el diseño y la fabricación de espejos fotónicos unidimensionales. Mediante cálculos teóricos de los espectros de reflectancia de los espejos y utilizando una adaptación del modelo de espesores equidistantes logramos simulaciones más realistas que concuerdan mejor con los espectros experimentales. Aquí construimos los espejos con silicio poroso, material cuyas propiedades ópticas como su índice de refracción depende de sus condiciones de fabricación.

Debido a la necesidad de valores precisos del índice de refracción para la producción de espejos de alta calidad fotónica, en este trabajo presentamos diferentes métodos para su obtención: elipsometría espectroscópica y los más importantes modelos de medio efectivo. Demostramos mediante la evaluación del desempeño de los diversos índices obtenidos con un factor de calidad (factor- Q_e) que la aproximación de Bruggeman es la más adecuada para la determinación precisa de los índices de refracción del silicio poroso.

Para el diseño de los espejos fotónicos desarrollamos un método de optimización estocástica en búsqueda de la mejor configuración de las capas y subespejos que los conforman, considerando los tres parámetros estructurales de opti-

mización: $\Lambda(n_i), n_s, n_i$. Para esto implementamos un algoritmo híbrido que realiza una búsqueda combinada de tres métodos: búsqueda aleatoria, optimización de enjambre de partículas y recocido simulado. El espacio de soluciones de todas las posibles estructuras fotónicas es explorado con respecto al máximo de un criterio de desempeño definido como la integral de sus espectros de reflectancia teóricos. Realizamos la evaluación de nuestro método de diseño fabricando tres tipos de espejos fotónicos con silicio poroso y mediante una función de mérito medimos cuantitativamente las diferencias entre los espectros de reflectancia teóricos y experimentales. Los resultados muestran una muy buena concordancia entre ambos confirmando así la viabilidad de nuestro método de optimización. Deseamos resaltar que el método de optimización que hemos desarrollado para las estructuras fotónicas puede ser empleado para diseñarlas con diferentes materiales y, por lo tanto, no está restringido a estructuras de silicio poroso.

Adicionalmente exploramos tres aplicaciones donde pueden utilizarse estructuras fotónicas reflectivas unidimensionales que abren líneas de investigación prometedoras. Primero estudiamos experimentalmente el uso de espejos fotónicos acoplados a nanoantenas para investigar el desempeño de los dispositivos para capturar radiación. Con este objetivo, realizamos una caracterización térmica con una cámara termográfica de alta resolución espacial donde medimos el cambio de temperatura de las nanoantenas depositadas sobre diferentes sustratos. Encontramos que las nanoantenas fabricadas sobre los espejos fotónicos presentan un aumento mayor de temperatura que las que se encuentran sobre sustratos de c-Si. El aumento de temperatura está asociado a que los espejos reflejan parte de la radiación hacia las nanoantenas y estas capturan mayor energía. Queremos enfatizar que las mediciones de temperatura en estos pequeños dispositivos es compleja porque no se conocen los parámetros de interacción radiación materia en detalle. Debido a las dificultades que se presentaron para realizar las mediciones de temperatura propusimos un procedimiento de análisis de datos donde implementamos una normalización de las mediciones. Utilizando esta metodología no es necesario determinar valores de emisividad de las muestras ya que la normalización es independiente de dichos valores. De esta forma presentamos una novedosa manera de sobrellevar problemas experimentales relacionados a la medición de la temperatura.

También exploramos algunas propiedades eléctricas de nanoantenas bimetálicas depositadas sobre espejos optimizados y otros sustratos. Realizamos experimentos donde medimos el efecto de la radiación sobre el aumento del voltaje de las nanoantenas y los resultados, a pesar de no ser concluyentes, indican una posible mejora en la respuesta eléctrica gracias a los espejos fotónicos. Además,

mostramos que el mejor sustrato para el depósito de nanoantenas bimetálicas es el SiO₂ debido a su baja conductividad térmica.

Con este trabajo demostramos que el problema de evaluar el desempeño de las nanoantenas tiene muchas complejidades. Los resultados que obtuvimos aquí nos permiten visualizar los aspectos que hacen falta analizar y mejorar en un futuro, como por ejemplo, la búsqueda de un mejor acoplamiento entre las nanoantenas y las estructuras fotónicas.

Por otro lado, también realizamos un estudio preliminar de la transferencia de calor en espejos optimizados para su uso en aplicaciones de concentración solar. Aquí analizamos experimentalmente el aumento de la temperatura en una sección transversal de un espejo fotónico y una oblea de silicio poroso mostrando, mediante un análisis espacial de la temperatura, cómo interacciona la radiación con ambas muestras. Los resultados del aumento de la temperatura coinciden con el efecto óptico en un espejo de multicapas que no permite la incidencia de la radiación en su estructura. Con este estudio marcamos una pauta para a partir de él continuar explorando en un futuro la transferencia de calor en estructuras fotónicas unidimensionales.

