

**Projecte Final de Carrera**  
*Enginyeria Superior de Telecomunicacions*

**Estudio de cristales y cuasi-  
cristales fotónicos basados en  
silicio macroporoso**

**David Hernández García**

**Dirigit pel Doctor Trifon Trifonov**  
*Grup de Recerca en Micro i Nanotecnologies,  
Departament d'Enginyeria Electrònica, UPC*



# Índice

Agradecimientos .....	ii
Introducción .....	1
Capítulo I. Estado del Arte .....	3
1. Cristales fotónicos .....	3
1.1. Electromagnetismo en medios de constante dieléctrica variable .....	4
1.2. Espacio recíproco y zona de Brillouin .....	5
1.3. Cuasi-cristales .....	7
2. Silicio macroporoso .....	8
2.1. Preparación previa de las muestras .....	10
2.2. El set-up electroquímico .....	11
2.3. Morfología del cristal .....	12
2.4. Procesos posteriores al ataque electroquímico .....	14
Capítulo II. Propiedades ópticas de los cristales fotónicos .....	16
1. Cristales fotónicos bidimensionales .....	17
1.1. El contraste dieléctrico .....	18
1.2. La porosidad de la estructura .....	19
2. Cristales fotónicos tridimensionales .....	23
2.1. La modulación senoidal .....	23
2.2. Parámetros intrínsecos de la modulación .....	24
2.3. Parámetros de la estructura finita .....	26
2.4. Defectos en la dirección de propagación .....	28
2.5. Fabricación de cristales fotónicos 3D mediante silicio macroporoso ..	29
Capítulo III. Propiedades ópticas de los cuasi-cristales fotónicos .....	31
1. Cuasi-cristales de Fibonacci .....	33
1.1. Propiedades de la serie de Fibonacci. Secuencias periódicas .....	34
1.2. Propiedades de la serie de Fibonacci. Secuencias cuasi-periódicas .....	37
1.3. Fabricación de los cuasi-cristales .....	38
2. Cristales fotónicos chirped .....	42
2.1. Comportamiento óptico de los cristales chirped .....	43
2.2. Fabricación de cristales chirped .....	45
Conclusiones. Trabajo futuro .....	47
Anexo I. Métodos de caracterización experimental .....	50
1. Espectroscopía infrarroja por transformada de Fourier .....	50
2. Caracterización morfológica .....	52
Anexo II. Aplicaciones .....	53
1. Cristales fotónicos unidimensionales. Filtrando la luz .....	54
2. Cristales fotónicos bidimensionales. Guiando la luz .....	56
3. Cristales fotónicos tridimensionales. Controlando la emisión de luz .....	58
Anexo III. Set-up de fabricación .....	60
Bibliografía .....	63

## **Agradecimientos.**

El trabajo que será presentado en este documento no hubiera sido posible sin la colaboración, ayuda y apoyo del *Grup de Recerca en Micro i Nanotecnologies, Departament d'Enginyeria Electrònica de la Universitat Politècnica de Catalunya*. Por ello quiero agradecer muy especialmente a todas las personas con las que he trabajado durante este año y medio dedicado al estudio, diseño y fabricación de los cristales fotónicos que serán presentados.

Quisiera agradecer al Dr. Ramon Alcobilla la confianza que depositó en mi desde el primer día, aunque en aquella primera entrevista quedara claro que yo no sabía nada sobre los cristales que hoy nos atañen. También le debo que me aconsejara matricularme en el MSc in Photonics, a través del cuál he aprendido mucho sobre fotónica y he descubierto cuánto me motiva e interesa el tema.

Quisiera agradecer también al futuro doctor Moisés Garín todos los consejos que me dio en aquellos momentos en los que más perdido me encontraba, o con menos idea de por dónde encaminar mi estudio. Siempre recordaré que para hacer una buena litografía todo debe estar impoluto en el laboratorio.

Finalmente, quisiera agradecer muy especialmente al Dr. Trifon Trifonov todo el apoyo que me ha brindado, tutelándome a lo largo de todo el proyecto, y transmitiéndome día a día sus conocimientos. Sin duda, este proyecto no sería lo que es si no hubiera contado con su colaboración (y paciencia en muchas ocasiones). Si hoy sé lo que sé y soy capaz de hacer lo que soy capaz de hacer es indudablemente gracias a ti. Muchas gracias.



## **Introducción.**

Muchos de los avances en tecnología han provenido del conocimiento profundo de las propiedades de los materiales. Más allá del aprovechamiento de las características de aquello con lo que nos provee la naturaleza, la ingeniería ha alcanzado hoy en día una cota de desarrollo en la que podemos, partiendo de los materiales existentes, diseñar y producir substancias y elementos cuyas propiedades pueden ser debidamente ajustadas.

Actualmente disponemos de un amplio abanico de materiales artificiales cuyas propiedades mecánicas pueden ser ajustadas a un diseño dado, gracias en gran parte al desarrollo de la industria metalúrgica, de la cerámica y de la industria del plástico. Del mismo modo, durante el último siglo, los investigadores han estado trabajando para poder controlar las propiedades eléctricas de los materiales. Los avances de la industria de los semiconductores han permitido revolucionar el mundo de la electrónica y las comunicaciones, a partir del desarrollo entre otros dispositivos, del transistor.

En las últimas dos décadas, por su parte, ha surgido una nueva frontera de desarrollo: controlar las propiedades ópticas de los materiales. Si somos capaces de realizar materiales que impidan la propagación de ciertas ondas electromagnéticas, con una cierta longitud de onda, o que permitan su transmisión pero solamente en unas determinadas direcciones del espacio, o si somos capaces de atrapar y localizar dichas ondas en una región concreta del espacio, entonces seremos capaces de controlar y prever el comportamiento de dichas señales, y el desarrollo tecnológico proseguirá su avance.

Pero, qué clase de materiales nos permiten controlar la propagación de las señales ópticas? Para obtener una respuesta a la pregunta es conveniente repasar ciertos detalles sobre aquellos materiales cuyas propiedades eléctricas, como ya hemos comentado, pueden ser controladas: un cristal es una disposición periódica de átomos o moléculas, es decir, un cristal se forma cuando un elemento básico de la estructura se repite en el espacio ordenada y periódicamente. A causa de esta ordenación, un cristal presenta un potencial periódico para la propagación de electrones a través suyo, y es precisamente esta geometría periódica la que determina la mayor parte de las propiedades conductivas del material.

El equivalente óptico del cristal semiconductor es el cristal fotónico. En este tipo de cristales, el potencial periódico en los semiconductores es equivalente a una variación periódica de la constante dieléctrica a lo largo del cristal fotónico. Si esta variación de la constante dieléctrica en el interior de la estructura es lo suficientemente grande, y la absorción del material a la longitud de onda a la que pretendemos trabajar lo suficientemente pequeña, entonces aparecen, para la propagación de los fotones, muchas de esas mismas propiedades que los cristales semiconductores determinan para la propagación de los electrones.

De este modo, una solución para el diseño de materiales con nuevas e inusuales propiedades ópticas es, pues, el cristal fotónico: un material de constante dieléctrica variable, periódica y ordenada, de bajas pérdidas por absorción, y que permita introducir gaps (es decir, bandas prohibidas) en determinadas zonas del espectro en las cuales se prohíba la propagación de ondas con determinada energía.

El objetivo del presente proyecto es el de estudiar las propiedades ópticas de una variedad de estructuras fotónicas en función de sus parámetros de diseño, basándonos en la tecnología del silicio macroporoso, con el fin de modelar un comportamiento óptico que dé lugar a aplicaciones concretas. El proyecto se centra en el diseño de estructuras fotónicas, en la fabricación de dichas estructuras mediante el método de ataque electroquímico del silicio, y en su posterior caracterización óptica experimental. El análisis teórico de las estructuras tiene la finalidad de optimizar las mismas. El análisis experimental de las estructuras tiene la finalidad de dar validez a los resultados teóricos presentados.

Debe quedar claro que el objetivo del proyecto no es el de presentar aplicaciones o dispositivos concretos, sino presentar solamente las propiedades ópticas de las estructuras. No obstante, a lo largo del documento se presentarán algunos ejemplos de aplicaciones concretas, con el fin de hacer más comprensible la utilidad y validez del trabajo realizado.

Con esto en mente, el proyecto se estructura de la siguiente manera: en un primer capítulo se presentará el estado del arte de la tecnología empleada para el diseño y fabricación de los cristales fotónicos, así como una introducción a dichos cristales y a sus propiedades; en un segundo capítulo se presentará un estudio sobre las propiedades ópticas de distintas estructuras fotónicas; mientras que en un tercer capítulo serán presentados los cuasi-cristales fotónicos, en un estudio similar al realizado en el capítulo II.

A lo largo del documento, y paralelamente con los resultados teóricos obtenidos de las simulaciones de las estructuras diseñadas, se presentarán resultados experimentales de las diversas muestras fabricadas. Resultados que, como ya hemos comentado, validarán el estudio realizado. Finalmente se presentarán las conclusiones del proyecto, así como el trabajo futuro susceptible a desarrollar.

# Capítulo I. Estado del arte.

## 1. Cristales fotónicos.

Los cristales fotónicos son estructuras ópticas en las que la variación periódica del índice de refracción se diseña para afectar a la propagación de los fotones, de un modo similar a cómo el potencial periódico de un semiconductor afecta a la propagación de los electrones.

En esencia, un cristal fotónico consta de regiones internas que, de forma repetitiva, alternan zonas de alta y baja constante dieléctrica. La periodicidad de una estructura fotónica puede venir dada en una, dos o tres dimensiones. En la figura 1.1 pueden verse tres ejemplos de cómo se dispondría un cristal fotónico en 1D, 2D y 3D [1].

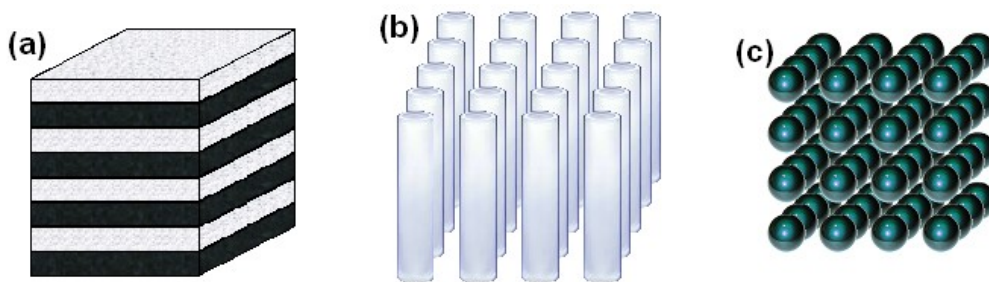


Figura 1.1. Ejemplos de una estructura fotónica unidimensional (a), bidimensional (b) y tridimensional (c). Cada color hace referencia a un material de distinta constante dieléctrica. La alternancia periódica de los materiales mostrados confiere a la estructura su carácter cristalino.

Dicha estructura dieléctrica permite definir rangos frecuenciales y direcciones del espacio para las cuáles la propagación de ondas electromagnéticas estará prohibida. A las ondas electromagnéticas cuya longitud de onda forma parte del espectro permitido en el cristal se les denomina *modos*. A las bandas frecuenciales cuya propagación no está permitida en el interior del cristal se les denomina *gaps*.

Uno de los rasgos más destacables del electromagnetismo en medios dieléctricos es que no existe una escala fundamental que defina las dimensiones del sistema. Para el caso de los cristales fotónicos, distintos problemas que tienen lugar en distintas regiones del espectro (infrarrojo, visible, ultravioleta) presentan una misma solución, difiriendo únicamente de una simple expansión o contracción de todas las distancias. Por ello todas las distancias, frecuencias, energías y vectores de onda en el estudio de los cristales fotónicos se expresan en función de una constante  $a$ . Dicho parámetro, denominado *lattice constant* en su terminología inglesa, refiere a la periodicidad espacial del cristal.

Dado que el fenómeno físico en el que se basa el comportamiento de los cristales fotónicos es un fenómeno de difracción ocurrido en las fronteras entre zonas de alta y baja constante dieléctrica, la periodicidad del cristal debe ser del mismo orden de magnitud que la longitud de onda en la que pretendemos trabajar. Dicho de otro modo, una vez especificado el rango de frecuencias en el que queremos que el cristal presente sus propiedades, y dado que los resultados se presentan todos en función de la *lattice constant*  $a$ , entonces ya sólo queda concretar el valor de la constante  $a$  para la fabricación de una estructura que trabaje en el margen frecuencial deseado.



### 1.1. Electromagnetismo en medios de constante dieléctrica variable.

Todos los problemas sobre electromagnetismo, siempre que nos mantengamos en una situación macroscópica como es el caso de la propagación de la luz a través de un cristal fotónico, pueden tratarse a través de las ecuaciones de Maxwell (unidades CGS) [1]:

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{B} &= 0 & \nabla \cdot \mathbf{D} &= 4\pi\rho \\ \nabla \times \mathbf{H} &= \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} + \frac{4\pi}{c} \mathbf{J} & \nabla \times \mathbf{E} &= -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \end{aligned} \quad (1.1)$$

donde  $\mathbf{E}$  y  $\mathbf{H}$  son los campos eléctricos y magnéticos respectivamente,  $\mathbf{D}$  y  $\mathbf{B}$  son los campos desplazamiento eléctrico e inducción magnética respectivamente, y  $\rho$  y  $\mathbf{J}$  son la densidad de carga libre y de corriente eléctrica, respectivamente.

Podemos restringir dichas ecuaciones para el caso particular de una propagación a través de medios de constante dieléctrica variable, sin cargas ni corrientes. Asumiremos además, que la amplitud de los campos es lo suficientemente baja como para no exceder el régimen lineal, e ignoraremos cualquier dependencia de la constante dieléctrica con la frecuencia (en lugar de eso, fijaremos el valor de la constante dieléctrica del medio a aquel valor que corresponda a la frecuencia a la que vamos a trabajar). Consideraremos también que la constante dieléctrica  $\varepsilon(\mathbf{r})$  es puramente real (medio de bajas pérdidas). Con ello las ecuaciones de Maxwell se expresan de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) &= 0 & \nabla \cdot \varepsilon(\mathbf{r})\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) &= 0 \\ \nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) &= \frac{\varepsilon(\mathbf{r})}{c} \frac{\partial \mathbf{E}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} & \nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) &= -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{H}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \end{aligned} \quad (1.2)$$

Las ecuaciones de Maxwell son lineales, por lo que podemos separar la dependencia temporal de la dependencia espacial considerándolas independientes. En cuanto a la dependencia temporal, asumiremos que los campos varían senoidalmente en función del tiempo, tratándose de funciones armónicas, dado que por el teorema de Fourier sabemos que cualquier solución a un problema electromagnético puede ser expresada como una combinación lineal de campos armónicos. Con ello las ecuaciones pasan a ser:

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{H}(\mathbf{r}) &= \nabla \cdot \varepsilon(\mathbf{r})\mathbf{E}(\mathbf{r}) = 0 \\ \begin{aligned} \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) &= \mathbf{H}(\mathbf{r})e^{j\omega t} \\ \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) &= \mathbf{E}(\mathbf{r})e^{j\omega t} \end{aligned} & \Rightarrow & \begin{aligned} \nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}) &= -j\frac{\omega}{c}\mathbf{H}(\mathbf{r}) \\ \nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}) &= j\frac{\omega}{c}\varepsilon(\mathbf{r})\mathbf{E}(\mathbf{r}) \end{aligned} \end{aligned} \quad (1.3)$$

Ahora podemos desarrollar las ecuaciones (1.3) y obtener la ecuación principal con la que trabajaremos. Dicho desarrollo lo haremos en términos de  $\mathbf{H}(\mathbf{r})$ , pues resulta más fácil resolver el problema con campos magnéticos, y aplicar luego las ecuaciones de Maxwell, en su forma más sencilla, para encontrar el campo eléctrico. La ecuación principal queda:

$$\nabla \times \left( \frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} \nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}) \right) = \left( \frac{\omega}{c} \right)^2 \mathbf{H}(\mathbf{r}) \quad (1.4)$$

La ecuación (1.4) puede tratarse como un problema de valores propios, dónde la función que aplica al término  $\mathbf{H}(r)$  a la izquierda de la ecuación es un operador. Si el resultado de aplicar el operador a una función  $\mathbf{H}(r)$  dada es simplemente la misma función multiplicada por una constante, entonces la función  $\mathbf{H}(r)$  es una *función propia* del sistema, y la constante multiplicativa ( $\omega^2/c^2$ , en este caso) es su *valor propio*. De esta forma los valores propios de la ecuación (1.4) son, en realidad, las frecuencias permitidas del sistema, o modos.

No obstante, debido a la gran complejidad que el problema de valores propios alcanza en estructuras dieléctricas complejas, y en especial al aumentar la dimensionalidad del sistema, la resolución del problema de la propagación de campos electromagnéticos a través de cristales fotónicos suele supeditarse a métodos numéricos tales como FDTD (finite-difference-time-domain method), PWE (plane-wave-expansion method) o TMM (transfer-matrix method) [2], métodos en los que se basan los programas de simulación empleados durante este proyecto para el estudio teórico de las propiedades ópticas de los cristales.

### 1.2. Espacio recíproco y zonas de Brillouin.

La resolución del problema de funciones y valores propios (ecuación 1.4) puede simplificarse considerablemente si el sistema es invariante a determinadas operaciones de translación o rotación, es decir, si el sistema posee determinadas simetrías.

Los cristales fotónicos están formados a partir de una estructura dieléctrica periódica, lo que permite definir una simetría de translación discreta:  $\varepsilon(\mathbf{r})=\varepsilon(\mathbf{r}+\mathbf{R})$ . Dónde el vector  $\mathbf{R}$  es una combinación lineal de la constante  $\mathbf{a}=(a_x, a_y, a_z)$  definida al comienzo del capítulo como la periodicidad de la estructura dieléctrica en cada dirección del espacio. Por lo tanto, el sistema es invariante ante desplazamientos definidos por una distancia  $\mathbf{R}$ .

La simetría de translación discreta que posee el sistema nos permite expresar las soluciones de la ecuación (1.4) como el producto de una onda plana modulada por una función periódica  $u_{n,k}(r)$ , de periodo igual a la periodicidad del cristal fotónico. Este resultado que permite expresar las funciones propias del sistema de este modo se conoce como **teorema de Bloch**. El subíndice  $n$  referencia a las diferentes bandas energéticas que son solución del problema de valores propios (los modos del sistema).

$$H_{n,k}(r) = e^{jkr} \cdot u_{n,k}(r) \quad (1.5)$$

Encontrar los valores propios, correspondientes a las funciones propias del estilo de la ecuación (1.5), da lugar a la relación de dispersión del sistema, en la que se especifican el margen de frecuencias permitidas para cada vector de onda  $k$ . Las frecuencias propias del sistemas presentan, pues, una simetría en el espacio recíproco de la señal (espacio de Fourier) según la relación  $\omega_n(\mathbf{k})=\omega_n(\mathbf{k}+\mathbf{K})$ , donde el vector  $\mathbf{K}$  es el equivalente en el espacio recíproco del vector  $\mathbf{R}$ .

Para encontrar los vectores en el espacio recíproco, dada una estructura determinada, debemos encontrar los vectores  $\mathbf{K}$  que hagan el producto  $\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}$  múltiplo de  $2\pi$  [1]. Dado que el vector  $\mathbf{R}$  es una combinación lineal de la periodicidad intrínseca de la estructura, análogamente, el vector  $\mathbf{K}$  del espacio recíproco será una combinación lineal de los

vectores unitarios  $\mathbf{b}$  del espacio recíproco, expresados a partir de las relaciones siguientes:

$$b_x = 2\pi \frac{a_y \times a_z}{a_x \cdot a_y \times a_z} \quad b_y = 2\pi \frac{a_z \times a_x}{a_x \cdot a_y \times a_z} \quad b_z = 2\pi \frac{a_x \times a_y}{a_x \cdot a_y \times a_z} \quad (1.6)$$

De las relaciones anteriores se extrapola que dos vectores de onda,  $\mathbf{k}$  y  $\mathbf{k}+2\pi/\mathbf{a}$ , generarán el mismo valor propio y, por tanto, generarán soluciones redundantes. Por ello, el estudio de la relación de dispersión, para el estudio de las propiedades ópticas de los materiales, se restringe a la zona de Brillouin, la cuál engloba todas las posibles direcciones del espacio recíproco no-redundantes. En la figura 1.2a puede verse una representación del espacio recíproco de una distribución hexagonal, la celda unitaria de la distribución, y la zona de Brillouin (triángulo rojo) formada a partir de la reducción de todas las simetrías de rotación de la estructura.

Las zonas de Brillouin se construyen a partir de los planos bisectrices que cortan los vectores de la estructura en el espacio recíproco. Dichos vectores se construyen uniendo la celda origen (dado que la estructura es periódica cualquier volumen básico a partir del cuál se forma la estructura puede actuar de celda origen) con sus celdas vecinas más próximas. Como la estructura especificada posee también simetrías de rotación, las soluciones (o valores propios) de la ecuación (1.4) serán *no-redundantes* en una zona aun más limitada, la representada por el triángulo  $\Gamma$ -J-X, denominada zona irreducible de Brillouin.

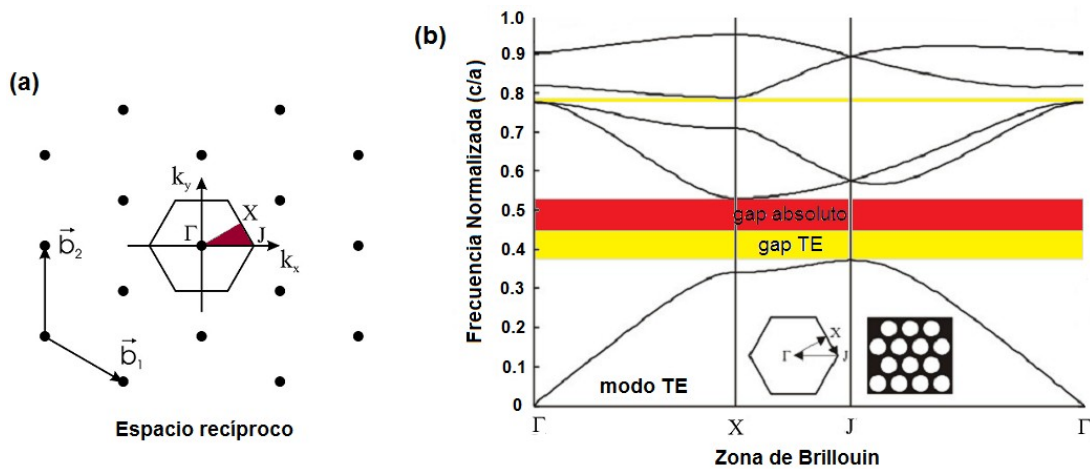


Figura 1.2. (a) Espacio recíproco de una estructura hexagonal bidimensional. Se representa la zona de Brillouin como la zona delimitada por los planos bisectrices a los vectores que unen las celdas más próximas. La zona irreducible de Brillouin, representada por el triángulo  $\Gamma$ -J-X, es debida a las simetrías adicionales que posee el sistema. (b) Relación de dispersión de los modos TE (transversal eléctrico, es decir, el campo eléctrico está contenido en el plano bidimensional) en la zona de Brillouin. Se remarcan los gaps (bandas prohibidas) absolutos y los propios sólo del modo en cuestión.

En la figura 1.2b puede verse la relación de dispersión de la que hablábamos antes, en la que aparecen los modos permitidos en función del vector de onda  $\mathbf{k}$  en la zona de Brillouin. También podemos observar los gaps de la estructura, allí donde no hay solución al problema de valores propios. En nuestro caso, tenemos un gap relativo al modo de propagación TE entre las frecuencias 0.38 y 0.52 (unidades c/a), mientras que el gap absoluto (para los modos TE y TM indistintamente) se reduce a la banda 0.45-0.52 (c/a). Todas las soluciones fuera de esta zona de Brillouin pueden reducirse a la relación de dispersión sumando o restando el vector  $\mathbf{K}$ .

### 1.3. Cuasi-cristales.

El término *cristal* se define como: *cualquier sólido que tenga un diagrama de difracción discreto esencial*. Basándonos en dicha definición, los cristales fotónicos incluyen en su gama estructuras con defectos, estructuras asimétricas, roturas de la periodicidad o estructuras completamente aperiódicas, siempre y cuando cumplan la condición de difracción.

Un cuasi-cristal es una estructura determinista, perfectamente ordenada, y que, a diferencia de los cristales, no presenta ninguna simetría de traslación. El término fue acuñado tras la observación de una peculiar distribución de los átomos de ciertos sólidos, esta ordenación consiste en un estado intermedio entre gas (átomos perfectamente desordenados) y cristal (átomos perfectamente ordenados). Ya que dichos elementos presentan difracción de Bragg en su interior comparten algunas de las propiedades de los cristales, aunque se diferencian de ellos por el hecho de no presentar ninguna estructura repetitiva.

Una ordenación es aperiódica si no consta de ninguna simetría de traslación, lo que implica que ninguna copia desplazada de la estructura coincidirá exactamente con su original. La habilidad de difractar ondas electromagnéticas, proviene de la existencia de un número indefinido de elementos regularmente distanciados, aunque dichos elementos no sean copias idénticas repetidas. Experimentalmente, la pérdida de la periodicidad se revela a través del inusual diagrama de difracción, ya que éste pierde su simetría. En la figura 1.3 podemos ver varios ejemplos de una ordenación cuasi-cristalina bidimensional y sus diagramas de difracción [4].

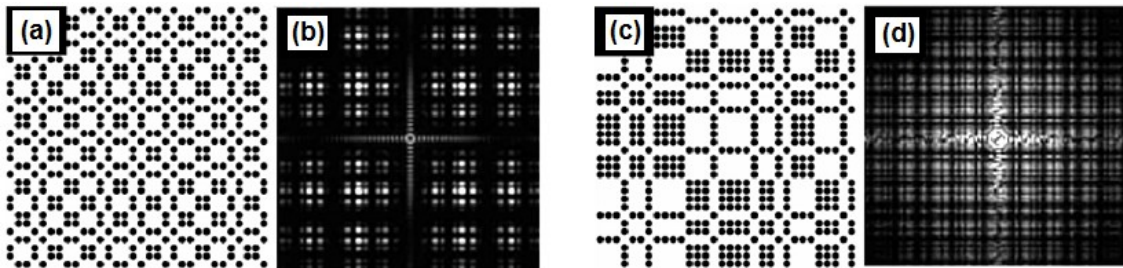


Figura 1.3. Ordenaciones cuasi-cristalinas 2D (a, c) y sus diagramas de difracción (b, d) respectivos. Se observa que la distribución es mucho más compleja que la presentada en la figura 1.1b, lo que motiva el estudio de las propiedades de los cuasi-cristales [4].

Desde su descubrimiento, hacia mediados de los años 80, se han presentados varios materiales con estructuras cuasi-cristalinas, como los compuestos de aluminio  $\text{AlNiCo}$ ,  $\text{AlPdMn}$  o  $\text{AlCuFe}$ , u otros compuestos como el  $\text{TiZrNi}$ , el  $\text{ZnMgHo}$  o el  $\text{CdYb}$  [2]. La relevancia de dichas estructuras radica en que, del mismo modo que para analizar los cristales fotónicos partimos de la física del estado sólido, podemos también copiar las estructuras cuasi-cristalinas de la naturaleza diseñando secuencias aperiódicas que presenten nuevas e interesantes propiedades ópticas con las que poder controlar la luz.

Es necesario comentar, no obstante, que la falta de periodicidad en los cuasi-cristales hace que los métodos de cálculo tradicionales (calculando diagramas de dispersión en el espacio recíproco) ya no sean válidos. En su lugar debemos trabajar de un modo más complejo, en el espacio real, y a través de métodos numéricos como por ejemplo el FDTD [5].

## 2. Silicio macro-poroso.

El silicio macroporoso es un material flexible y versátil para la fabricación de cristales fotónicos bidimensionales y tridimensionales, diseñado para operar en el infrarrojo cercano. El silicio macroporoso se produce a través de un proceso de ataque electroquímico del silicio en soluciones de ácido fluorhídrico (HF). El término *macro* aplica a partir de diámetros del poro superiores a 50 nm, por lo que ésta es la cota a partir de la cuál nos encontramos en una escala macroscópica en la que tienen validez las ecuaciones presentadas en el apartado anterior.

En este apartado se presenta una descripción detallada del proceso de fabricación de los cristales fotónicos basados en la tecnología del silicio macroporoso. No obstante, no se presentarán resultados ni condiciones específicas de fabricación de las estructuras desarrolladas durante la realización del proyecto, dichas consideraciones serán tratadas más adelante.

Diversos modelos han sido desarrollados para intentar describir el mecanismo de formación del silicio macroporoso, y del silicio poroso en general. Aunque el mecanismo exacto de formación sigue cuestionándose todavía, el modelo más ampliamente aceptado es el modelo de *zona de carga de espacio*, desarrollado por V. Lehmann y H. Föll [7], que seguidamente explicaremos.

Generalmente, el silicio es inerte en soluciones de ácido fluorhídrico. El proceso de disolución del silicio se activa aplicando una tensión positiva entre la muestra y el electrolito. Las propiedades eléctricas del sistema HF-Si se asemejan, en primera aproximación, a un contacto de tipo Schottky (metal-semiconductor) inversamente polarizado. Debido a que la concentración de portadores en el semiconductor es mucho más baja que en el electrolito, se crea una zona de carga de espacio que puede extenderse decenas de micras, dependiendo del dopado del semiconductor. Para la disolución química de un átomo de silicio son necesarios 2 o 4 huecos. Los huecos son minoritarios en obleas tipo-n, por lo que se deben inyectar externamente a través de una *unión p-n*, o *iluminando* la oblea con una luz cuya energía sea superior al gap de silicio (1.1eV).

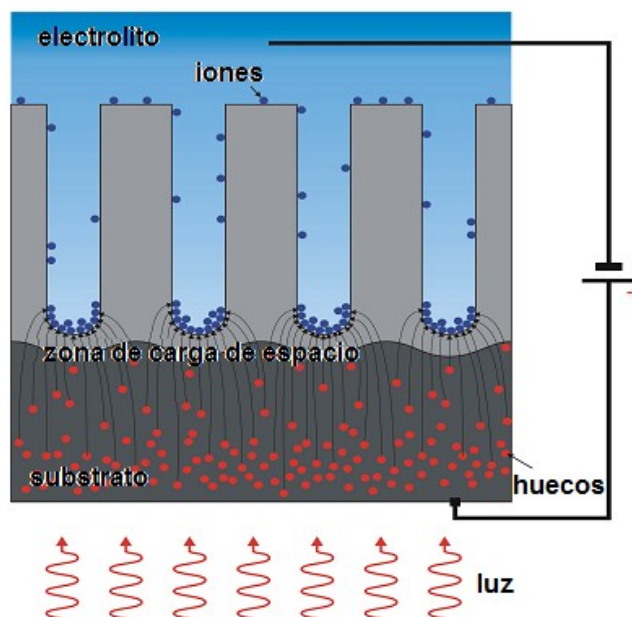


Figura 1.4. Ilustración esquemática del mecanismo de formación de macroporos en silicio tipo-n.

En este último caso, al proceso electroquímico se le denomina *asistido por luz*. La zona de carga de espacio está repleta de huecos por lo que actúa como una barrera para la disolución. No obstante, en las zonas con depresión topográfica (defectos en la superficie de la oblea) la zona de carga de espacio es más delgada y el gradiente de campo eléctrico mayor. El flujo de portadores se enfoca, por lo tanto, a estas zonas.

Esto significa que, para guiar el ataque allí donde nos interesa, deberemos crear artificialmente estas depresiones topográficas que reduzcan la zona de carga de espacio y aumente el gradiente de campo. La disolución del silicio aumenta y el crecimiento de los poros se inicia en las regiones de depresión. Si los poros están lo bastante cerca, la zona de carga de espacio se vuelve periódica y el crecimiento de los poros se efectúa en profundidad únicamente a través de sus puntas. Este mecanismo de formación de los macroporos en silicio tipo-n está representado esquemáticamente en la figura 1.4.

Hace falta añadir que el proceso de formación y la morfología de los macroporos formados depende de las condiciones del proceso electroquímico, como son la concentración de HF y la composición del electrolito, la temperatura, la corriente que circula por el sistema, el tipo y dopado del semiconductor, el estado de la superficie de la muestra, etc... La ventaja de utilizar silicio tipo-n consiste en que la corriente que circula por el sistema, y el voltaje anódico aplicado, se pueden variar de manera independiente (ya que la concentración de los huecos viene dada por la intensidad de la iluminación), lo que permite modular el diámetro de los poros en profundidad y realizar estructuras 3D.

Ésta es la característica más destacable del ataque electroquímico del silicio ya que amplía enormemente las posibles aplicaciones en campos como la biotecnología, el micro-mecanizado, los sensores, etc... En la figura 1.5 podemos ver algunos ejemplos de estructuras fotónicas tridimensionales desarrolladas por el *Grup de Recerca en Micro i Nanotecnologies* de la *UPC*.

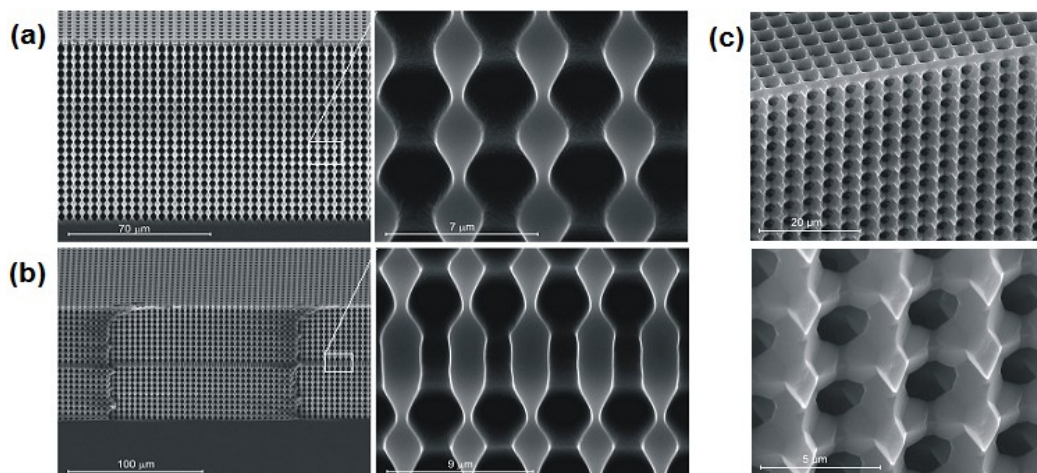


Figura 1.5. Ejemplos de estructuras fotónicas 3D desarrolladas en el departamento de ingeniería electrónica de la UPC (Grup de Recerca en Micro i Nanotecnologies), basadas en tecnología del silicio macroporoso. Macroporos modulados de forma senoidal (a), estructura con defecto introducido en la modulación de los poros (b), y estructura 3D completa en la que los poros se unen lateralmente(c).



### 2.1. Preparación previa de las muestras.

Si la superficie de la muestra de silicio que pretendemos grabar es plana, entonces los poros que se formarán al realizar el proceso electroquímico estarán distribuidos de manera aleatoria, por lo que no estará definida ninguna periodicidad en el plano de la superficie del silicio. Para obtener una ordenación periódica de los poros, y obtener así una distribución cristalina, necesitamos preparar previamente la muestra, marcando el lugar donde deberán crecer los poros. La secuencia de procesos para la preparación de la muestra está representada en la figura 1.6 y se explica a continuación.

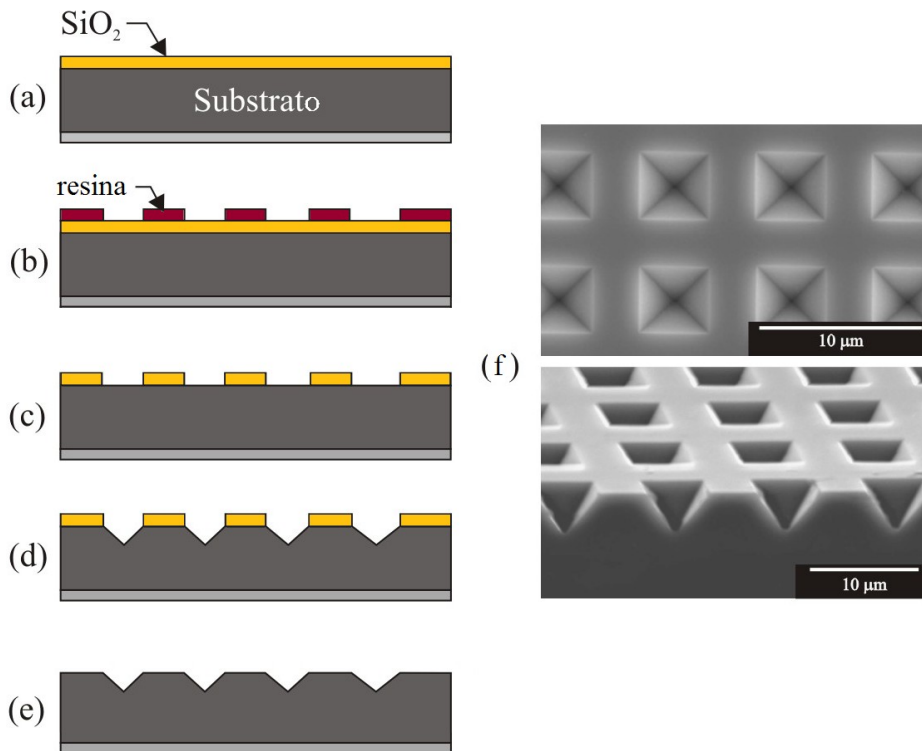


Figura 1.6. Secuencia de los procesos necesarios para la preparación de las muestras antes del ataque electroquímico: (a) oxidación térmica; (b) fotolitografía; (c) ataque del óxido de silicio; (d) ataque anisotrópico del silicio; (e) eliminación del óxido de silicio. (f) Imágenes de la superficie de la muestra preparada para el ataque electroquímico. Se puede observar una distribución cuadrada de pirámides invertidas que definirán el sitio donde crecerán los macroporos.

El material inicial del que partimos para la fabricación de silicio macroporo son obleas de silicio dopado tipo-n de  $10^{15} \text{ cm}^{-3}$  (dopado con fósforo), de 4 pulgadas y resistividad entre 2 y 5  $\Omega\cdot\text{cm}$ . En la parte posterior de la oblea primeramente se implanta iónicamente una capa tipo  $n^+$  fuertemente dopada ( $10^{18} \text{ cm}^{-3}$ , aproximadamente) que servirá como electrodo transparente para conectar la muestra con el circuito externo, en la celda electroquímica.

Partiendo de la oblea de silicio, se realiza una oxidación térmica de su superficie antes de proceder con el proceso litográfico. El grosor del óxido de silicio formado es de alrededor de 100 nm. El objetivo de dicha oxidación es evitar que, durante el ataque químico con TMAH 25% (hidróxido de tetrametilamonio), que se realiza tras la litografía para transferir el patrón litográfico al silicio, se graben zonas de la oblea que no deben ser marcadas.

El proceso litográfico es estándar. La resina que cubre la oblea se expone durante 10-12 segundos a la luz ultravioleta, que pasa a través de una máscara donde una distribución periódica ha sido definida previamente. Las regiones de resina expuestas a la luz son eliminadas posteriormente durante el proceso de revelado, y el patrón de la máscara queda transferido a la resina. Los cristales fabricados durante la realización de este proyecto tienen una distribución en plano cuadrada y una periodicidad de 4  $\mu\text{m}$ .

Tras la litografía, el patrón se transfiere a la capa de óxido mediante un ataque con plasma RIE (reactive ion etching). Posteriormente se deben crear las pirámides invertidas en el silicio (las zonas de depresión topográficas cuya necesidad hemos introducido en el apartado anterior). Hay que transferir, pues, el patrón del óxido sobre la superficie de la oblea, definiendo el sitio donde deben crecer los poros.

Dichas pirámides se forman a partir de un proceso de ataque del silicio con TMAH. Es interesante comentar que las pirámides sólo servirán de guía para la formación de los poros, sin afectar a su anchura o morfología, ya que ésta viene determinada únicamente por la corriente que circula por el sistema en cada instante de tiempo.

Una vez tenemos la superficie de la oblea estructurada se elimina el resto de óxido mediante un corto ataque con HF al 5%. Posteriormente la oblea se corta, dividiéndola en muestras de 2x2 cm que serán procesadas en la celda electroquímica para crear los cristales fotónicos.

## *2.2. El set-up electroquímico.*

El diseño adecuado del set-up electroquímico es muy importante, en primer lugar porque las soluciones de HF son altamente corrosivas y peligrosas, y en segundo lugar porque el proceso electroquímico se ve afectado por aspectos relacionados con el set-up, como el área de contacto entre la muestra y el electrolito, el área y la posición del electrodo cátodo, la agitación apropiada del electrolito, la iluminación por la cara posterior de la muestra, la absorción de oxígeno por parte de la solución, etc.

En la figura 1.7 puede verse una imagen del set-up utilizado a lo largo de este proyecto. La parte más importante del set-up es la celda electroquímica (1), donde tiene lugar la disolución del silicio en realidad. La celda electroquímica ofrece la posibilidad de iluminar la muestra por la cara posterior, conectar la muestra con el circuito externo de corriente, y está diseñada del tal modo que asegura un flujo laminar de electrolito por la cara estructurada de la oblea.