Por último, en colaboración con el grupo de investigación de J.E. Lugo fabricamos espejos autosoportados de p-Si para la producción de micromotores fotónicos logrando dispositivos que oscilan mecánicamente con la incidencia de la luz. Analizamos de forma teórica y experimental oscilaciones autosustentadas y forzadas en los micromotores fotónicos aportando mayor información sobre estos para su uso en otras posibles aplicaciones.

Bibliografía

- [1] J.D. Joannopolous, S.G. Johnson, J.N. Winn, R.D. Meade, Photonic Crystals, *Princeton University Press*, 2nd ed. (2008).
- [2] I. Chambouleyron, J. M. Martínez, Optical properties of dielectric and semiconductor thin films, *Handbook of Thin Films Materials*, Chapter 12, Volume 3, Academic Press (2001).
- [3] M.B. de la Mora, O.A. Jaramillo, R. Nava, J. Tagüeña Martínez & J. A. del Río. *Sol. Energ. Mat Sol. C.* **93**, 1218, (2009).
- [4] Kumara, V. Anisb, M. Singha, Kh. S. & Singhb, G. Large range of omnidirectional reflection in 1D photonic crystal heterostructures. *Optik* **122**, 2186-2190 (2011).
- [5] Zhanga, H. Liua, S. Konga, X. Biana, B. & Zhaoa, H. Properties of omnidirectional photonic band gap in one-dimensional staggered plasma photonic crystals. *Opt. Commun.* **285**, 5235- 5241 (2012).
- [6] Mouldi, A. & Kanzari, M. Design of an omnidirectional mirror using one dimensional photonic crystal with graded geometric layers thicknesses. *Optik***123**, 125 131 (2012).
- [7] Ariza-Flores, A. D. Gaggero-Sager, L. M. & Agarwal V. White metal-like omnidirectional mirror from porous silicon dielectric multilayers. *Appl. Phys. Lett.* **101**, 031119 (2012).

- [8] Archuleta-Garcia, R. Moctezuma-Enriquez, D. & Manzanares-Martinez, J. Enlargement of Photonic Band Gap in Porous Silicon Dielectric Mirrors. *J. of Electromagn. Waves and Appl.* **24** 351361 (2010).
- [9] P. Christensen, A. Klarbring, An introduction to Structural Optimization, Solid Mechanics and its Applications, *Springer* (2009).
- [10] Kang, K. et al. A Simple Numerical Modeling of the Effect of the Incoherent Thick Substrate in Thin-Film Solar Cells Based on the Equispaced Thickness Method. *IEEE Photonics J.* **8** 5, 8400312 (2016).
- [11] A. Birner, R. B. Wehrspohn, U. M. Gösele & K. Busch, Silicon-Based Photonic Crystals, *Adv. Mater.*, **13** 6 (2001).
- [12] O. Bisi, S. Ossicini, & L. Pavesi. Porous silicon: a quantum sponge structure porous silicon based optoelectronics. *Surface Science Reports* 38:1126, (2000).
- [13] V. Torres-Costa & R.J. Martín-Palma, *J. Mater. Sci.* **45**, 2823 (2010).
- [14] D. Estrada-Wiese & J.A. del Río, Refractive index evaluation of porous silicon using Bragg reflectors, *Rev. Mex. Fis.* **64**, 7281 (2018).
- [15] Estrada-Wiese, D. et al. Staggered Padé wavelength distribution for multi-Bragg photonic mirrors, *Sol. Energ. Mater. Sol. Cells* **141** 315321 (2015).
- [16] V. Agarwal & J.A. del Río, Filters, Mirrors and Microcavities from Porous Silicon. *Int. J. Modern Phys. B* **20**(1), 99- 110 (2006).
- [17] Z. Montiel-González, S. Escobar, R. Nava, J.A. del Río & J. Tagüeña-Martínez, *Sci. Rep* **6** 24798 (2016).
- [18] Li, J. White, T. P. OFaolain, L. Gomez-Iglesias, A. & Krauss, T. F. Systematic design of flat band slow light in photonic crystal waveguides. *Opt. Express* **16** (9), 6227-6232 (2008).
- [19] A. Shokrollahia & M. Zare, Fabricating optical waveguide based on porous silicon structures, *Optik* **124** 9, 855-858 (2013).
- [20] S. Escobar Guerrero, Fotoluminiscencia en multicapas fotónicas de silicio poroso, Tesis de Maestría en Ingeniería por la UNAM, (2013).