La celda está abierta por su parte posterior con el fin de acoplar una matriz de LEDs infrarrojos (2), además de un elemento difusor que asegura una iluminación uniforme en la cara posterior de la muestra. La emisión de los diodos tiene una longitud de onda central de  $\lambda=880\text{ nm}$ . La muestra actúa de electrodo positivo mientras que el electrodo negativo, formado por un hilo de platino, entra en contacto con la disolución que circulará a través de la celda.

La circulación del líquido se fuerza mediante una bomba neumática (5) (se acciona con aire a presión, con la posibilidad de controlar el caudal de líquido). Los tanques (3) y (4) que contienen la solución, así como las tuberías de todo el circuito, son de teflón, material que tiene una alta resistencia química a las soluciones con HF. Uno de los



tanques (4) está equipado con un sistema de refrigeración y control de la temperatura, necesario para establecer y mantener la temperatura requerida de trabajo constante. La temperatura a la que realizamos el proceso electroquímico siempre debería estar por debajo de la temperatura ambiente, siendo temperaturas entre los 10 y 15 °C las más apropiadas para la obtención de estructuras de calidad y repetitividad elevadas. Las estructuras que se muestran a lo largo del documento han sido fabricadas a una temperatura de 15 °C. El tanque (3), por su parte, es necesario para amortiguar las pulsaciones de la bomba y asegurar un flujo de líquido constante.

Todos estos elementos están montados en el interior de un frigorífico que permite, simplemente, aislar el sistema de grabado del ambiente y luz exteriores. El proceso está controlado por un software, desarrollado en entorno *LabView*, que controla los diferentes aparatos e instrumentos necesarios para el ataque electroquímico, entre los cuales se encuentran el control de la iluminación, de la tensión aplicada y de la temperatura del sistema. El software desarrollado ajusta, principalmente, la intensidad de la luz de tal modo que la corriente que circule por el sistema sea igual a la corriente teórica precalculada, con el fin de conseguir un crecimiento de los poros con un determinado perfil de diámetro en profundidad. Este aspecto se discute en el apartado siguiente.

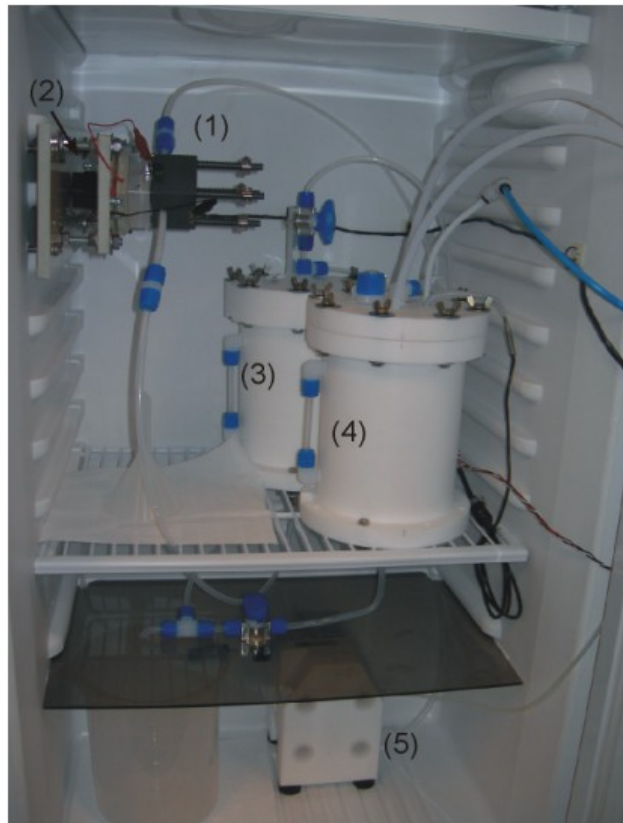


Figura 1.7. Imagen del set-up electro-químico utilizado para la fabricación del silicio macroporoso: (1) celda electroquímica; (2) matriz de LEDs infrarrojos para la iluminación; (3) tanque para amortiguar las pulsaciones de la bomba; (4) tanque equipado con sistema de control de la temperatura; (5) bomba.

### 2.3. Morfología del cristal.

Como hemos comentado, la forma que adquirirá el poro a lo largo de su grabado puede ser controlada ajustando la intensidad de la iluminación posterior, que por la generación de los pares electrón-hueco en el semiconductor, determinará la corriente que circula

por el sistema. En este apartado describiremos en más detalle el modelo que permite modular el diámetro del poro.

De acuerdo con el modelo de la zona de carga de espacio desarrollado por V. Lehmann y H. Föll [8,9], el crecimiento estable de los macroporos se consigue cuando existe un equilibrio entre el flujo de iones en el electrolito y el de portadores en el semiconductor. En nuestro caso, la densidad de corriente  $J$  [ $mA/cm^2$ ] que fluye a través de los poros es igual a la corriente crítica  $J_{ps}$ . La corriente crítica es una corriente específica del sistema HF-Si que separa los diferentes mecanismos del proceso de disolución de silicio (*electro-pulido y/o formación del poro*), y depende de la temperatura y la concentración del electrolito, y también de la orientación cristalina del semiconductor.

En condiciones de crecimiento estable, todo el flujo de corriente se realiza a través de las puntas de los poros y es válida la siguiente relación:

$$p = \frac{J}{J_{ps}} = \frac{\pi}{4} \cdot \left( \frac{d}{a} \right)^2 \quad (1.7)$$

donde  $p$  es la porosidad (proporción de aire en silicio) de la estructura.

En el caso de una distribución de poros cuadrada, la porosidad se expresa directamente con la relación (1.7), donde  $d$  es el diámetro del poro y  $a$  es la periodicidad de la distribución (distancia centro-centro entre los poros o *lattice constant*). Como la periodicidad  $a$  es constante (definida por la litografía) y la corriente  $J_{ps}$  depende principalmente de las propiedades del electrolito, y se controla mediante la densidad de corriente del sistema  $J$ , un aumento de la corriente aplicada  $J$  dará lugar a un aumento del diámetro del poro. La corriente  $J$ , por su parte, se controla mediante la intensidad de iluminación en el dorso de la oblea. Una mayor intensidad de luz genera una mayor concentración de portadores en el silicio, aumentando la corriente  $J$  que circula por el sistema. De este modo, modulando la intensidad de la iluminación podemos modular el diámetro de los poros en profundidad.

Es interesante comentar que, para conseguir estructuras 3D con una modulación de los poros homogénea y estable, es necesario tener en cuenta varios aspectos del proceso. Por ejemplo, la corriente crítica  $J_{ps}$  disminuye con la profundidad de los poros [8]. Eso es debido al hecho que la concentración de HF a lo largo de los poros disminuye, y únicamente se puede recuperar a través de la difusión de iones desde la celda. Es decir, cuanto más largo es el poro, mayor es el gradiente de concentración en él y, por lo tanto, debemos ir reduciendo la iluminación, conforme avanzamos en el proceso, si queremos obtener poros de diámetro constante.

Otro fenómeno que se debería tener en cuenta es la corriente de oscuridad. Esta corriente proviene, en parte, de portadores térmicamente activados dentro de la zona de carga de espacio, y también de la inyección de portadores en el semiconductor por parte del electrolito [8]. Durante el ataque, el área total de contacto entre el electrolito y la muestra aumenta, debido al crecimiento de los poros, lo que incrementa la corriente de oscuridad. El aumento de la corriente de oscuridad provocará una reducción de la circulación de la corriente aplicada  $J$  a través de los poros, ya que su dirección es opuesta, lo que al final resulta en un crecimiento cónico de los poros, o incluso en un crecimiento inestable a partir de cierta profundidad. La corriente de oscuridad se puede disminuir trabajando a bajas temperaturas y burbujeando el electrolito con nitrógeno, lo

que disminuye la concentración parcial de oxígeno diluido (principal causa de la inyección de portadores por parte del electrolito).

Teniendo en cuenta la importancia que tiene el electrolito sobre las propiedades del proceso electroquímico, su preparación debe ser meticulosa y se debe intentar reducir al máximo el error en la concentración. El electrolito se prepara diluyendo HF al 50% en agua desionizada hasta alcanzar una concentración del 5 wt%. La relación en peso es importante porque la densidad del HF es mayor que la del agua. En la solución se añade etanol absoluto hasta 20 wt%, que sirve para disminuir la tensión de superficie.

En la figura 1.8 pueden verse algunos ejemplos del proceso descrito, de cómo controlando la densidad de corriente que circula por el sistema conseguimos realizar distintas morfologías de macroporos en el silicio.

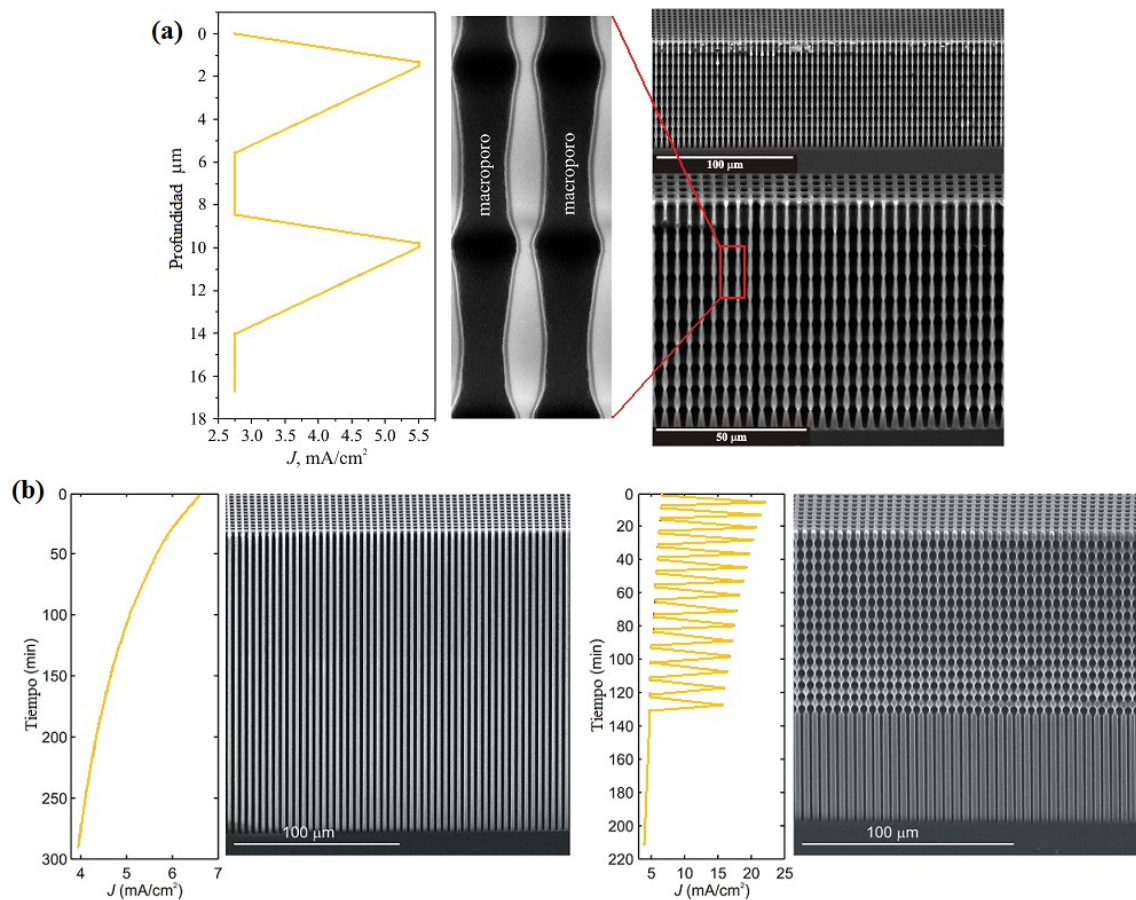


Figura 1.8. (a) Controlando la corriente que circula por el sistema controlamos el diámetro de los poros en cada punto. (b) Conforme avanzamos en el proceso de grabado, la densidad de corriente total debe reducirse, para mantener el diámetro de los poros constante, pues el gradiente de concentración de disolución en la superficie del silicio aumenta.

#### 2.4. Procesos posteriores al ataque electroquímico.

Las estructuras presentadas en el apartado anterior (figuras 1.5, 1.8), aunque presentan una variación del diámetro a lo largo del eje del poro, podrían considerarse en realidad casi 3D, porque el contraste dieléctrico en el plano XY es mucho más grande que en la dirección Z del eje del poro. La variación del diámetro del poro introduce una variación de la porosidad (proporción de aire en el silicio) y, por lo tanto, una variación de la constante dieléctrica efectiva en la dirección Z, aunque mucho menor que en las

direcciones X e Y. Dicha constante dieléctrica efectiva será mayor en las regiones de diámetro mínimo, y menor en las de diámetro máximo, aunque su valor oscilará siempre entre 1 (aire) y 11.7 (Si).

Para conseguir una variación similar en los tres ejes del espacio, es necesario que los poros se conecten en la dirección lateral. El ataque electro-químico no permite realizar este objetivo, porque para porosidades grandes, mayores de 1, el crecimiento de los poros se vuelve inestable, llegando a romper la distribución ordenada. Sin embargo, con procesos posteriores al ataque electroquímico este objetivo se puede lograr.

El ensanchamiento de los poros hasta su conexión lateral, en las regiones de diámetro máximo, se realiza a través de oxidaciones múltiples y eliminaciones del óxido. En el proceso de oxidación térmica, el silicio que se consume es aproximadamente el 44% del grosor total de la capa de óxido formada (al formar 100 nm de óxido estaremos consumiendo 44 nm de silicio). Si formamos y eliminamos capas de óxido de grosor conocido, de manera repetitiva, podemos controlar el ensanchamiento de los poros, como se puede observar en la figura 1.9.

Las muestras se oxidan en un horno a 1100 °C con atmósfera de oxígeno seco. Para obtener una capa de óxido de entre 110-120nm, las muestras deben permanecer en estas condiciones durante 60 minutos. La eliminación del óxido se realiza sumergiendo las muestras en solución de HF al 5%. Este proceso se repite varias veces para conseguir estructuras con diferentes porosidades. Estas estructuras son estructuras completamente tridimensionales, ya que el contraste dieléctrico en los tres ejes del espacio tiene la misma magnitud: los poros ahora se asemejan a esferas de aire, alojadas en silicio, que se solapan (figura 1.9).

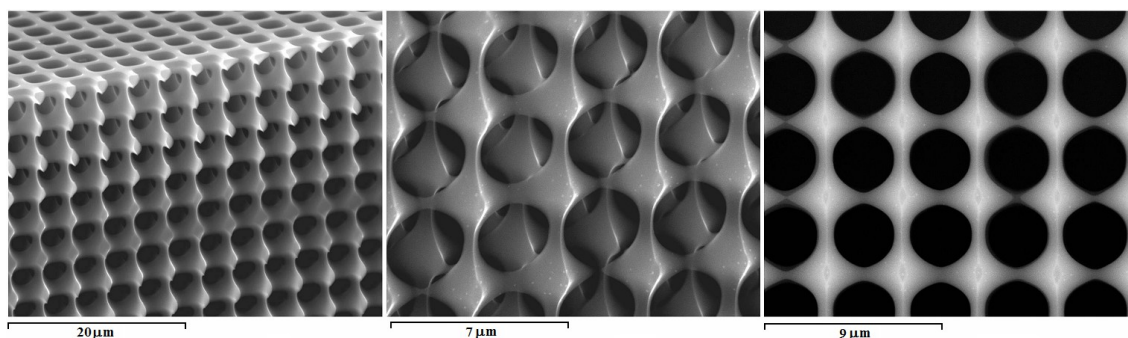


Figura 1.9. Ejemplos de estructuras con poros conectados.

Es necesario comentar que no es eficiente formar sólo una capa gruesa de óxido para conseguir el solapamiento. Crecer capas gruesas requiere mucho tiempo de oxidación y, además, el estrés acumulado puede llegar a doblar la muestra, o incluso romperla. Por esta razón, si pretendemos ampliar el tamaño de los poros, es preferible realizar varios procesos de oxidación y eliminación del óxido consecutivos, antes que intentar realizar la oxidación de la capa en un sólo proceso.

Al final del capítulo II estudiaremos los efectos de oxidar los cristales y su repercusión en la respuesta óptica de la estructura.

## Capítulo II. Propiedades ópticas de los cristales fotónicos.

Para realizar el estudio de las propiedades ópticas de los cristales fotónicos, varias estructuras han sido computadas calculando sus diagramas de dispersión y sus patrones de reflexión y transmisión. Dos de los programas de simulación utilizados para el siguiente estudio han sido desarrollados por el *Massachusetts Institute of Technology*, y son de libre distribución, por lo que cualquiera puede emplearlos. El programa MPB [16] utiliza el método de expansión de ondas planas para calcular el diagrama de dispersión, el programa MEEP [17] calcula espectros de reflexión y transmisión de estructuras finitas con el método FDTD. El tercer programa de simulación empleado en el estudio es un programa desarrollado in-situ en el departamento, en el entorno de computación *Matlab*. Dicho programa utiliza el método de cálculo de matrices de transferencia para calcular los campos electromagnéticos presentes a la entrada y la salida del sistema.

El estudio que se lleva a cabo en este capítulo se divide en dos apartados. En el primero se presenta el estudio de las estructuras bidimensionales, centrándonos en los parámetros constante dieléctrica, porosidad y distribución del cristal. En el segundo apartado se estudian los cristales tridimensionales basados en una modulación senoidal en la tercera dimensión (con distribución cuadrada en el plano XY). El motivo por el que estudiamos una modulación senoidal de los poros de la estructura es simple: la modulación senoidal es una estructura sencilla que presenta una región de bandas prohibidas (un gap fotónico) en la dirección de propagación Z y, aunque otras estructuras pueden ser realizadas mediante el método de ataque electroquímico, la modulación senoidal es perfectamente válida para el estudio de las propiedades de los cristales fotónicos. Al final del capítulo se presentarán los resultados experimentales de varias de las muestras fabricadas.

Es interesante recordar ahora, antes de realizar el estudio de las diversas estructuras, el concepto de porosidad. La porosidad mide la fracción de espacios vacíos en el interior de un material, lo que aplicado a los cristales fotónicos, puede fácilmente definirse como la fracción de poro con respecto al volumen total de la celda unitaria (la celda que repetida periódicamente por todo el espacio formará el cristal fotónico). De ahí viene, de hecho, la denominación de silicio macroporoso. La importancia de la porosidad en las estructuras fotónicas, como veremos, radica en que la variación de ésta altera tanto la posición como la anchura espectral de los posibles gaps de una estructura dada, por lo que siempre debemos tener en cuenta este hecho a la hora de diseñar futuras aplicaciones basadas en cristales fotónicos. Es decir, vamos a ver cómo partiendo de un cristal fotónico con una determinada respuesta óptica, podemos modificar dicha respuesta variando la porosidad del cristal.

## 1. Cristales fotónicos bidimensionales.

El proceso electroquímico para fabricar cristales fotónicos requiere que la periodicidad en el plano bidimensional se defina previamente, lo que normalmente se hace mediante el proceso fotolitográfico presentado en el capítulo I. Claramente, podemos definir cualquier estructura o distribución sobre la superficie de la oblea, siempre y cuando dispongamos de la máscara adecuada. Las limitaciones del proceso residen en la resolución de la litografía y las propiedades intrínsecas de los materiales utilizados.

La limitación debida a la resolución de la litografía óptica (o estándar) se puede solventar utilizando la llamada litografía por electrones, cuya resolución es del orden de decenas de nanómetros. Sin embargo, la fabricación de estructuras de silicio macroporoso con dimensiones por debajo de la micra es difícil, ya que impone exigencias especiales sobre las obleas de silicio: la resistividad de las obleas debería ser muy baja (un dopado alto), a la vez que el tiempo de vida de los portadores debería ser muy alto. Además, se debe tener en cuenta que a resistividades muy bajas, a parte de la zona de carga de espacio, aparecen otros fenómenos que influyen sobre el crecimiento de los poros (avalanche breakdown o tunneling) que hacen difícil la obtención de estructuras homogéneas.

La periodicidad mínima de estructuras de silicio macroporoso reportada hasta ahora es de alrededor de 500nm (estructuras que pueden operar en el infrarrojo cercano alrededor de 1.3  $\mu\text{m}$ ) [10].

En el presente apartado solamente reportaremos los resultados correspondientes a las distribuciones más simples, por lo que las estructuras estudiadas no precisan de un especial tratamiento en cuanto a su método de fabricación. Para la fabricación de las muestras se ha empleado un proceso estándar de fotolitografía óptica.

El objetivo es el de estudiar las propiedades de los cristales 2D enfatizando la búsqueda de gaps fotónicos absolutos. Estos gaps se definen como la región del espectro donde la propagación de las ondas queda prohibida cualesquiera sean la polarización o la dirección de la onda de entrada. Dicha aclaración se hace necesaria ya que, en estructuras 2D, podemos encontrarnos con gaps para la propagación de los modos TE (campo eléctrico situado en el plano estructurado) pero no para la propagación de los modos TM (campo magnético en el plano estructurado).

El estudio de las propiedades ópticas antes mencionado se realizará a través de los mapas de gap. Un mapa de gap es un diagrama que “localiza” el gap en función de uno o más parámetros geométricos del cristal fotónico. En el eje horizontal se sitúa la variable a computar, mientras que la frecuencia, en unidades adimensionales, se sitúa en el eje vertical.

Como ya hemos mencionado con anterioridad, las soluciones de las ecuaciones de Maxwell pueden escalarse y referenciarse a un parámetro constante  $a$  (lattice constant). La frecuencia se expresa así en unidades  $[c/a]$ , donde  $c$  es la velocidad de la luz. La manera más rápida de encontrar el equivalente en unidades de longitud de onda es:  $\lambda = a/f$ , donde  $\lambda$  es la longitud de onda dimensionada y  $f$  es el valor de la frecuencia adimensional.



### 1.1. El contraste dieléctrico.

En el capítulo I presentamos los cristales fotónicos como materiales de constante dieléctrica variable, materiales que, de forma periódica, alternan zonas de alta y baja constante dieléctrica (zonas con silicio y zonas con aire en nuestro caso). Pero cuál es el efecto de aumentar o disminuir el contraste entre las zonas de alta y baja constante dieléctrica, por ejemplo, variando los materiales empleados en la fabricación de los cristales.

Para estudiar el efecto del contraste dieléctrico sobre las propiedades de los cristales fotónicos nos centraremos en una estructura con distribución cuadrada de columnas de material dieléctrico. La periodicidad de la estructura es  $a_x=a_y=a$ , y el radio de las columnas, cilíndricas, es  $r=0.25a$ .

En la figura 2.1 podemos ver las relaciones de dispersión de los modos TE y TM para la estructura descrita cuando especificamos una constante dieléctrica de 11.7 ( $\approx \epsilon$  del silicio en el infrarrojo). Como podemos observar, existen varios gaps para el modo TM (figura 2.1a): el primero, situado entre las bandas 1 y 2, entre las frecuencias normalizadas (unidades  $c/a$ ) 0.253 y 0.357; el segundo, entre las bandas 3 y 4, y frecuencias 0.472 y 0.543. Sin embargo, ningún gap fotónico aparece al computar las bandas de los modos TE (figura 2.1b).

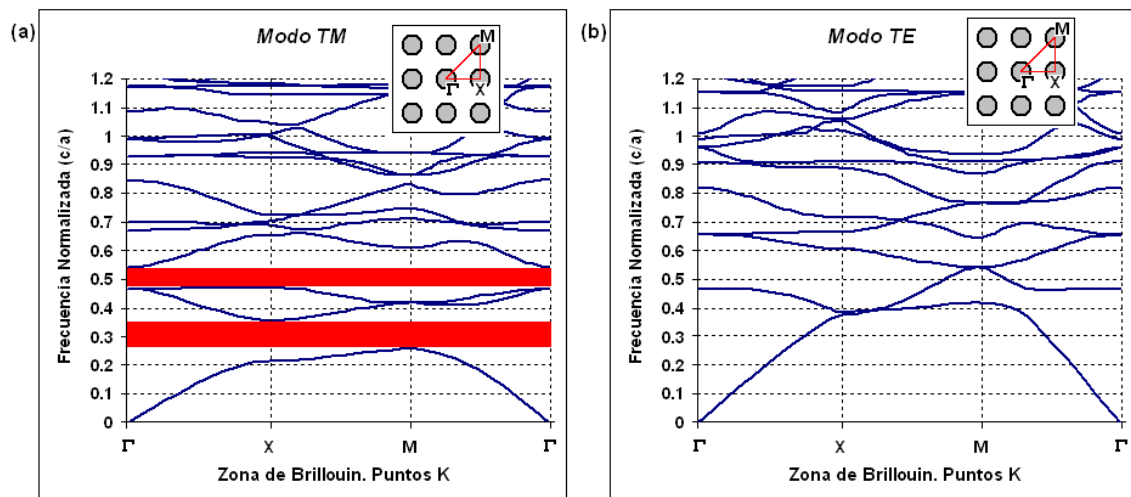


Figura 2.1. Relación de dispersión  $\omega(k)$  para los modos de propagación TM (a) y TE (b) dentro de la zona irreducible de Brillouin (un esquema de la cuál se puede ver en el diagrama insertado). Se observa la diferencia entre los modos de propagación TM y TE con respecto a la presencia de gaps fotónicos.

Este comportamiento, tal y como vemos en la siguiente figura 2.2, no es absoluto. En esta figura se representa el mapa de gaps de la estructura. El mapa representa la localización y ancho de banda de los gaps *cualquiera sea la dirección de propagación* de la onda incidente (siempre en un plano bidimensional), es decir, gaps omnidireccionales. Sin embargo, que un gap sea omnidireccional no implica que sea absoluto, ya que para ello el gap debe aparecer para ambos modos de propagación TE y TM.

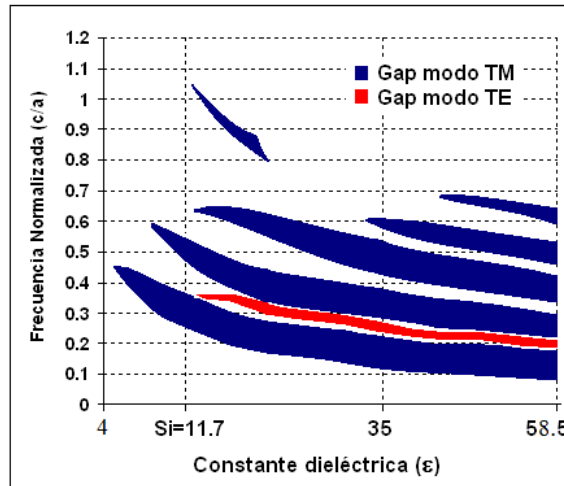


Figura 2.2. Mapa de gaps de una estructura 2D de distribución cuadrada (columnas cilíndricas de material dieléctrico rodeadas de aire) en función de distintos valores de la constante dieléctrica del material. Observamos la aparición de nuevos gaps fotónicos, tanto en el modo TM (azul) como en el modo TE (rojo), conforme aumentamos el valor de  $\epsilon$ .

Como vemos en la figura 2.2, al aumentar el contraste dieléctrico, seleccionando materiales de constante dieléctrica más elevada, modificamos el aspecto de los gaps del modo TM: estos se hacen más anchos y aparecen de nuevos. Asimismo, se genera un gap en el modo de propagación TE (gap que en el cristal de la figura 2.1 no existía). Observamos también que, a pesar de la aparición de nuevos gaps en la estructura, conforme aumentamos  $\epsilon$ , ningún gap absoluto aparece para la estructura descrita, ya que los gaps de los modos TE y TM no llegan a coincidir para ningún valor del dieléctrico (en la estructura aire-dieléctrico descrita).

El desplazamiento hacia frecuencias inferiores que observamos en el mapa de gap se debe al escalado de la frecuencia:

$$\lambda \cdot \nu = \frac{c}{\sqrt{\epsilon}} \quad (2.1)$$

de modo que al aumentar el valor de la constante dieléctrica del medio, la frecuencia se escala a valores inferiores.

Estructuras como las descritas en este apartado se pueden fabricar utilizando el silicio macroporoso como molde. Es decir, los macroporos se rellenan con el material requerido (por ejemplo germanio  $Ge$  de  $\epsilon=16$ ) y posteriormente se elimina el molde selectivamente. El resultado será una réplica inversa de la estructura de silicio utilizada como molde. Esa técnica puede ser una alternativa para estructurar materiales cuyo tratamiento sea difícil, tecnológicamente hablando.

### 1.2. La porosidad de la estructura.

Uno de los parámetros más relevantes para describir el comportamiento de la estructura es la porosidad, que recordemos definíamos como la proporción de aire en el cristal. En este apartado veremos cuál es la evolución de los gaps de la estructura en función de su porosidad. Se estudiarán distribuciones cuadradas y hexagonales en las cuáles la celda unitaria consiste en una columna cilíndrica, cuyo radio  $r$  será una variable que determinará la porosidad de la estructura. Para una distribución cuadrada, la porosidad



se define a partir de  $p=\pi(r^2/a^2)$ , mientras que para una distribución hexagonal,  $p=(2\pi/\sqrt{3})(r^2/a^2)$ .

Por haberse tratado ya, en el apartado anterior, la dependencia con la constante dieléctrica del material, de ahora en adelante, en éste y los siguientes apartados del documento, se considerará una constante dieléctrica igual a la del silicio en el infrarrojo cercano:  $\epsilon=11.7$ .

Dado que los diagramas de dispersión de las estructuras son equivalentes al mostrado en la figura 2.1, pasaremos directamente al estudio del mapa de gaps, cuya distribución para una estructura cuadrada de columnas dieléctricas, se muestra en la figura 2.3a.

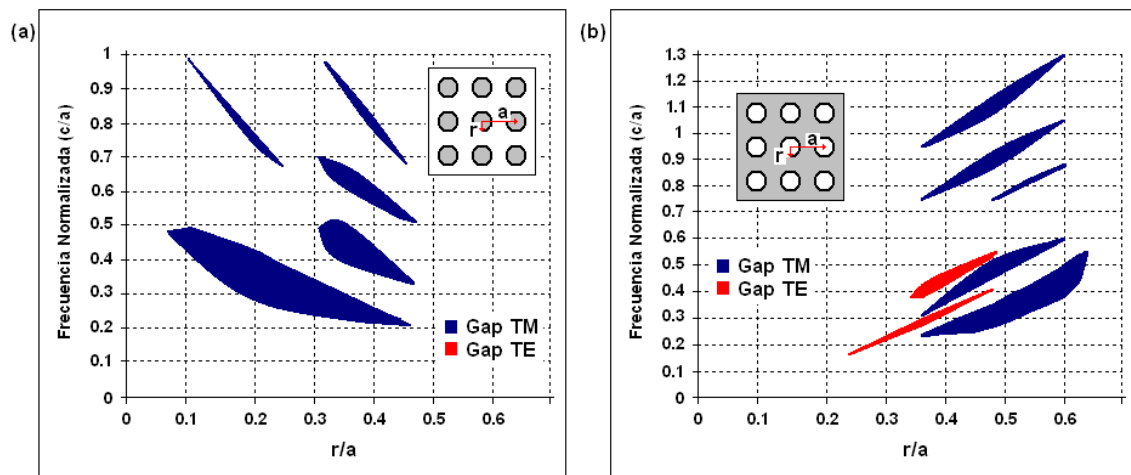


Figura 2.3. Mapa de gaps de la estructura fotónica 2D con distribución cuadrada de columnas dieléctricas (a), o de aire en dieléctrico (b), en función del radio de las columnas. Observamos dos comportamientos claramente diferenciados al aumentar el parámetro  $r/a$ , como consecuencia del aumento o disminución de la porosidad de la estructura.

En el primer caso, todos los gaps fotónicos se desplazan hacia frecuencias inferiores al incrementar el radio de los cilindros. La causa se debe a que, al incrementar el radio, aumentamos el volumen ocupado por el dieléctrico, aumentando la constante dieléctrica efectiva del medio y reduciendo su porosidad, lo que en última instancia provoca un escalamiento en frecuencia equivalente al explicado en el apartado anterior. Segundo, los gaps de la estructura existen para un margen de valores  $r/a$  determinado que no supera  $r=0.5a$ , valor a partir del cuál las columnas se superponen. Y tercero, es interesante observar el comportamiento en que los gaps se repiten, cada vez de tamaño más reducido, en cuanto que aumentamos el valor del radio.

Como observamos en el mapa de la figura 2.3a, la evolución descrita corresponde a los gaps del modo de propagación TM, la estructura no presenta ningún gap para el modo de propagación TE. Según la regla general [1], los gaps de los modos TM son más propicios en estructuras con regiones aisladas de alta constante dieléctrica, mientras que los gaps de los modos TE aparecen, principalmente, en estructuras formadas de regiones estrechas y conectadas, de alta constante dieléctrica. En nuestro caso, la estructura de cilindros dieléctricos en aire es una estructura formada principalmente por regiones de alta constante dieléctrica aisladas entre sí, que favorece la aparición de los gaps en los modos TM.

Esta situación cambia si consideramos la configuración recíproca (figura 2.3b), en la que las columnas son de aire y están grabadas en un medio dieléctrico. El medio dieléctrico entre las columnas puede considerarse formado por regiones estrechas de alta constante dieléctrica conectadas entre sí, lo cuál favorece la aparición de gaps de los modos TE.

El primer efecto observable corresponde a que, ahora, los gaps se desplazan a frecuencias mayores con el aumento del radio de las columnas. El efecto es debido a que, en esta nueva situación, aumentar el radio de la columna implica aumentar la porosidad de la estructura, y no reducirla, reduciendo el índice de refracción efectivo del medio.

Observamos aquí el efecto de la superposición de las columnas, tan distinto al anterior. Al contrario que en la primera estructura descrita, los gaps, en vez de desaparecer al conectarse las columnas, se ensanchan y desplazan, pues ahora estamos aumentando mucho la porosidad de la estructura al conectar las columnas.

Esta nueva configuración también presenta gaps para la propagación de los modos TE (figura 2.3b), aunque, como podemos observar, no existen gaps absolutos para ambos modos de propagación. Por ello vamos a presentar la distribución hexagonal, en la que la densidad de elementos que forman el cristal fotónico se ve muy aumentada, por lo que cabe esperar una mejora en las propiedades ópticas, tanto en número de gaps, independientemente del modo de propagación, como en su tamaño y extensión.

En la figura 2.4 se representan los mapas de gap para la distribución hexagonal. El comportamiento es similar al observado en la figura 2.3: los sucesivos gaps que aparecen en frecuencias superiores mantienen una forma y evolución parecida a los originales en frecuencias inferiores. Los gaps se siguen desplazando hacia frecuencias inferiores en la configuración de columnas dieléctricas, y hacia frecuencias superiores en la configuración recíproca. Además, la desaparición de los gaps en la configuración de columnas dieléctricas se produce cuando el radio de los cilindros aumenta hasta superponerse unos con otros, como pasaba en el caso descrito en la figura 2.3a.

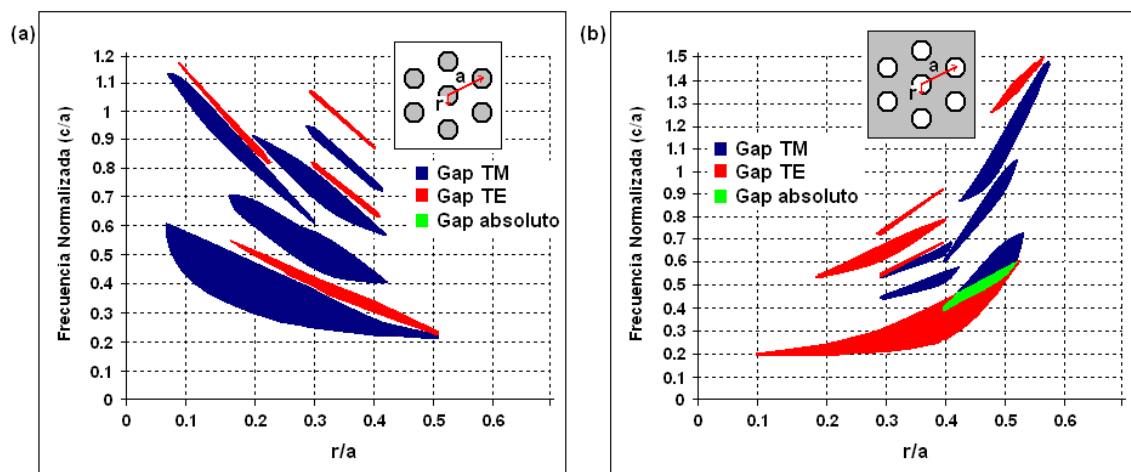


Figura 2.4. Mapa de gaps de la estructura fotónica 2D con distribución hexagonal de columnas de dieléctrico (a), o de aire en dieléctrico (b), en función del radio de las columnas. Se observa un comportamiento similar al de la figura 2.3, aunque el aumento de la densidad de celdas incrementa el número de gaps y genera gaps absolutos en la respuesta óptica de la estructura.

No obstante, el aumento de la porosidad en la estructura hexagonal es considerablemente mayor que en la estructura cuadrada (véanse las fórmulas de la porosidad definidas al principio de este apartado), y además la estructura hexagonal posee un mayor número de simetrías (un hexágono tiene más simetrías de rotación e inversión que un cuadrado) lo que provoca que la zona de Brillouin sea más parecida a una zona circular. Debido a esto, los gaps de los modos TE son más numerosos que en el caso de la distribución cuadrada, llegando a aparecer en la configuración de columnas dieléctricas (figura 2.4a), y además formando gaps absolutos en la configuración de columnas de aire (figura 2.4b alrededor de la frecuencia normalizada 0.5).

Por todo lo detallado hasta ahora podemos concluir la gran importancia que tiene la porosidad y la distribución geométrica de las estructuras sobre sus propiedades ópticas: a mayor porosidad, mayor número de gaps y de mayor anchura espectral; a mayor número de simetrías, mayor número de gaps y de ambos modos de propagación; y, por su parte, estructuras dieléctricas aisladas (columnas de dieléctrico) favorecen la aparición de gaps de los modos TM, mientras que estructuras dieléctricas conectadas (columnas de aire) favorecen la aparición de gaps de los modos TE.

## 2. Cristales fotónicos tridimensionales.

En el apartado anterior se han presentado las propiedades de los cristales 2D. En este apartado centraremos el estudio en la modulación del cristal en la tercera dimensión, manteniendo una distribución superficial del cristal con estructura cuadrada y periodicidad  $a_x=a_y=a$ .

El estudio de la modulación del cristal en la tercera dimensión se realizará basándonos en estructuras que, como en el apartado anterior, pueden ser fácilmente fabricadas mediante el proceso de ataque electroquímico. Todos los resultados obtenidos en este apartado corresponden a simulaciones de estructuras basadas en silicio macroporoso con constante dieléctrica  $\epsilon=11.7$  y macroporos de aire con  $\epsilon=1$ .

### *2.1. La modulación senoidal.*

Lo que resulta indispensable, si pretendemos controlar la propagación de la luz en el interior de un cristal fotónico, es realizar estructuras que presenten un gap en su respuesta espectral. La modulación senoidal que presentamos en este proyecto cumple su cometido, aunque solamente en la dirección de propagación paralela a los poros. No obstante, como mostramos al final del documento, en el anexo sobre aplicaciones de los cristales fotónicos, esto no significa que el gap deje de existir para una incidencia de la luz oblicua, pues, en realidad, el gap sigue existiendo más allá de la incidencia normal, para ángulos de incidencia mayores, aunque su anchura espectral se va reduciendo progresivamente.

Si nos fijamos en la figura 2.5b entenderemos de qué estamos hablando: la relación de dispersión muestra un gap solamente en la dirección  $\Gamma$ -A (la dirección del poro), y ningún gap en el resto de direcciones perpendiculares al poro. Pero para ángulos de incidencia intermedios (mayores que la normal y menores que la perpendicular), el gap seguirá existiendo con una anchura espectral cada vez menor (anexo II).

El cristal se realiza mediante la modulación periódica del diámetro del poro, a medida que éste va creciendo en profundidad. Si consideramos que la superficie de la muestra corresponde al plano XY y la dirección de crecimiento de los poros es el eje Z, entonces el radio del poro a grabar, en cada posición del eje Z, se puede describir con la ecuación (2.2):

$$r = r_0 + \Delta r \cos\left(2\pi \frac{z}{a_z}\right) \quad (2.2)$$

Donde  $r_0$  es el valor nominal, o medio, del radio del poro,  $\Delta r$  determina la amplitud de la modulación y  $a_z$  su periodo. Es interesante notar que el valor de  $a_z$  determina la periodicidad de la estructura en la dirección Z, periodicidad que no tiene por qué ser igual a la periodicidad en el plano XY ( $a_x=a_y=a$ ). Esta característica imprime una gran flexibilidad a la técnica del silicio macroporoso, ya que no estamos limitados a la definición de estructuras cúbicas, sino que podemos definir cualquier contraste entre las constantes  $a_z$  y  $a$ , obteniendo una estructura con simetría tetragonal.

Un ejemplo de la estructura descrita y su relación de dispersión  $\omega(k)$  en el interior de la zona de Brillouin pueden verse en la figura 2.5. Los parámetros estructurales que afectan al comportamiento óptico de la estructura son: el radio nominal (fijado a 0.3a),

la amplitud de la modulación (fijada a  $0.08a$ ), su periodicidad ( $a_z=a$ ), el número total de periodos (en este ejemplo  $=\infty$ ), y la fase inicial, así como la terminación del poro, en su fabricación real.