- [21] W. H. Zheng, P. Reece, B. Q. Sun, & M. Gal. Broadband laser mirrors made from porous silicon, *Appl. Phys. Lett.*, **84**, 18, (2004).
- [22] D. Estrada-Wiese, E.A. del Río-Chanona & J.A. del Río, Stochastic optimization of broadband reflecting photonic structures, *Sci. Rep* **8**, 1193 (2018).
- [23] F. A. Harraz, Porous silicon chemical sensors and biosensors: A review, *Sens Actuators B Chem.*, **202** 31, 897-912 (2014).
- [24] S.M. Weiss, G. Rong & J.L. Lawrie, *Physica E* **41** 1071 (2009).
- [25] E. R. Brown, O. B. McMahon, & C. D. Parker, Photonic-Crystal Antenna Substrates, *Lincoln Lab Journal*, **11**, 2,(1998).
- [26] N. Sánchez-Castro, M. A. Palomino-Ovando, D. Estrada-Wiese, J. A. del Río, M. B. de la Mora, R. Doti, J. Faubert, & J. E. Lugo, A photonic self-oscillator based on porous silicon, *Mesoporous Biomater*, **3**,1526 (2016).
- [27] N. Sánchez-Castro, M. A. Palomino-Ovando, D. Estrada-Wiese, N. Xcaret, J.A. del Río, M.B. de la Mora , R. Doti, J. Faubert & J.E. Lugo, The Influence of the External Signal Modulation Waveform and Frequency on the Performance of a Photonic Forced Oscillator, *Materials* **11**, 854 (2018).
- [28] Hecht, E. Óptica (Adelphi University 2002), Chap.9.
- [29] M. Claudia Troparevsky, Adrian S. Sabau, Andrew R. Lupini & Zhenyu Zhang: Transfer-matrix formalism for the calculation of optical response in multilayer systems: from coherent to incoherent interference. *Opt. Express* **18**, 24715 (2010).
- [30] M.B. de la Mora et al.:Anomalous patterned scattering spectra of one-dimensional porous silicon photonic crystals.*Opt. Express* **18**, 22808 (2010).
- [31] Ma. Beatriz de la Mora Mojica, Transmisión anómala de multicapas de silicio poroso. *Tesis doctoral en Ingeniería y Ciencias de Materiales*, UNAM (2011).
- [32] M. Christophersen, V. Kochergina & P. R. Swinehart, Porous silicon filters for mid-to-far IR range, *Proc. of SPIE*, **5524**, 158-168 (2004).

- [33] M. B. de la Mora, M. Ocampo, R. Doti, J. E. Lugo & J. Faubert (2013), ISBN: 978-953-51-1004-0, *InTech*, DOI: 10.5772/52975. Available from: <http://www.intechopen.com/books/state-of-the-art-in-biosensors-general-aspects/porous-silicon-biosensors>
- [34] F.A. Harraz, Porous silicon chemical sensors and biosensors: A review, *Sens. Actuator. B-Chem.* **202**, 897 (2014).
- [35] J. Charrier, P. Pirasteh, Y.G. Boucher & M. Gadonna, *Micro Nano. Lett.* **7**, 2, 105 (2012).
- [36] H. Zhang, A. Jia, X. Lv & Y. Liu, Design, analysis and optimization of porous silicon microcavity based on silicon-on-insulator at optical communication wavelengths, *Optik* **125** 557-560 (2014) .
- [37] R.S. Dubey & D.K. Gautam, Synthesis and characterization of porous silicon layers for 1D photonic crystal application *Optik* **122** 494-497 (2011).
- [38] R. Cisneros, C. Ramírez & Ch. Wang, Ellipsometry and ab initio approaches to the refractive index of porous silicon, *J. Phys.: Condens. Matter.* **19** 395010 (2007).
- [39] A. Shokrollahi, M. Zare, A. Mortezaali & S. Ramezani Sani, Analysis of optical properties of porous silicon nanostructure single and gradient-porosity layers for optical applications, *J. Appl. Phys.* **112** 053506 (2012).
- [40] M.C. Arenas, H. Hu, R. Nava & J.A. del Río, Determination of the complex refractive index of porous silicon layers on crystalline silicon substrates, *Int. J. Mod. Phys. B*, **24**, 4835 (2010).
- [41] E. Xifré-Pérez, E. Garcia-Caurel, J. Pallarés, J. Ferré-Borrull & L.F. Marsal, Wide-band reflection nanoporous silicon multilayers with ellipsometric investigation of the material monolayer components, *Mater. Sci. Eng. B* **147**, 205 (2008).
- [42] Ellipsometry software CompleteEASE by J.A. Woollam <https://www.jawoollam.com/ellipsometry-software/completeease>
- [43] H. Sohn, Handbook of Porous Silicon:Refractive Index of Porous Silicon, (Springer International Publishing Switzerland 2014), pp. 1-10.