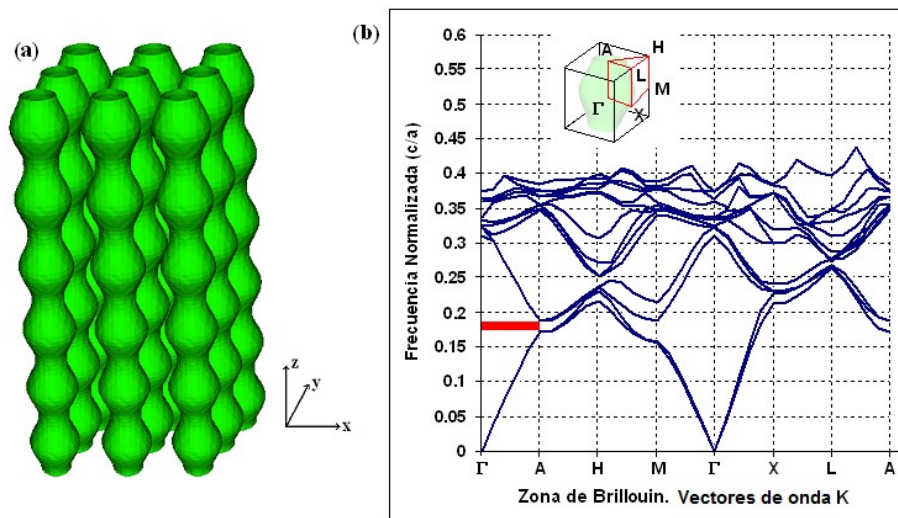


Figura 2.5. (a) Estructura simulada 3D con distribución cuadrada en el plano XY y poros senoidales en la dirección Z. La representación muestra la interfaz aire-silicio, entendiendo que el poro se encuentra en el interior de los cilindros verdes representados, mientras que el material entre poros es el dieléctrico. (b) Relación de dispersión de la estructura con parámetros:  $r_0=0.3a$ ,  $\Delta r=0.08a$  y  $a_z=a=1$ . Los campos se computan dentro de la zona irreducible de Brillouin, representada en el diagrama interior por el volumen A- $\Gamma$ -X-M-H-L.

La relación de dispersión de la figura 2.5 nos muestra la existencia del gap fotónico en la dirección  $\Gamma$ -A, que corresponde con la dirección de las ondas que viajan paralelas al eje del poro. Por otra parte, la estructura no presenta ningún gap para el resto de direcciones del espacio. Ciertamente, el diseño de estructuras tridimensionales, fabricables, y que presenten gaps omnidireccionales es sumamente complicado.

### 2.2. Parámetros intrínsecos de la modulación.

Vamos a estudiar ahora la evolución del gap fotónico generado por la estructura descrita en el apartado anterior, en función de los parámetros intrínsecos de la modulación senoidal, que son  $r_0$ ,  $\Delta r$  y  $a_z$ . El comportamiento del gap puede describirse claramente si nos fijamos en los mapas de las siguientes figuras.

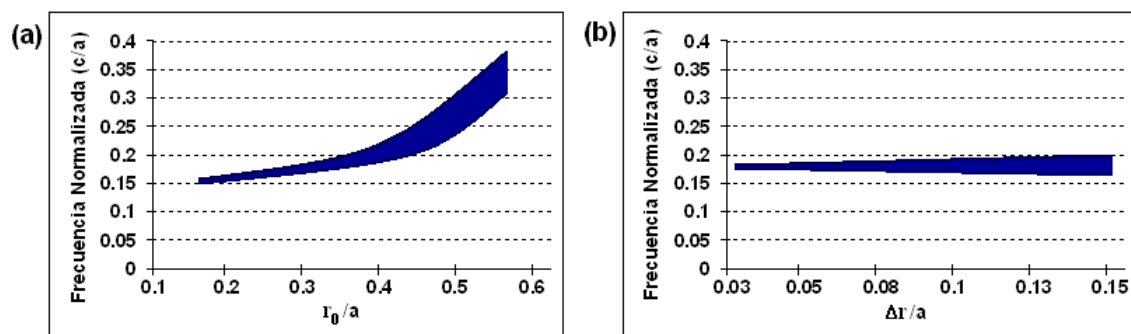


Figura 2.6. Evolución del gap fotónico en función de los parámetros  $r_0/a$ , para  $\Delta r=0.08a$  (a); y  $\Delta r/a$ , para  $r_0/a=0.3$  (b). Observamos un ensanchamiento y desplazamiento hacia frecuencias mayores al aumentar la porosidad (aumentar  $r_0/a$ ), y un ensanchamiento, sin desplazamiento, al aumentar la constante dieléctrica efectiva del medio (aumentar  $\Delta r/a$ ).

El efecto que se produce al incrementar el valor medio del radio de los poros  $r_0$  (figura 2.6a) es un ensanchamiento del gap y su desplazamiento hacia frecuencias mayores. Este comportamiento es debido a que, al incrementar  $r_0$ , estamos incrementando la porosidad de la estructura, aumentando por tanto el contenido de aire en el cristal, y empujando así el gap hacia frecuencias mayores. Esta propiedad de la porosidad de las estructuras fotónicas ya ha sido presentada, y sus efectos descritos aquí confirman los resultados presentados previamente.

Por su parte, al incrementar la amplitud de la modulación  $\Delta r$  se produce un ensanchamiento del gap, tal y como ocurría con el parámetro anterior, pero, como puede verse en la figura 2.6b, la localización del gap permanece invariable en la misma frecuencia. La permanencia del gap en su posición puede entenderse fácilmente si consideramos que, al aumentar la amplitud de la modulación, la misma cantidad extra de poro que grabamos en un máximo, la dejamos de grabar en un mínimo, por lo que la porosidad total de la estructura resulta invariada.

Consideremos ahora el ensanchamiento del gap al aumentar  $\Delta r$ . Allá donde el diámetro del poro es máximo, hay un máximo de aire y un mínimo de dieléctrico, por lo que el índice de refracción efectivo en ese punto es mínimo, por otra parte, allá donde el diámetro es mínimo, hay un mínimo de aire y un máximo de dieléctrico, y el índice de refracción efectivo alcanza su máximo. Podríamos aproximar nuestro cristal, solamente para entender su comportamiento espectral, por una estructura 1D de capas alternas de  $\epsilon$  efectiva alta y baja (como la estructura presentada en la figura 1.1a): ahora entendemos que aumentar  $\Delta r$  implica aumentar el contraste entre las zonas con alta y baja  $\epsilon$ , lo que provoca el ensanchamiento del gap que observamos, pero no su desplazamiento en frecuencia al no modificarse la porosidad total.

Finalmente, podemos estudiar el efecto provocado por cambios en la periodicidad del poro. En este caso, la posición espectral del gap varía, pero no así su amplitud. Este efecto puede verse en la figura 2.7 y se entiende si seguimos el mismo razonamiento anterior: aproximamos el cristal por una estructura unidimensional de capas dieléctricas de alta y baja constante efectiva, al modificar la periodicidad  $a_z$  provocamos un cambio en la anchura de dichas capas dieléctricas, no así en su  $\epsilon$  efectiva. Modificar su tamaño provocará que las nuevas interferencias constructivas y destructivas, debidas a las múltiples reflexiones en el interior del cristal, ahora se cumplan para otros modos (distintas frecuencias) distintos a los de antes, y la posición del gap se desplaza.

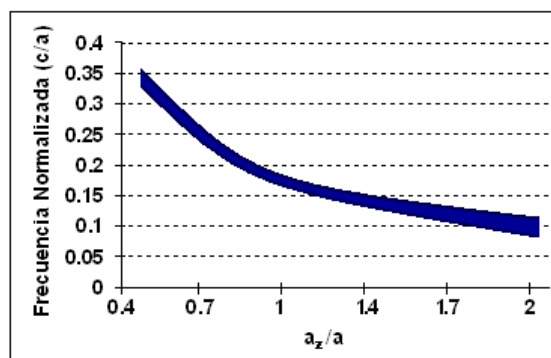


Figura 2.7. Evolución del gap fotónico en función de la ratio  $a_z/a$ . La variable  $a$  corresponde a la periodicidad del cristal en el plano XY (donde su distribución es cuadrada), mientras que la variable  $a_z$  denota la periodicidad de la distribución senoidal en la dirección Z. El resto de parámetros estructurales son  $r_0/a=0.3$  y  $\Delta r=0.08a$ .

### 2.3. Parámetros de la estructura finita.

Hasta ahora hemos considerado estructuras ideales en las que su periodicidad se extiende hasta el infinito. No obstante, ésta no es una situación real, ya que a la hora de fabricar un cristal fotónico determinado, el número de periodos que conformarán la estructura debe ser especificado, así como la fase inicial del poro (ya que la modulación es senoidal) y la forma como el poro terminará. Los efectos de considerar una estructura finita deben pues ser estudiados.

La influencia del número de periodos sobre el comportamiento de la estructura, y del gap fotónico en concreto, puede verse en la figura 2.8. El gap fotónico se corresponde con una región espectral de reflexión total (transmisión cero). Podemos ver en la figura cómo al aumentar el número de periodos el gap se hace más evidente y su región de reflexión se acerca al 100% (reflexión total), partiendo de una situación de no-gap (o gap incompleto) si consideramos una estructura con solamente 5 periodos. También podemos observar desplazamientos de la frecuencia central del gap, lo cuál constituye una de las principales características a tener en cuenta a la hora de diseñar las estructuras fotónicas.

Del estudio llevado a cabo se extrae que el número de periodos necesario para que el cristal presente unas buenas propiedades ópticas debe ser superior a 15. Aunque, como veremos, imperfecciones surgidas durante el proceso de fabricación empeorarán la respuesta óptica de la estructura, por lo que para alcanzar unas propiedades aceptables, tanto a nivel de “calidad” del gap, como a nivel de estabilidad en su frecuencia central, es preferible trabajar con un número de periodos superior a 20-25.

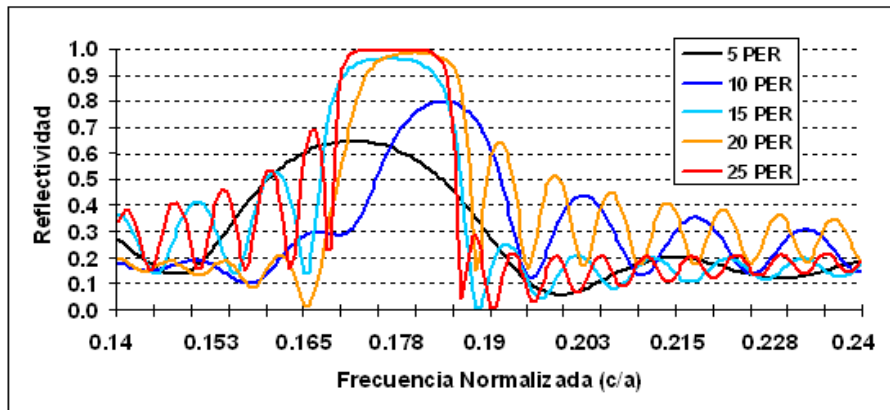


Figura 2.8. Reflectividad de la estructura, en la región definida por el gap fotónico, en función del número de periodos que conforman los poros del cristal. Se observa una clara mejora de las propiedades del cristal conforme aumenta el número de periodos de la estructura. Entendemos como gap fotónico la región espectral de reflectividad  $R=1$ . Parámetros de la estructura:  $r_0/a=0.3$ ,  $\Delta r=0.08a$  y  $a_z=a$ .

También se ha estudiado el efecto de incluir una fase inicial a la modulación, es decir, el poro puede empezar a formarse por su diámetro mínimo, máximo, o en una situación intermedia. Este estudio se justifica si recordamos que, para poder formar los poros y conformar el carácter de cristal a la estructura, después del proceso de litografía, debemos grabar unas pequeñas pirámides invertidas para guiar el crecimiento de los poros. Esto impide, de hecho, que la modulación de los poros pueda empezar en un mínimo.



Del mismo modo que incluimos una fase inicial, también podemos decidir sobre la fase final. Controlando la iluminación trasera de la muestra podemos, fácilmente, decidir si los poros acabarán en un máximo, un mínimo o un tamaño intermedio. Las repercusiones sobre el comportamiento óptico del cristal también se han estudiado. La terminación de los poros, después del ataque electroquímico, tiene usualmente una forma de semicircunferencia por las propiedades del proceso (la corriente crítica  $J_{ps}$  se alcanza en una pequeña área en la punta de los poros, decayendo a su alrededor, por lo que al apagar la iluminación, primero se agotarán los portadores alrededor de la punta del poro antes que en la propia punta, dando esta forma redondeada).

En la figura 2.9 pueden verse varias fotografías tomadas con el microscopio SEM del comienzo y terminación de los poros que muestran lo anteriormente descrito.

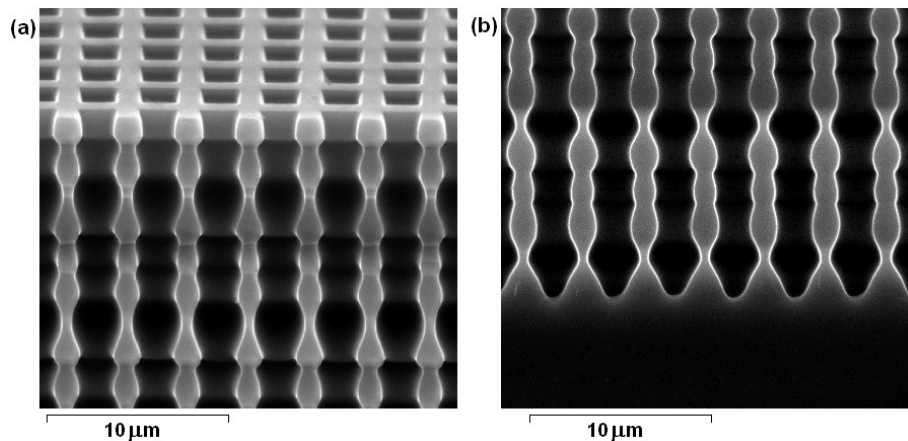


Figura 2.9. Fotografías SEM ilustrando cómo a consecuencia de la grabación de una pirámide invertida, el comienzo del poro siempre es un máximo de la modulación (a); y cómo a consecuencia de las propiedades del proceso, la terminación del poro es en semiesfera (b).

En la figura 2.10 podemos ver el efecto sobre el comportamiento de la estructura para distintas fases iniciales y finales. En la figura 2.10a (fase inicial del poro) se observan desplazamientos de la frecuencia central del gap a medida que el poro empieza con diámetro máximo en vez de mínimo. También existen cambios significativos en el comportamiento óptico alrededor del gap, propiedad que deberá tenerse en cuenta en aquellas aplicaciones que precisen una baja reflexión en frecuencias inferiores o superiores a la banda del gap.

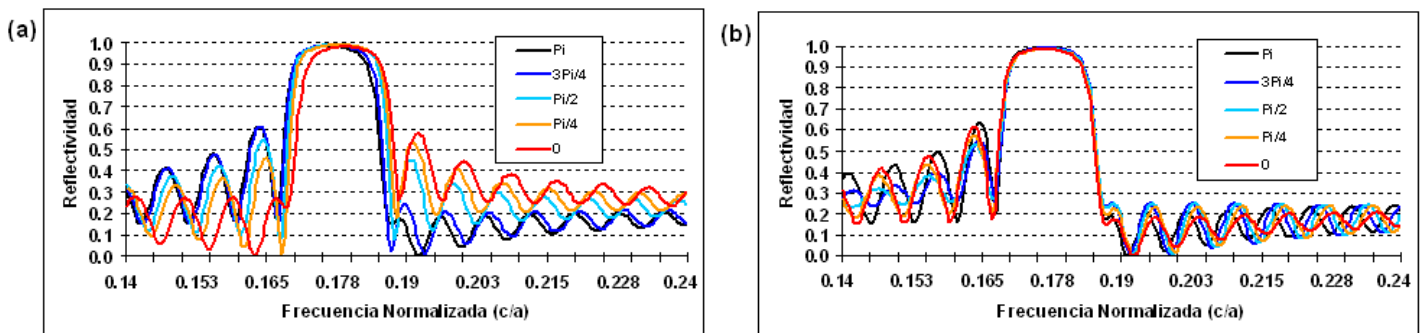


Figura 2.10. Reflectividad de la estructura en la zona del gap para distintos valores de (a) la fase inicial del poro, y (b) la fase final en la que termina el poro. Parámetros de la estructura:  $r_0/a=0.3$ ,  $\Delta r=0.08a$ ,  $a_z=a$  y 20 periodos. Se observa claramente cómo la morfología del comienzo del poro es mucho más crítica que la de su finalización.



Los desplazamientos en frecuencia tienen una gran importancia, vamos a estudiar algunos valores: el número de periodos de la estructura con el que se han realizado las simulaciones es de 20, lo que estabiliza la frecuencia de la posición del gap. Aún así vemos desplazamientos entre la frecuencia normalizada 0.176 (para una fase inicial de  $\pi$ ) y 0.179 (para una fase inicial de 0), lo que, asignando un valor a la periodicidad de la estructura de  $a=4\mu\text{m}$  (valor con el que hemos fabricado todos los cristales fotónicos del presente proyecto), representa un desplazamiento de 380 nm, el cuál no es precisamente un valor despreciable.

Por su parte, también podemos estudiar el efecto de la fase final del cristal (figura 2.10b). El tamaño de la semiesfera descrita en el parágrafo anterior vendrá determinado directamente por la fase del poro con la que acabemos el proceso. Como vemos, el efecto en este caso es mucho menos representativo, por lo que disponemos de una mayor libertad al diseñar las finalizaciones de los poros.

#### 2.4. Defectos en la dirección de propagación.

Una de las propiedades más interesantes de los cristales fotónicos es su capacidad para “atrapar” la luz. Este efecto se produce mediante la inclusión de defectos en el interior del cristal ideal, defectos que introducen modos permitidos en la región espectral del gap fotónico (figura 2.11b). La consecuencia que se produce cuando los fotones alcanzan la cavidad en la que sí están permitidos (por efecto túnel, por ejemplo), pero se ven rodeados del cristal fotónico dónde su propagación está prohibida, es la acumulación de energía del modo y su localización luz en dicho defecto (o cavidad en 3D).

Este hecho único tiene una gran utilidad en el campo, entre otros, de los procesos no lineales, ya que para que se produzcan los efectos de la óptica no lineal usualmente necesitamos campos de gran potencia, los cuáles se pueden alcanzar si acumulamos energía en el defecto y atrapamos el modo en el cristal. Por esta razón vamos a realizar en este apartado un pequeño estudio sobre la inclusión de defectos en una estructura perfectamente periódica. Aunque el estudio podría ser mucho más extenso, en este proyecto sólo se pretende mostrar una visión general del comportamiento de los cristales fotónicos.

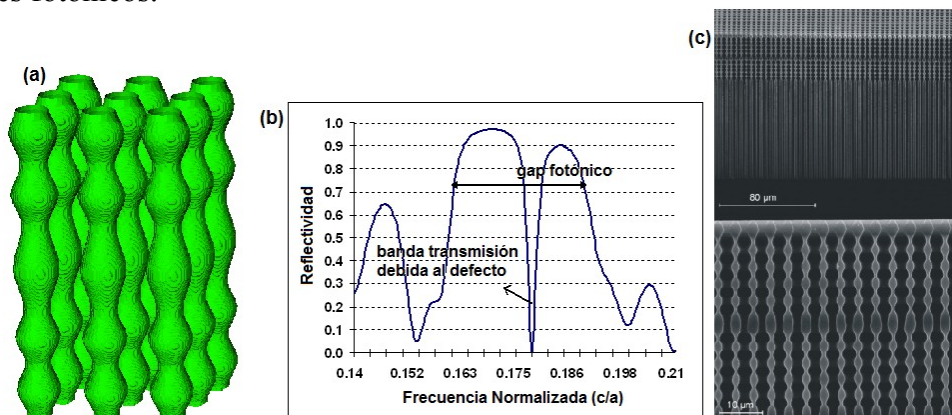


Figura 2.11. (a) Estructura 3D simulada con distribución cuadrada en el plano XY y poros modulados con inclusión de defecto en la dirección Z. La representación es del mismo estilo que la mostrada en la figura 2.5. (b) Diagrama de reflectividad de la estructura simulada. Se observa una pequeña banda de transmisión en el centro del gap, como consecuencia de la inclusión del defecto en la modulación. (c) Fotografías SEM de una estructura fotónica fabricada en el departamento que incluye un defecto en el poro. Las fotografías muestran la viabilidad de la fabricación de estructuras con defectos.