- [44] A. Wolf, B. Terheiden & R. Brendel, Light scattering and diffuse light propagation in sintered porous silicon, *J. Appl. Phys.* **104**, 033106 (2008).
- [45] J.A. del R o, R.W. Zimmerman, & R.A. Dawe, *Soli. S. Communi.* **106**, 4, 183 (1998).
- [46] N.J. Hutchinson, T. Coquil, A. Navid & L. Pilon, Effective optical properties of highly ordered mesoporous thin films, *Thin Solid Films* **518**, 2141 (2010).
- [47] W. Theifl, Optical properties of porous silicon, *Surf. Sci. Rep.* **29** 91 (1997).
- [48] M. Khardani, M. Boua cha & B. Bessa s, Bruggeman effective medium approach for modelling optical properties of porous silicon: comparison with experiment , *Phys. Stat. Sol. (C)* **4**, 6, 1986 (2007).
- [49] C. Honsberg & S. Bowden, Optical Properties of Silicon, <http://www.pveducation.org/pvcdrom/materials/optical-properties-of-silicon/> (accessed 04/07/2017).
- [50] M. Polyanskiy, Refractive index of Air (2008), <http://refractiveindex.info/?shelf=other&book=air&page=Ciddor> (accessed 04/07/2017)
- [51] V. Agarwal & J.A del R o, Tailoring the photonic band gap of a porous silicon dielectric mirror, *Appl. Phys. Lett.*, **82**, 10, 1512 (2003).
- [52] R. Nava, M.B. de la Mora, J. Tag e na- Mart nez & J.A. del R o, Refractive index contrast in porous silicon multilayers, *Phys. Status. Solidi. C* **6**, 1721 (2009).
- [53] Jensen, J. S. & Sigmund, O. Topology optimization for nano-photonics. *Laser Photonics Rev.* **5**(2), 308321 (2011).
- [54] Jensen, J.S. Topology optimization of dynamics problems with Pad  approximants. *Int. J. Numer. Meth. Engng* **72**, 16051630 (2007).
- [55] Dahl, J. Jensen, J. S. & Sigmund, O. Topology optimization for transient wave propagation problems in one dimension. *Struct. Multidisc. Optim.* **36**, 585595 (2008).

- [56] Smajic, J. Hafner, C. & Erni, D. Optimization of photonic crystal structures. *J. Opt. Soc. Am. A* **21**(11), 22232232 (2004).
- [57] Li, G., Niu, P., & Xiao, X. Development and investigation of efficient artificial bee colony algorithm for numerical function optimization. *Appl Soft Comput.* **12** 1, 320332 (2012).
- [58] Jason Brownlee, *Clever Algorithms: Nature-Inspired Programming Recipes*,(2015) available: http://www.cleveralgorithms.com/nature-inspired/stochastic/random_search.html
- [59] Zambrano-Bigiarini, M., Clerc, M., & Rojas, R. Standard Particle Swarm Optimisation 2011 at CEC-2013: A baseline for future PSO improvements. In 2013 IEEE Congress on Evolutionary Computation (pp. 23372344). IEEE (2013).
- [60] Xiang, Y., & Gong, X. G. Efficiency of generalized simulated annealing. *Phys. Rev. E.* **62** 3, 44734476 (2000).
- [61] Wolpert, D. H., & Macready, W. G. No free lunch theorems for optimization. *IEEE Trans. Evol. Comput.* **1** 1, 6782 (1997).
- [62] U.C. Hasar, I.Y. Ozbek, E.A. Oral, T. Karacali & H. Efeoglu, *Opt. Express* **20**, 20, 22208 (2012).
- [63] M. V. Sosnova, S. V. Mamykin, A. V. Korovin & N. L. Dmitruk. *Hybridization of Surface Plasmon Polariton and Photonic Crystal Modes in Bragg Mirror with Periodically Profiled Metal Film*, *Nanoscale Res. Lett.*, 11:144, (2016).
- [64] V. Giannini, A. I. Fernández-Domínguez, S. C. Heck & S. A. Maier, Plasmonic Nanoantennas: Fundamentals and Their Use in Controlling the Radiative Properties of Nanoemitters, *Chem. Rev.* **111**, 38883912 (2011).
- [65] W. L. Barnes, A. Dereux & T. W. Ebbesen, Surface plasmon subwavelength optics, *Nature* **424**, 824-830 (2003).
- [66] C. Hrelescu, T. K. Sau, A. L. Rogach, F. Jäckela & J. Feldmann, Single gold nanostars enhance Raman scattering, *Appl. Phys. Lett.* **94**, 153113 (2009).

- [67] S. Lee, EuiJoon Cha, K. Park, SeungYoung Lee, JinKi Hong, InCheol Sun, S.Y. Kim, K. Choi, I.C. Kwon, K. Kim, CheolHee Ahn, A NearInfrared-FluorescenceQuenched GoldNanoparticle Imaging Probe for InVivo Drug Screening and Protease Activity Determination, *Angew. Chem., Int.* **47**, 2804 (2008).
- [68] E. Briones, A. Cuadrado, J. Briones, R. Díaz de León, J. C. Martínez-Antón, S. McMurtry, M. Hehn, F. Montaigne, J. Alda, & F. J. González, Seebeck nanoantennas for the detection and characterization of infrared radiation, *Opt. Express*, **22**,S6 (2014).
- [69] L. Novotny, N. van Hulst, Antennas for light, *Nature Photon.* **5**, 83-90 (2011).
- [70] Botjan Beri, Introduction to Electron Beam Lithography, <https://pdfs.semanticscholar.org/d7c0/a9f87875c62525a02b6764af719557319514.pdf>
- [71] F. J. González, J. Alda, J. Simón, J. Ginn, & G. Boreman, The effect of metal dispersion on the resonance of antennas at infrared frequencies, *Infra. Phys. & Tech.* **52** 4851 (2009).
- [72] B. Mora-Ventura, R. Díaz de León, G. García-Torales, J. L. Flores, J. Alda, % F. J. González, Responsivity and resonant properties of dipole, bowtie, and spiral Seebeck nanoantennas, *J. of Photon. Energy*, **6** (2),(2016).
- [73] The Ultimate Infrared Handbook for R&D Professionals, FLIR Systems, Inc.,(2012). Available: [https://www.flirmedia.com/MMC/THG/Brochures/T559243/T559243\\$_EN.pdf](https://www.flirmedia.com/MMC/THG/Brochures/T559243/T559243$_EN.pdf)
- [74] R. Usamentiaga, P. Venegas, J. Guerediaga, L. Vega, J. Molleda y F.G. Bulnes, Infrared Thermography for Temperature Measurement and Non-Destructive Testing, *Sensors*, **14**, 12305-12338, (2014).
- [75] M. Vollmer, S. Henke, D. Karstdt, K.-P. Millmann, & F. Pinno, Identification and Suppression of Thermal Reflections in Infrared Thermal Imaging. *InfraMation 2004 Proceedings*, ITC 104 A 2004-07-27.
- [76] D. Estrada-Wiese, Propagación de calor en multicapas de silicio poroso, Tesis de Licenciatura en Ciencias (Física),por la UAEM (2012).

- [77] D. Estrada- Wiese, J. A. del Río & M. B. De la Mora, Heat transfer in photonic mirrors, *J Mater Sci: Mater Electron* **25**, 4348- 4356 (2014).
- [78] M.C. Williams, Optical Tweezers: Measuring PicoNewton Forces, *Biophysics Textbooks Online*, (2002) <http://www.biophysics.org/Portals/1/PDFs/Education/williams.pdf>
- [79] M.L. Povinelli, M. Ibanescu, S.G. Johnson & J.D Joannopoulos, Slow-light enhancement of radiation pressure in an omnidirectional reflector waveguide, *Appl. Phys. Lett.* **85**, 1466-1468 (2004).
- [80] J.E. Lugo, R. Doti, N. Sanchez, M.B. de la Mora, J.A. del Río, & J. Faubert, The bifoil photodyne: a photonic crystal oscillator, *Sci. Rep.* **4**, 3705- 3711 (2014).
- [81] J.M. Li, T.L. Dong, & G. J. Shan, Enhancement of electromagnetic force by localized fields in one-dimensional photonic crystals, *PIER M* **10**, 59-70 (2009).
- [82] J. E. Lugo, R. Doti, N. Sanchez, & J. Faubert, Increasing light induced forces with photonic crystals, SPIE Newsroom (2015).
- [83] J.E. Lugo, R. Doti, N. Sanchez, & J. Faubert, Inducing forced and auto-oscillations in one- dimensional photonic crystals with light, *J. Nanophoton.* **8** (2014).