Partiremos de una estructura con distribución cuadrada en el plano XY y modulación senoidal en la dirección Z (figura 2.11a). El defecto consiste, simplemente, en cambiar el tamaño de uno de los periodos ideales ( $a_{def} > a_z$ ). Como la existencia de un defecto rompe la simetría de traslación del cristal, el concepto de *zona de Brillouin* no puede ser definido, por lo que hay que estudiar directamente el diagrama de reflexión-transmisión.

La respuesta óptica de una estructura con defecto consiste en la formación de una banda de frecuencias permitidas, o pico de transmisión, en medio del gap fotónico. Debemos comentar que, dado que el defecto tiene la misma modulación senoidal que el resto de la estructura, con excepción de su longitud por supuesto, la respuesta espectral del pico de transmisión está sometida a las mismas consideraciones y propiedades que el resto de la estructura periódica. Esto significa que, como ya hemos presentado, variaciones del radio, la amplitud y el periodo del defecto, provocarán desplazamientos del pico a lo largo del gap, así como variaciones de su ancho de banda y profundidad.

Una manera de caracterizar la banda generada por el defecto es estudiar su *factor de calidad* (Q), el cuál se define como el cociente entre la frecuencia central del pico y su ancho de banda a 3dB. El máximo del *factor de calidad* se consigue situando el defecto en el centro de la estructura periódica, así el modo inducido por éste tiene un máximo de aislamiento dentro del cristal (los estados de energía permitidos se localizan más fuertemente en el centro de la estructura que en sus bordes).

Además, si queremos un pico de transmisión lo más estrecho posible, éste debe situarse en el centro del gap fotónico. Si repasamos los resultados del apartado 2.2 recordaremos que podíamos desplazar el espectro en frecuencia mediante la modificación de la periodicidad, por lo que, análogamente, podemos desplazar el pico de transmisión a lo largo del gap controlando su longitud  $a_{def}$  (figura 2.12a).

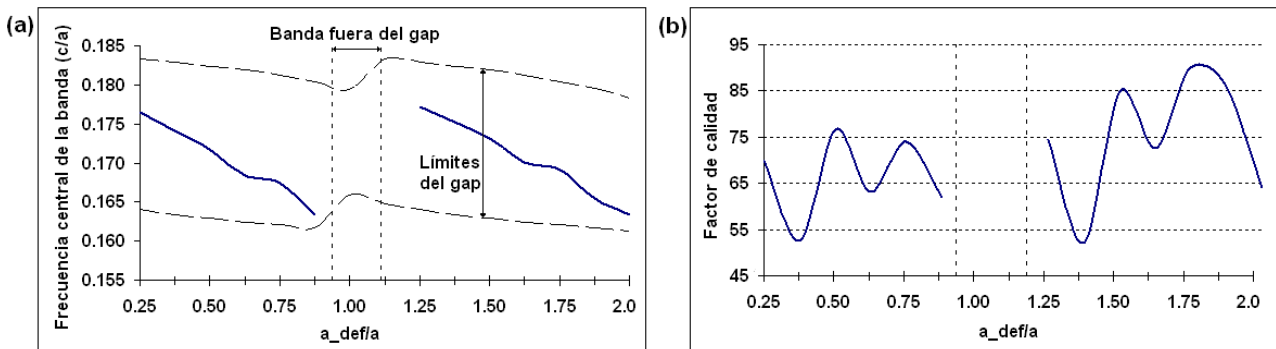


Figura 2.12. Evolución de la frecuencia central de la banda de transmisión situada en el interior del gap (a) y de su factor de calidad (b) en función de la longitud del defecto  $a_{def}/a$ . El factor de calidad es el cociente entre la frecuencia central y el ancho de banda de la banda de transmisión ( $Q=f/\Delta f$ ).

### 2.5. Fabricación de cristales fotónicos 3D mediante silicio macroporoso.

En el primer capítulo de este documento se ha presentado el estado del arte de la tecnología empleada para la fabricación de los cristales fotónicos mediante un ataque electroquímico del silicio. En este apartado vamos a presentar algunas muestras de cristales fabricados mediante la tecnología del silicio macroporoso, así como su respuesta espectral.

En concreto vamos a centrarnos en el estudio de la porosidad de una estructura con distribución cuadrada en plano y modulación senoidal de los poros tridimensionales, con periodicidades  $a_x=a_y=a_z=4\mu\text{m}$ , y sin ningún defecto. El número de periodos que conforman el poro es de 21, y sus parámetros iniciales  $d_0=2.6\mu\text{m}$  y  $\Delta r=0.3\mu\text{m}$ .

En la figura 2.13 se presentan tres fotografías SEM de la misma estructura: en la primera vemos la estructura recién fabricada, en la segunda vemos la misma estructura tras 7 oxidaciones (ensanchada unos 700 nm), y en la tercera, tras 15 oxidaciones (los poros se conectan como esferas de aire que se superponen en una red cúbica, tras una oxidación aproximada de  $1.5\mu\text{m}$ ).

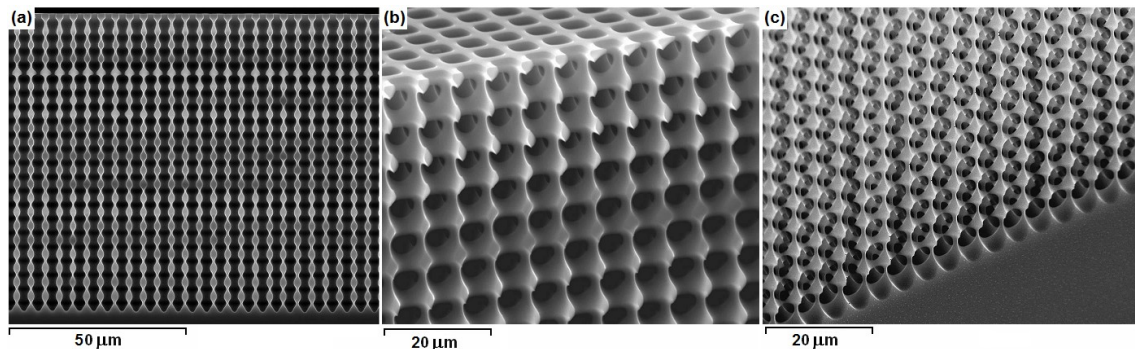


Figura 2.13. Fotografías SEM de una estructura fotónica con distribución cuadrada en plano y modulación senoidal de los poros ( $a_x=a_y=a_z=4\mu\text{m}$ ). La estructura consta de 21 periodos y su porosidad es variable en función del número de oxidaciones que ha sufrido la muestra (hasta llegar a conectarse los poros): (a) 0 oxidaciones, (b) 7 oxidaciones y (c) 15 oxidaciones.

En la figura 2.14 está representado el mapa de gaps de la muestra descrita en la figura anterior, en función de su porosidad [15]. Como vemos, los resultados experimentales confirman los teóricos sobre el aumento de la porosidad en las estructuras fotónicas: la anchura y número de gaps aumenta conforme aumentamos la porosidad. La caracterización óptica se ha realizado con un espectrómetro de Fourier infrarrojo Bruker Vertex 70 (en el Anexo I de este documento se trata con más detalle la caracterización con FTIR).

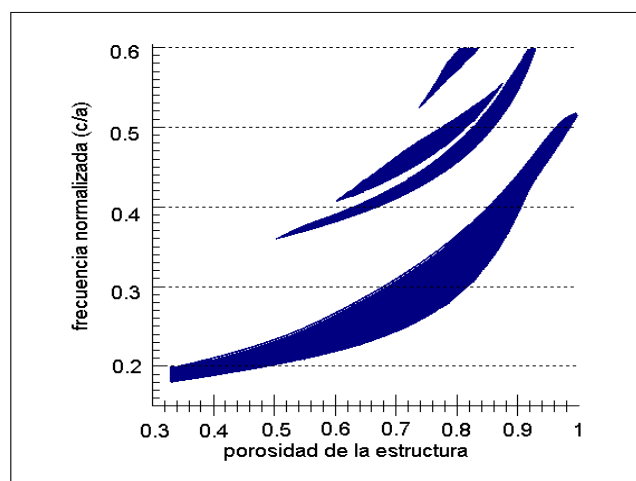


Figura 2.14. Mapa de gaps de la estructura anteriormente descrita en la figura 2.13 en función de la porosidad de la estructura. La porosidad se describe como la proporción de aire en la celda unitaria que define la modulación periódica. Podemos ver cómo el número de gaps, así como su posición y anchura espectral aumentan en proporción con el aumento de la porosidad de la estructura [15].

### Capítulo III. Propiedades ópticas de los cuasi-cristales fotónicos.

El concepto de cuasi-cristal es una extensión natural del concepto de cristal fotónico, en el que la periodicidad de traslación desaparece para pasar a hablar de un orden cuasi-periódico. Del propio concepto se extrae que, dado que los cuasi-cristales son estructuras *casi* cristalinas, deben mantener, *casi*, las propiedades de los cristales fotónicos. En este capítulo veremos cómo, en efecto, se mantienen las propiedades ópticas presentadas hasta ahora, y estudiaremos las nuevas propiedades introducidas por la pérdida de periodicidad.

El gap fotónico en los cristales periódicos ideales es consecuencia de la periodicidad de la estructura. Por lo tanto, la pregunta fundamental es: ¿existen gaps fotónicos en los cuasi-cristales que no presentan ningún orden periódico? En la introducción de este trabajo hemos mencionado que el gap fotónico es el equivalente óptico del gap electrónico del semiconductor, que es consecuencia de la estructura cristalina del propio cristal. En este caso, los semiconductores amorfos también presentan gaps que son comparables a los gaps de los semiconductores cristalinos. ¿Serán entonces las propiedades ópticas de los cuasi-cristales fotónicos análogas a las propiedades los semiconductores amorfos? En este capítulo demostraremos que los cuasi-cristales también pueden presentar gaps fotónicos, sin que exista simetría de traslación discreta, o lo que es lo mismo, sin ninguna distribución periódica.

El objetivo del presente capítulo es presentar y estudiar dos estructuras cuasi-cristalinas. La primera estructura se construye modulando el poro del cristal en base a una secuencia aperiódica definida previamente: en este proyecto nos basaremos en la secuencia de Fibonacci. La segunda estructura que presentaremos es un cristal llamado *chirped*: la longitud de los periodos modulados aumenta linealmente desde un valor mínimo, en el primer periodo del poro, hasta una longitud máxima en el último periodo.

Como se observa de la descripción de las estructuras, siempre trabajamos con la rotura de la simetría de traslación en la dirección Z del cristal, mientras que mantenemos la distribución en el plano XY como una estructura cuadrada de periodicidad  $a$ . Esto es debido a la flexibilidad de la técnica de ataque electroquímico del silicio, que nos permite modular fácilmente los poros del cristal, mientras que por su parte, romper la periodicidad en la superficie de las muestras requiere del diseño de nuevas máscaras para el proceso de litografía.

Debido, por lo tanto, a que los cuasi-cristales quedan definidos por la modulación en el eje del poro, las propiedades ópticas que estudiaremos aparecerán principalmente en la dirección Z del cristal, por lo que es ahí donde trabajaremos.

El estudio llevado a cabo es similar al desarrollado en el capítulo II del proyecto, con la salvedad que en este capítulo se han añadido un mayor número de resultados experimentales. La razón es simple: las propiedades de los cuasi-cristales, a diferencia de las de los cristales ideales, son poco conocidas, por lo que la fabricación de los cuasi-cristales, su medida y su caracterización se hacen mucho más necesarias que en el apartado anterior.

A modo de avance, vamos a ver en este capítulo que la propiedad más destacable de los cuasi-cristales fotónicos es su habilidad para prohibir la propagación de ondas en un amplio margen espectral: los gaps fotónicos de los cuasi-cristales son mucho más numerosos y de mayor ancho de banda que los de los cristales ideales presentados en el capítulo II. Aunque, como veremos, también nos encontramos con una mayor dificultad a la hora de fabricar estos cuasi-cristales. Prohibir un gran número de bandas espectrales permite concentrar la emisión de radiación en una banda del espectro más reducida, comportamiento cuya utilidad presentaremos en el anexo II del proyecto.

## 1. Cuasi-cristales de Fibonacci.

La secuencia de Fibonacci es ampliamente conocida: el primer elemento de la serie es 0, el segundo es 1, y a partir de aquí, cada elemento de la serie se forma a partir de la suma de los dos anteriores, dando como resultado la secuencia 0, 1, 1, 2, 3, 5, 8, 13... Matemáticamente puede definirse la siguiente relación de recurrencia:

$$F_n = \begin{cases} 0 \rightarrow n = 0 \\ 1 \rightarrow n = 1 \\ F_{n-1} + F_{n-2} \rightarrow n > 1 \end{cases} \quad (3.1)$$

No obstante, lo que nosotros queremos construir es una estructura cristalina, no una secuencia de números, por lo que la ecuación anterior queda alterada de la siguiente manera: ahora los elementos de la serie no serán números, sino, digamos, objetos. El elemento  $F_0$  corresponderá a un objeto que llamaremos  $A$ , y el elemento  $F_1$  a un objeto que llamaremos  $B$ , el resto de elementos de la secuencia se formarán, como secuencia de Fibonacci, mediante la suma de los dos elementos precedentes:

$$F_n = \begin{cases} A \rightarrow n = 0 \\ B \rightarrow n = 1 \\ F_{n-1} + F_{n-2} \rightarrow n > 1 \end{cases} \quad (3.2)$$

Ahora bien, dada la propiedad conmutativa de la suma, el elemento  $F_i$  de la secuencia definida por la ecuación (3.1) se forma tanto para  $F_i = F_{i-1} + F_{i-2}$  como para  $F_i = F_{i-2} + F_{i-1}$ . No obstante, cuando sustituimos los enteros por objetos, no obtenemos la misma serie si el orden de la suma es  $F_{i-1} + F_{i-2}$  que si es  $F_{i-2} + F_{i-1}$ . Por esta razón debemos estudiar el comportamiento óptico, tanto a nivel teórico como experimental, de las dos secuencias de Fibonacci resultantes de romper esta propiedad conmutativa. En las siguientes ecuaciones (3.3) se muestran los diferentes órdenes de las series de Fibonacci  $\{S\}$  y  $\{S'\}$ :

$$\begin{array}{ll} S = \{S_{n-1}, S_{n-2}\} & S' = \{S_{n-2}, S_{n-1}\} \\ S_0 = \{A\} & S'_0 = \{A\} \\ S_1 = \{B\} & S'_1 = \{B\} \\ S_2 = \{BA\} & S'_2 = \{AB\} \\ S_3 = \{BAB\} & S'_3 = \{BAB\} \\ S_4 = \{BABBA\} & S'_4 = \{ABBAB\} \\ S_5 = \{BABBABAB\} & S'_5 = \{BABABBAB\} \\ S_6 = \{BABBABABBABBA\} & S'_6 = \{ABBABBABABBAB\} \\ \dots & \dots \end{array} \quad (3.3)$$

La diferencia es sustancial si observamos las consecuentes estructuras fotónicas: en la serie  $\{S\}$ , el comienzo de los diferentes cristales es siempre idéntico al de su predecesor, añadiendo posteriormente los nuevos elementos; mientras que en la serie  $\{S'\}$ , cada cristal comienza por una sucesión de elementos distinta a la de su predecesor en la serie.

Podemos suponer, partiendo del estudio que ya hemos llevado a cabo en el proyecto hasta este punto, que conforme avancemos en la serie de Fibonacci, los nuevos cristales irán presentando gaps más pronunciados y estables, pero centrados en las mismas bandas espectrales, pues cada cristal es una evolución de mayor longitud que su anterior en la secuencia de Fibonacci.

Hasta ahora hemos presentado la serie de Fibonacci como la base para generar cristales cuasi-periódicos, así como su algoritmo de generación, no obstante, no hemos aclarado cómo vamos a diseñar los cristales fotónicos, basados en silicio macroporoso, a partir de estas series. Los cuasi-cristales de Fibonacci se definen de la siguiente manera: la distribución en el plano XY del cristal, correspondiente a la superficie de la oblea de silicio, se mantiene cuadrada con periodicidades  $a_x=a_y=a$ ; mientras que en el eje del poro se grabarán periodos alternos de los elementos A y B, según la secuencia que corresponda (relaciones 3.3). Los elementos A y B serán sendas modulaciones senoidales, pero de distinto periodo, radio y amplitud de la modulación.

De este modo, un cuasi-cristal de Fibonacci se define como una modulación a lo largo del eje del poro, en el que dos elementos senoidales se alternan en secuencia no-periódica. El orden en que serán grabados los distintos periodos será definido por el orden de la serie (ecuaciones 3.3). En la siguiente figura 3.1 se muestran dos ejemplos de cuasi-cristales de Fibonacci: en la figura 3.1a se representa una simulación de un cuasi-cristal de orden 5 ( $\{S_5\}=[BABBABAB]$ ), donde el elemento A tiene longitud  $2a$ , y el elemento B,  $a$  (el resto de parámetros son idénticos para ambos elementos:  $r_0=0.3a$  y  $\Delta r=0.08a$ ); y en la figura 3.1b se muestra una fotografía SEM de un cuasi-cristal de orden 8 ( $\{S_8\}=[BABBABABBABBABABBABBABBABBABBABBABBABBABB]$ ), donde el elemento A tiene  $5\mu m$  de periodo, y el B,  $2\mu m$ .

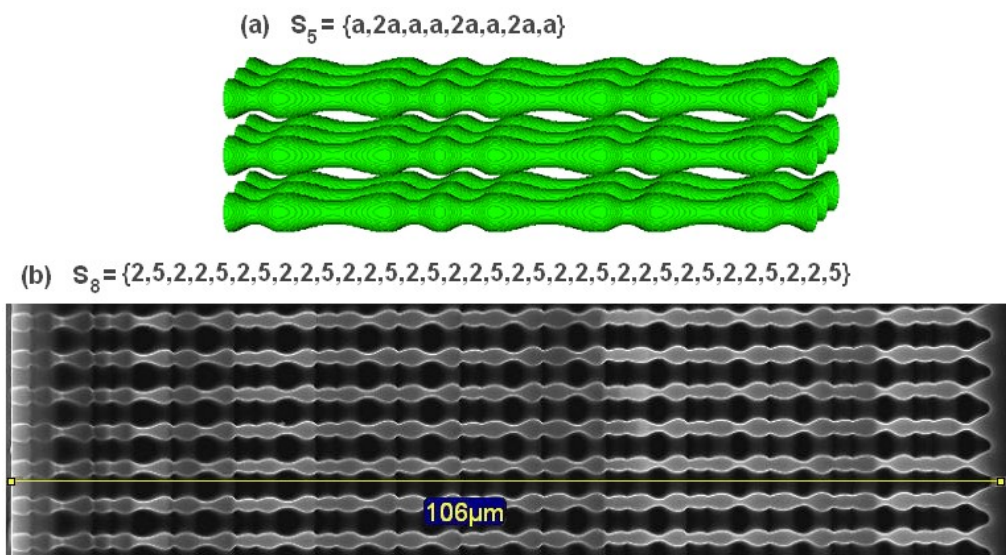


Figura 3.1. (a) Simulación de un cuasi-cristal de Fibonacci de orden 5.  
 (b) Fotografía SEM de un cuasi-cristal de Fibonacci de orden 8.

### 1.1. Propiedades de la serie de Fibonacci. Secuencias periódicas.

Volviendo a los resultados presentados en el apartado 2.3 del capítulo II, sobre el efecto que el número de periodos que conforman la estructura tiene sobre las propiedades ópticas de ésta, recordemos que tomábamos como 15 el número mínimo de periodos



para que la estructura mostrase gaps claramente definidos. Este número, desde el punto de vista de la fabricación, debe ser algo superior, ya que ya comentamos que las imperfecciones derivadas del proceso de fabricación hacen que los periodos de los poros no sean idénticos, contribuyendo a empeorar las propiedades ópticas de la estructura.

Esta idea debe estar muy presente a la hora de estudiar los cuasi-cristales de Fibonacci, ya que cada orden de la serie consta de un número distinto de periodos. Si nos fijamos, por ejemplo, en los cristales de orden 2, se hace evidente que no podemos fabricar un cristal cuyo poro esté formado únicamente por dos periodos, pues no presentaría ningún gap. No obstante, lo que sí podemos hacer es repetir periódicamente la secuencia de orden 2  $[BA]$  hasta que el cristal tenga la longitud suficiente para presentar sus propiedades, claro está que entonces introducimos una cierta periodicidad en la estructura.

Atendiendo a este efecto, en este apartado realizaremos dos tipos de estudios: un primer análisis en el que repetiremos las secuencias de Fibonacci de manera periódica, equiparando así la longitud de todos los cuasi-cristales sea cuál sea su orden, y evitando así la dependencia de los resultados con el tamaño del cristal; y un segundo análisis sin alterar las secuencias cuasi-periódicas, por lo que, en este último, solamente podremos comparar las respuestas espectrales de los cuasi-cristales de orden 7, 8 y 9, pues el resto tienen un tamaño demasiado pequeño. Ello implica que del primer estudio solamente podremos extraer conclusiones acerca del número de gaps y su posición, pero no de su aspecto, ya que éste estará influenciado por la periodicidad introducida para conseguir secuencias del mismo grosor.

Para poder comparar los resultados de las diversas secuencias, en este primer estudio en el que repetimos las secuencias de forma periódica, computaremos las estructuras con el método de ondas planas, que repite la estructura predefinida hasta el infinito. El método de ondas planas se puede aplicar en este caso porque analizamos una estructura periódica, cuya celda unitaria consiste en la secuencia de cada orden de la serie de Fibonacci. El método es conocido como método de la supercelda [22], y se puede usar también para calcular cristales fotónicos con rotura de la simetría local, como por ejemplo: cristales con defectos, guías de onda, etc...

Además, en este primer estudio en el que repetimos las estructuras hasta el infinito, se hace innecesario distinguir entre las series  $\{S\}$  y  $\{S'\}$ , ya que al hacer todas las secuencias periódicas, éstas dejan de tener principio y fin, y cada orden de ambas series pasa a ser la misma secuencia idénticamente.

Las estructuras simuladas son como la presentada en la figura 3.1a, con un elemento A de periodo  $z_A=2a$  y un elemento B de periodo  $z_B=a$ , radios y amplitudes de  $r_0=0.3a$  y  $\Delta r=0.08a$  para ambos. Además, el estudio de los diagramas de dispersión son del mismo tipo que el presentado en la figura 2.5b, por lo que, como ya hicimos, pasaremos directamente al estudio de los diagramas de gaps en función del orden de la serie.

En la figura 3.2 está representado un mapa, un tanto atípico, que muestra la evolución de los gaps de las diversas estructuras conforme avanzamos en la serie cuasi-periódica de Fibonacci. La particularidad más característica que observamos resulta ser la aparición de múltiples gaps fotónicos conforme avanzamos a través de la secuencia. Los



diferentes cristales presentan, progresivamente, un nuevo gap más que el cristal que les precede en la serie.

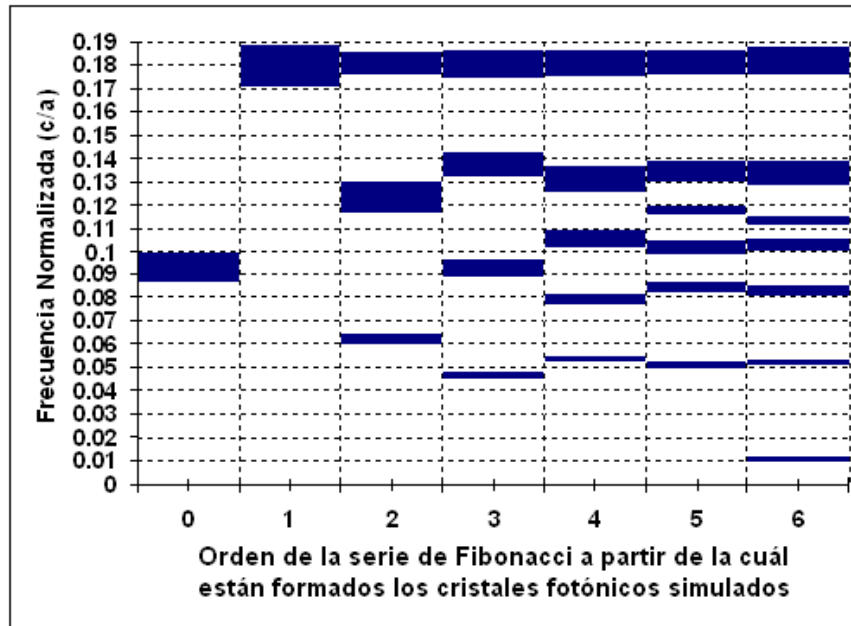


Figura 3.2. Mapa de gaps de los cristales formados a partir de la serie de Fibonacci. Partiendo del orden 0 (cristal periódico de elementos A) y 1 (cristal periódico de elementos B) de la serie, correspondiente a cristales cuyos poros están formados por una sucesión de periodos constantes de longitud “2a” y “a” respectivamente, hasta el orden 6 de la serie, correspondiente a un cristal cuyos poros se forman por combinación de los elementos A=2a y B=a en secuencia en la secuencia de Fibonacci descrita. Se observa la generación de multi-gaps conforme avanzamos en el orden de los distintos cristales.

Además, podemos ver que también existe un efecto de estrechamiento en los gaps de los diferentes cristales, ya que todos ellos se sitúan en frecuencias inferiores al 0.187 (c/a) que define el último gap, correspondiente a la estructura  $\{S_n\}=[B]$ . Este resultado se corresponde con el presentado en el apartado 2.2, del capítulo II, sobre la evolución de los gaps fotónicos en función del parámetro periodicidad  $a_z$ .

La última propiedad destacable es el efecto de pequeños desplazamientos en frecuencia de los gaps. Los diferentes gaps generados por los distintos cristales no presentan, por tanto, una estabilidad en frecuencia, ni tampoco en ancho de banda fijo. Cada cristal presenta unas propiedades distintas aunque no independientes de su predecesor, ya que las propiedades ópticas de cada orden de la serie son similares.

Como observamos en el diagrama de la figura 3.2, cada orden de la serie (cada cristal formado a partir de la secuencia correspondiente) prohíbe un espacio mayor del espectro de frecuencias, siempre por debajo de una cierta frecuencia en la que se sitúa el gap más alejado. Esto significa que si diseñamos los parámetros de la estructura para prohibir, por ejemplo, la propagación de radiación infrarroja, cada nuevo cuasi-cristal de un orden mayor suprimirá más bandas infrarrojas.

(En este ejemplo, la constante de periodicidad debe ser diseñada para que el gap a frecuencia mayor, situado a 0.187 (c/a), se corresponda con una longitud de onda de, digamos,  $\lambda=1\mu\text{m}$ , por lo que tenemos  $a=0.187\mu\text{m}$ . A partir de aquí, cada cristal prohibirá un espectro mayor a partir de  $\lambda=1\mu\text{m}$ )

## 1.2. Propiedades de la serie de Fibonacci. Secuencias cuasi-periódicas.

Pasemos ahora a estudiar el comportamiento propio de la pérdida de la simetría de traslación en el cristal, lo cuál le otorga su carácter de cuasi-cristal, mediante la computación de las estructuras definidas a partir de las series de orden 7, 8 y 9, sin incurrir en repeticiones periódicas. En la figura 3.3 están representadas las formas de los poros de cada uno de los cristales que estudiaremos (poros que se repiten a lo largo del plano XY, con distribución cuadrada, formando así el cristal 3D). Los parámetros estructurales se mantienen como en el caso anterior:  $z_A=2a$ ,  $z_B=a$ ,  $r_0=0.3a$  y  $\Delta r=0.08a$ ; pero recordemos que ahora debemos estudiar dos secuencias diferenciadas, debidas a que la suma de Fibonacci no mantiene la propiedad conmutativa al formar las series con las que tratamos.



Figura 3.3. Secuencia y diagrama del poro a partir de los cuáles se conforman los cuasi-cristales fotónicos cuyo estudio se realiza en el apartado. Longitudes:  $A=2a$ ,  $B=a$ .

Si nos fijamos en los diagramas de reflexión de la figura 3.4, veremos que, como en el estudio anterior, seguimos teniendo un gran número de gaps, pero ahora nos hacemos una idea más clara de la relevancia de cada uno de ellos. Dado que ahora no simulamos estructuras infinitas, podemos observar claramente aquello que intuíamos en el estudio del apartado anterior: los diferentes gaps no son iguales según vamos avanzando en la serie, sino que en cada cristal se comportan de un modo distinto. Si nos centramos en una frecuencia concreta, vemos que cada gap fotónico tienen una anchura y profundidad espectral distinta y, más importante, muchos de ellos no alcanzan una cota de reflectividad ni siquiera del 80%.

Si miramos la figura 3.4a, donde se representa la evolución de las estructuras de la serie  $\{S\}$ , vemos cómo tienen lugar las propiedades que describíamos en el párrafo anterior: los gaps se hacen más numerosos y se clarifican conforme avanzamos en la serie. Además podemos observar cómo aquello que en el cristal de orden más bajo,  $\{S_7\}$ , no era más que un gap relativamente ancho y poco profundo, en los cristales de órdenes superiores se convierte en varios gaps, mucho más estrechos y profundos.

Si ahora comparamos este diagrama con el de la serie  $\{S'\}$  (figura 3.4b), vemos que el comportamiento óptico es prácticamente el mismo, aunque como corresponde al hecho que la secuencia es distinta en la serie  $\{S'\}$  que en la serie  $\{S\}$ , existen diferencias. Podemos comprobar cómo la posición, anchura y evolución de los dos gaps principales (los situados a frecuencia 0.132 y 0.18 c/a) es idéntica. No obstante, las transiciones de los gaps secundarios a través de los distintos cristales es distinta: en la figura 3.4a, entre los dos gaps principales, vemos que la diferencia entre las respuestas ópticas de los

cuasi-cristales  $\{S_7\}$  y  $\{S_8\}$  es mucho mayor que entre los cuasi-cristales  $\{S_8\}$  y  $\{S_9\}$ ; mientras que en la figura 3.4b, se ve cómo el comportamiento es justo el contrario, las respuestas de los cristales  $\{S'_7\}$  y  $\{S'_8\}$  ahora son mucho más similares que entre las de los cristales  $\{S'_8\}$  y  $\{S'_9\}$ .

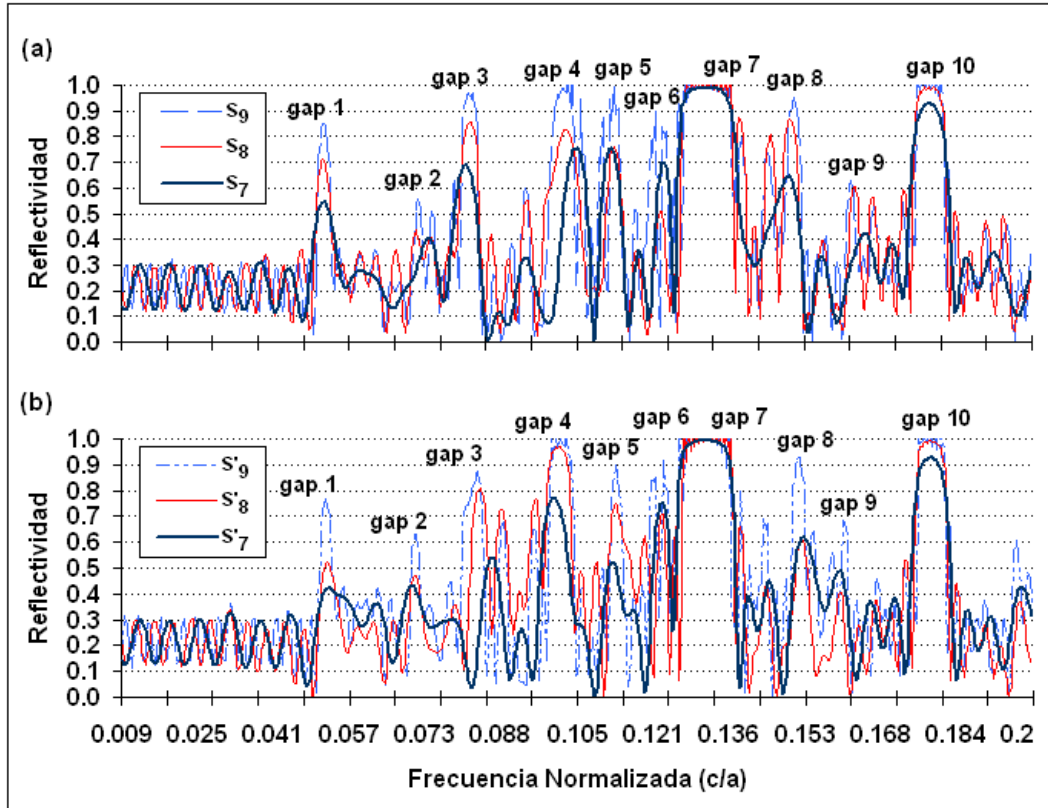


Figura 3.4. Diagramas de reflectividad de los cuasi-cristales fotónicos formados a partir de las series de Fibonacci (a)  $\{S\}$  y (b)  $\{S'\}$  de órdenes 7, 8 y 9. Podemos observar la generación de los multi-gaps a partir de zonas del espectro en las que los cristales de órdenes inferiores no presentan ningún gap fotónico.

### 1.3. Fabricación de los cuasi-cristales.

Para acabar con el estudio de los cuasi-cristales fotónicos generados a partir de las series de Fibonacci, debemos fabricar varios de los cristales presentados y estudiar su comportamiento óptico de forma experimental. Se han fabricado cristales de tres series:  $\{S_8\}$  con combinación de elementos  $a_{zA}=6\mu\text{m}$  y  $a_{zB}=3\mu\text{m}$ ,  $\{S_8\}$  con combinación de elementos  $a_{zA}=5\mu\text{m}$  y  $a_{zB}=2\mu\text{m}$ , y  $\{S'_9\}$  con combinación de elementos  $a_{zA}=5\mu\text{m}$  y  $a_{zB}=3\mu\text{m}$ .

Con respecto a la periodicidad en el plano XY del cristal, la distribución de poros es cuadrada con periodicidad igual a  $a=4\mu\text{m}$ . Para el cómputo teórico de los campos hemos considerado que la periodicidad se extiende hasta el infinito, obviamente esto no es realista a la hora de fabricar un cristal. Sin embargo, el tamaño de las muestras fabricadas es de  $1\text{cm}^2$  de área efectiva, lo cuál es más que suficiente para considerar la aproximación que en el plano XY el cristal es infinito, ya que la longitud de onda más grande con la que trabajamos para realizar las medidas experimentales es  $\lambda=30\mu\text{m} \ll 1\text{cm}$ .

Como ya hemos comentado en varias ocasiones, el proceso de fabricación de los cristales fotónicos por ataque electroquímico no es un proceso fácil de modelar ni de controlar. Las imperfecciones en la fabricación se deben en parte a las propiedades de las obleas (imperfecciones en el dopado), a la litografía, y también al control del proceso. También es importante destacar que las características del proceso dependen también de la profundidad de los poros. La principal consecuencia de todo ello radica en que no todos los periodos de los poros que conforman el cristal se graban con igual longitud, anchura o “forma senoidal”. La tendencia global es que la longitud de los periodos disminuya con la profundidad, y la forma de la modulación se aleje de la forma senoidal, formando poros con aspecto más “puntiagudo” que senoidal.

En la figura 3.5 se presentan tres fotografías SEM del comienzo, mitad y terminación de los poros del cuasi-cristal fabricado  $\{S_8(6,3)\}$ , donde se ve cómo la morfología de los distintos periodos es diferente, dependiendo de la posición dentro del poro, y del poro en cuestión. Observamos claramente la dependencia de la longitud de los periodos con la profundidad, así como el cambio de aspecto y forma que tienen los periodos según su posición.

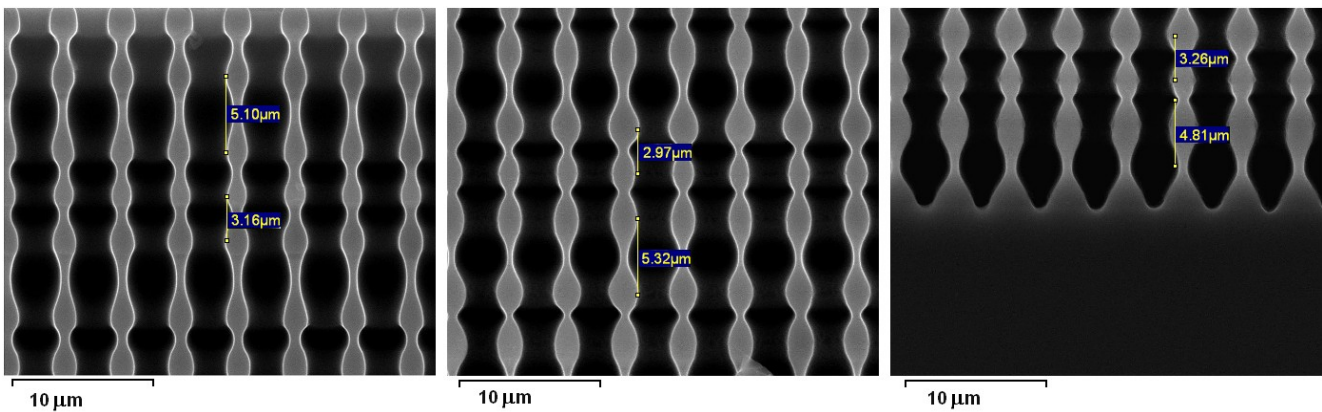


Figura 3.5. Fotografías SEM del comienzo, mitad y terminación de la muestra correspondiente a la secuencia  $S_8$ , de valores de longitud  $6\mu\text{m}$  y  $3\mu\text{m}$  para los elementos A y B respectivamente. Nótese cómo los valores de amplitudes máxima y mínima no son constantes a lo largo del proceso de ataque, así como la morfología de las diferentes transiciones entre periodos pequeños y grandes.

Esta particularidad del proceso de fabricación afectará a posteriori al resultado experimental de las medidas tomadas, generando variaciones del espectro medido experimentalmente con respecto al espectro teórico simulado.

Si comparamos el valor medio de las longitudes de los periodos fabricados con los valores pretendidos veremos de lo que estamos hablando: el primer cristal de secuencia  $\{S_8(6,3)\}$  tiene una longitud media de periodos de  $5.32\mu\text{m}$  y  $3.27\mu\text{m}$ , respectivamente; el segundo cristal de secuencia  $\{S_8(5,2)\}$  tiene una longitud media de  $4.26\mu\text{m}$  y  $2.28\mu\text{m}$ ; mientras que el tercero, de secuencia  $\{S'_9(5,3)\}$ , tiene periodos medios de  $3.9\mu\text{m}$  y  $3.58\mu\text{m}$ . En general, no solamente las longitudes de los distintos periodos irán variando a lo largo del cristal, sino que, como vemos, las longitudes de los periodos más largos se hacen más pequeñas, y las de los más cortos se graban más largas. Si recordamos la dependencia de los gaps fotónicos con la longitud de los periodos, nos haremos una idea de la gran importancia que estas imperfecciones, a la hora de fabricar los cuasi-cristales, causan en su respuesta espectral.



En las siguientes figuras se representan los diagramas de reflectividad de las muestras fabricadas, así como una fotografía SEM de las estructuras. La caracterización óptica se ha realizado con un espectrómetro de Fourier infrarrojo (FTIR – Bruker Vertex 70) midiendo en modo de reflexión. Todas las medidas de reflexión se han tomado a un ángulo cuasi-normal ( $12^\circ$ ), porque el equipo no permite medidas de reflexión a incidencia normal a la muestra. Las medidas de reflexión se normalizan respecto al espectro de un espejo de oro. En el Anexo I de este documento se trata con más detalle la caracterización con FTIR. Aunque la medición infrarroja se realiza entre 1.33 y 27  $\mu\text{m}$ , en los diagramas no se ha representado todo el espectro, pues solamente se muestran los datos allá donde el cristal presenta las zonas de gaps.

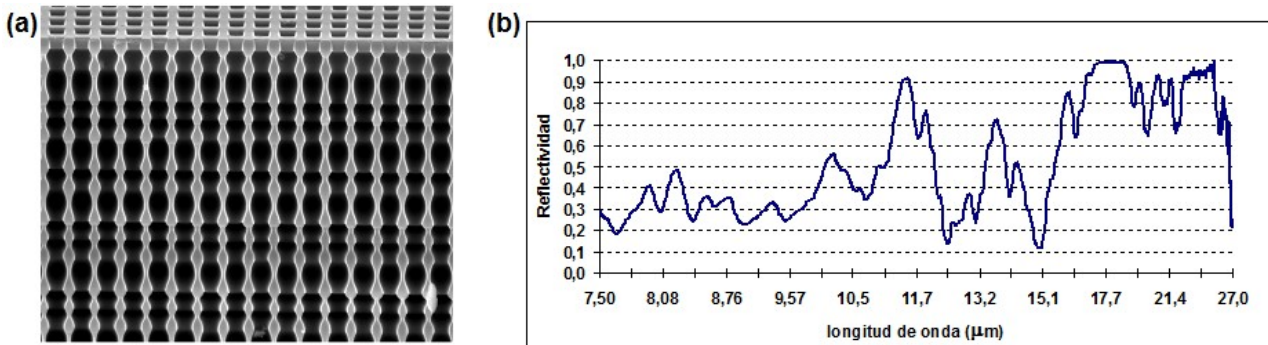


Figura 3.6. (a) Cuasi-cristal de Fibonacci de orden 8, fabricado a partir de la serie  $\{S(6,3)\}$ , longitudes medias de los elementos A y B de 5.32 y 3.27 $\mu\text{m}$ , respectivamente. (b) Diagrama de reflectividad de la muestra.

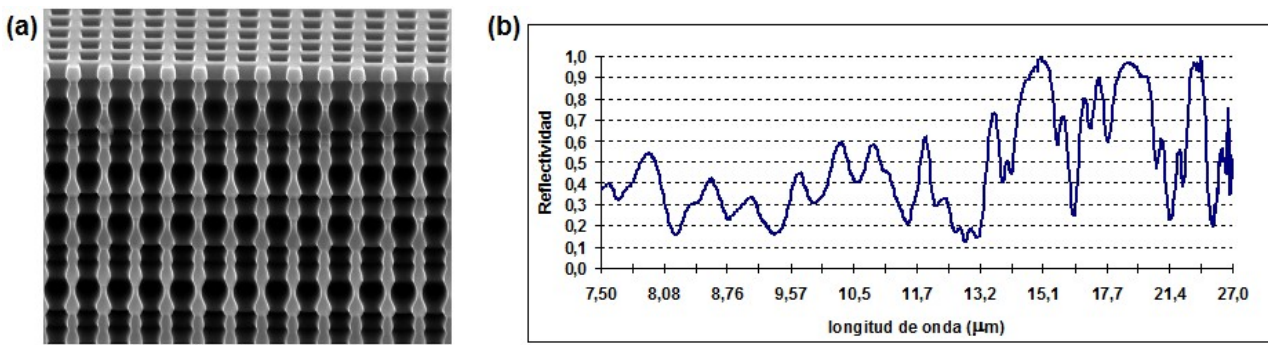


Figura 3.7. (a) Cuasi-cristal de Fibonacci de orden 8, de la serie  $\{S(5,2)\}$  y longitudes medias de los elementos A y B de 4.26 y 2.28 $\mu\text{m}$ . (b) Diagrama de reflectividad experimental.

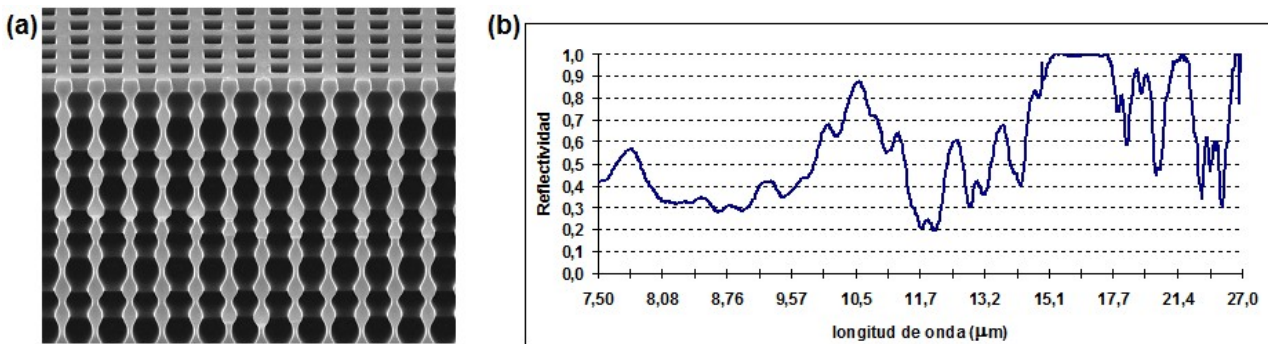


Figura 3.8. (a) Cuasi-cristal de Fibonacci de orden 9, serie  $\{S'(5,3)\}$  y longitudes medias de 3.9 y 3.58 $\mu\text{m}$ . (b) Diagrama de reflectividad de la muestra.

Como podemos observar en las figuras, el comportamiento que describíamos en los apartados teóricos sobre la aparición de dos gaps principales, y varios secundarios entre medio de los principales y a su alrededor, se mantiene en los resultados experimentales. No obstante, claramente hay una gran diferencia entre el aspecto de los gaps secundarios que observábamos en los resultados teóricos y el aspecto de estos mismos, mucho menos evidentes y más superpuestos entre ellos, que observamos en estos resultados experimentales.

Una interesante propiedad que sí podemos observar es cómo, al pasar de una combinación  $6-3\mu\text{m}$  a una  $5-2\mu\text{m}$  (figuras 3.6 a 3.7), los gaps principales y, en general, la respuesta óptica de la estructura, se desplaza hacia longitudes de onda más bajas. Este resultado se explica si recordamos los resultados presentados en el capítulo anterior sobre el comportamiento del gap en función de la periodicidad  $a_z$  (figura 2.7), dónde al reducir la variable  $a_z/a$ , el gap se desplaza hacia frecuencias más altas (= longitudes de onda más bajas).

Si nos fijamos ahora en el diagrama de reflectividad de la muestra de orden  $\{S'_9\}$ , también observamos dicho desplazamiento hacia longitudes de la onda inferiores. Sin embargo debemos comentar que, dado que la muestra corresponde al orden 9 de Fibonacci, el diagrama de reflectividad debería mostrar más zonas de gap fotónico (más bandas espectrales prohibidas), aunque como las longitudes medias de los elementos de la muestras están tan próximas entre sí ( $3.9$  y  $3.58\mu\text{m}$  en vez de  $5$  y  $3\mu\text{m}$ ), esto enmascara y evita la aparición de muchos de esos gaps fotónicos que aparecerían al computar los campos en las simulaciones de cuasi-cristales de orden 9.

Antes de terminar con el estudio de los cuasi-cristales de Fibonacci, es necesario comentar de manera detallada a qué se deben las diferencias entre los resultados teóricos y experimentales. Las causas son las imperfecciones en el proceso de fabricación, como ya hemos comentado, y que ahora pasamos a enumerar:

- Variaciones en las longitudes de los periodos a lo largo del poro. Este efecto introduce mayor desorden en la estructura respecto a la simulada teórica, y explica la desaparición de los gaps secundarios.
- Variaciones de los diámetros mayor y menor a lo largo del poro y entre elementos. Sobretudo el diámetro mínimo sufre una mayor variación conforme nos alejamos de los periodos iniciales: aumenta progresivamente de tamaño provocando variaciones en la amplitud de la modulación. Este efecto afecta a la posición y profundidad de los gaps.
- Desviaciones en la forma de la modulación. La forma de los poros en profundidad tiende a desviarse de la forma senoidal para pasar a ser más abrupta-triangular, o “puntiaguda”.
- La forma de los poros en el plano XY bidimensional tiende a ser recuadrada en lugar de cilíndrica (se observa claramente en las fotografías SEM de las figuras 3.6a, 3.7a y 3.8a). Este efecto aparece debido a las propiedades anisotrópicas del proceso electro-químico. Aunque se puede reducir su efecto mediante oxidaciones de las muestras posteriores al ataque [28].

## 2. Cristales fotónicos chirped.

Los cristales fotónicos *chirped* son una “evolución” de los cristales fotónicos periódicos en los que los parámetros geométricos de la estructura varían gradualmente a lo largo del cristal. A diferencia de los cuasi-cristales de Fibonacci, en los cristales chirped no existe ningún elemento base a partir del cuál se forme el cristal, sino que todos los elementos que forman los poros del cristal son progresivamente distintos. Los cristales fotónicos chirped no pertenecen estrictamente al grupo de los cuasi-cristales, ya que en estos cristales no existe una “cuasi-periodicidad”, sino que la rotura es total, aún así, vamos a considerar su estudio en este capítulo pues no poseen una simetría de traslación completa.

Para que quede más claro vamos a explicar su morfología mediante un ejemplo: consideremos una estructura periódica (cristal fotónico) con una periodicidad  $a_0$ . A esta estructura periódica podríamos añadir otra con una periodicidad  $a_1 > a_0$ , luego otra con periodicidad  $a_2 > a_1 > a_0$ , y así sucesivamente. La estructura final sería un cristal fotónico chirped con una variación gradual de la periodicidad, desde  $a_0$  hasta  $a_n$ .

Un ejemplo de una estructura “chirped” está representado en la figura 3.9. En este ejemplo, hemos realizado un chirping de la periodicidad  $a_z$ , fijando los otros parámetros constantes ( $r_0 = 0.3a$ ,  $\Delta r = 0.08a$ ). El período de la modulación  $a_z$  ha sido variado linealmente desde  $a_z = 0.5a$  ( $a$  = periodicidad en el plano XY) hasta  $a_z = 2a$ . Para que se vea más claramente, en la figura 3.9 la ilustración representa solamente la variación de  $a_z$  sobre 8 períodos en total.

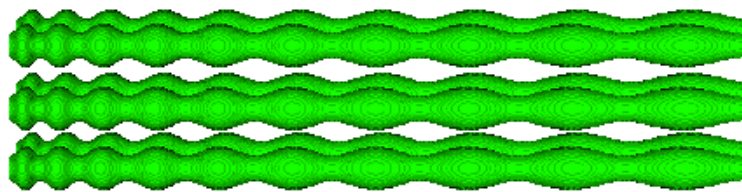


Figura 3.9. Ejemplo de estructura chirped en la cuál se ha interpolado el período de la Modulación (de  $0.5a$  hasta  $2a$ ), manteniendo el resto de parámetros de la estructura constantes.

Esta estructura no posee una simetría de traslación completa, pero sí que tiene una distribución periódica local. Podríamos considerar la estructura final como formada por varios cristales fotónicos, con una periodicidad definida, sumados. Lo que hemos hecho es variar la periodicidad del cristal fotónico a lo largo del poro con el objetivo de ampliar el rango de espectro en el que el cristal opera.

En efecto, recordemos que el gap fotónico se forma porque, debido a la periodicidad, se cumple la condición de reflexión constructiva para las interfaces entre los diferentes períodos que forman el cristal. Podríamos considerar así, que los gaps fotónicos de los distintos cristales que, sumados, forman el cristal chirped, se solapan, permitiendo ajustar el espectro de reflexión de manera arbitraria en un amplio margen. Incluso podríamos eliminar algunas periodicidades en el cristal (saltarnos algún elemento en la progresión) y conseguir que algunas ondas se transmitan en la zona del gap fotónico (como en una estructura con defectos).

## 2.1. Comportamiento óptico de los cristales chirped.

Hemos explicado que los cristales fotónicos chirped se realizan variando gradualmente un parámetro de la estructura. No es necesario que este parámetro sea siempre la periodicidad  $a_z$ , como en el ejemplo descrito arriba, sino que puede ser cualquier parámetro que introduzca un cambio gradual del contraste dieléctrico. Por ejemplo, podríamos variar gradualmente la porosidad de la estructura, lo que también modificaría la posición y anchura espectral de los gaps de la respuesta óptica, o variar los dos parámetros a la vez, longitud y porosidad. Por concordancia con el resto de los resultados presentados a lo largo del presente proyecto, consideraremos también en este apartado una estructura basada en silicio macroporoso con poros modulados senoidalmente y distribución en plano cuadrada con periodicidades  $a_x=a_y=a$ .

En la figura 3.10 se representa el diagrama de reflectividad de una estructura chirped en la que, como en el ejemplo anterior, hemos realizado una variación del periodo (de  $a_z=a=4\mu\text{m}$  hasta  $a_z=1.5a=6\mu\text{m}$ ) manteniendo el resto de parámetros constantes ( $r_0=0.32a$ ,  $\Delta r=0.077a$ ). En el diagrama están representados tres resultados para tres estructuras chirped distintas: de 15, 30 y 60 periodos de poro, respectivamente. La respuesta óptica de las estructuras ideales periódicas también se representa en línea discontinua.

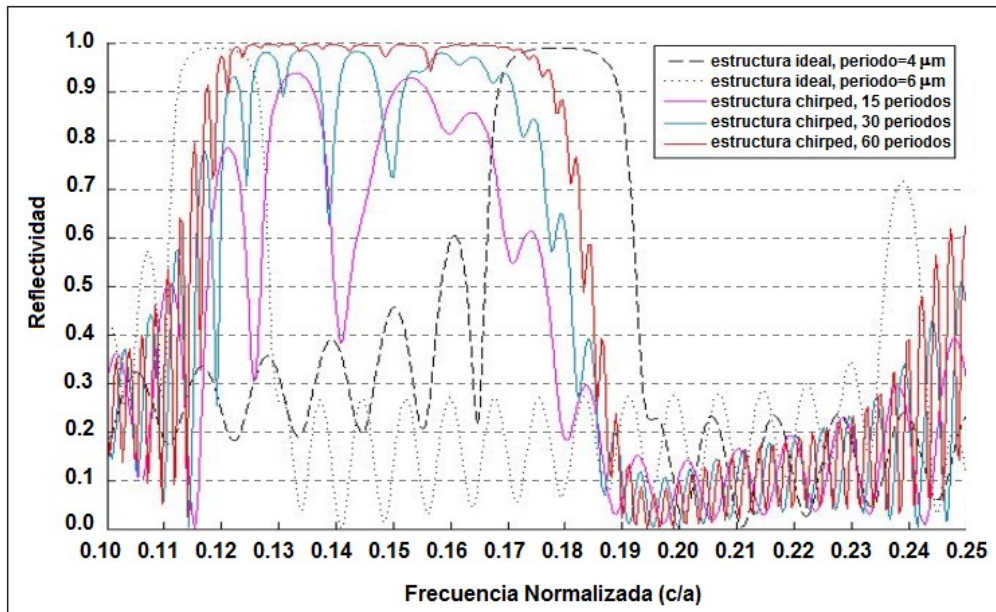


Figura 3.10. Diagrama de reflectividad de una estructura chirped con interpolación lineal de la periodicidad ( $a_z=a$  hasta  $a_z=1.5a$ ) en función del número de periodos que conforman la estructura. Se representa también la reflectividad de las estructuras ideales con periodicidades  $a_z=a$  y  $a_z=1.5a$ .

Las estructuras ideales presentan gaps fotónicos alrededor de las frecuencias normalizadas 0.12 y 0.18 (c/a). El gap alrededor a 0.12 corresponde a la estructura con periodicidad  $a_z=1.5a$ , y el gap fotónico a 0.18 c/a corresponde a la estructura con periodicidad  $a_z=a$ . El objetivo es el de obtener un gap fotónico más amplio, para el rango 0.12-0.18 c/a, realizando un *chirping* de la periodicidad que, como vemos, depende ampliamente del número de periodos que conforman el *chirping*: para una interpolación lineal de la periodicidad sobre 15 periodos, se observa que no existe un gap fotónico definido, ya que la variación de la periodicidad entre cada periodo es demasiado abrupta, necesitamos cierto orden local; en cambio, sobre 30 periodos



empezamos a ver una reflectividad aproximada del 100%, aunque solamente para algunos rangos del espectro; finalmente, para una interpolación sobre 60 períodos, el gap fotónico está bien definido y los picos de transmisión dentro del rango  $0.12-0.18 c/a$  quedan suprimidos.

Las múltiples oscilaciones del diagrama de reflectividad en el área del gap (múltiples picos de transmisión) se deben a que la condición de interferencia constructiva no se cumple para todas las ondas en el intervalo de frecuencias, por lo que algunas se transmiten. De la gráfica podemos deducir que cuanto mayor es el número de períodos que conforman la estructura chirped, más definido queda el gap, sin picos de transmisión en su interior. También resulta obvio deducir, a partir del comportamiento mostrado en la gráfica, que cuánto menor sea el ratio de valores  $a_{z\text{ inicial}}/a_{z\text{ final}}$ , menor es la distancia entre los gaps de las estructuras ideales, y por lo tanto menor será el número de períodos que necesitaremos interpolar entre ambos períodos para obtener un buen espectro (como el reflejado en la figura 3.10, en rojo).

Consideremos ahora una estructura chirped en la cuál el gradiente lineal se aplica a la amplitud de la modulación senoidal, manteniendo la periodicidad  $a_z$  constante. En la figura 3.11 se observa el diagrama de reflectividad correspondiente a una estructura chirped de periodicidad  $a_z=a$ , radio nominal  $r_0=0.3a$  y amplitud de la modulación  $\Delta r$  variada linealmente entre  $0.08a$  y  $0.2a$ . El diagrama muestra también la reflectividad de las estructuras periódicas ideales con amplitudes de modulación constantes  $\Delta r=0.08a$  (línea discontinua) y  $\Delta r=0.2a$  (línea de puntos).

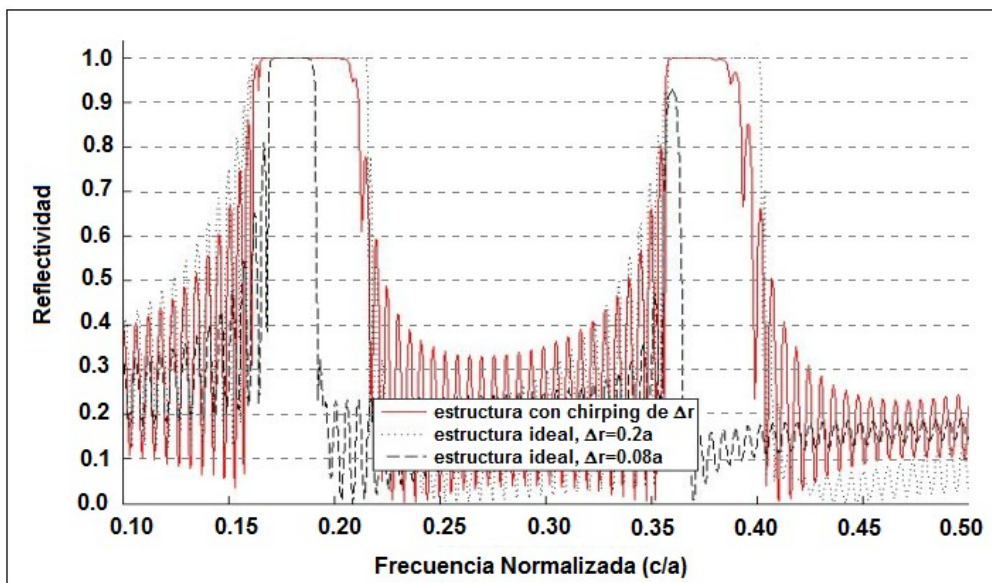


Figura 3.11. Diagrama de reflectividad de una estructura chirped (línea roja) de 30 períodos con variación de la amplitud de la modulación ( $\Delta r=0.08-0.2a$ ). Los demás parámetros de la estructura se mantienen constantes:  $a_z=a$ ,  $r_0=0.3a$ . Se presenta también la reflexión de las estructuras ideales con amplitudes de modulación  $\Delta r=0.08a$  (línea discontinua) y  $\Delta r=0.2a$  (línea de puntos).

Podemos observar que para una amplitud  $\Delta r=0.08a$  la estructura ideal presenta un gap alrededor de  $0.18 c/a$ , y un segundo gap incompleto situado en frecuencias alrededor de  $0.37 c/a$ . La estructura ideal con  $\Delta r=0.2a$ , por su parte, presenta también dos gaps, situados a igual frecuencia pero bastante más anchos (el segundo gap ahora alcanza un 100% de reflectividad en un amplio intervalo de frecuencias). Si observamos ahora el espectro de la estructura chirped, vemos que también presenta dos gaps situados en los

mismos puntos frecuenciales, aunque la anchura espectral de dichos gaps no es ni tan grande como en el caso  $\Delta r=0.2a$ , ni tan estrecha como en el caso  $\Delta r=0.08a$ , su anchura se sitúa en una situación intermedia, como corresponde al hecho que el cristal chirped debe mantener propiedades de ambos cristales ideales, como en el caso del chirping de la longitud.

*(Nota: Como ya comentamos en el capítulo II, al variar la amplitud de la modulación mantenemos la porosidad de la estructura, aunque aumentamos el contraste dieléctrico entre capas, lo que resulta al final en una ampliación de los gaps fotónicos alrededor de la misma frecuencia).*

En esta estructura chirped hemos variado únicamente la amplitud  $\Delta r$ , pero también podríamos haber variado el radio  $r_0$ , o solamente el radio mínimo  $r_{\min}$ , o el máximo  $r_{\max}$ , o hacer combinaciones variando todos los parámetros a la vez. Las posibilidades son numerosas, y si además combinamos distintas longitudes de los periodos, esto nos permite diseñar un comportamiento espectral del cristal a nuestro antojo.

## 2.2. Fabricación de cristales chirped.

Se han fabricado varias muestras de los cristales chirped descritos para comprobar su respuesta óptica. Los cristales fabricados tienen 41 periodos de modulación senoidal de los poros. La periodicidad  $a_z$  ha sido variada entre un período inicial y final de  $3\mu\text{m}$  y  $6\mu\text{m}$ , respectivamente. La distribución en plano se mantiene cuadrada con periodicidad  $a=4\mu\text{m}$ . En la figura 3.12 se muestran algunas fotografías SEM del cristal desarrollado.

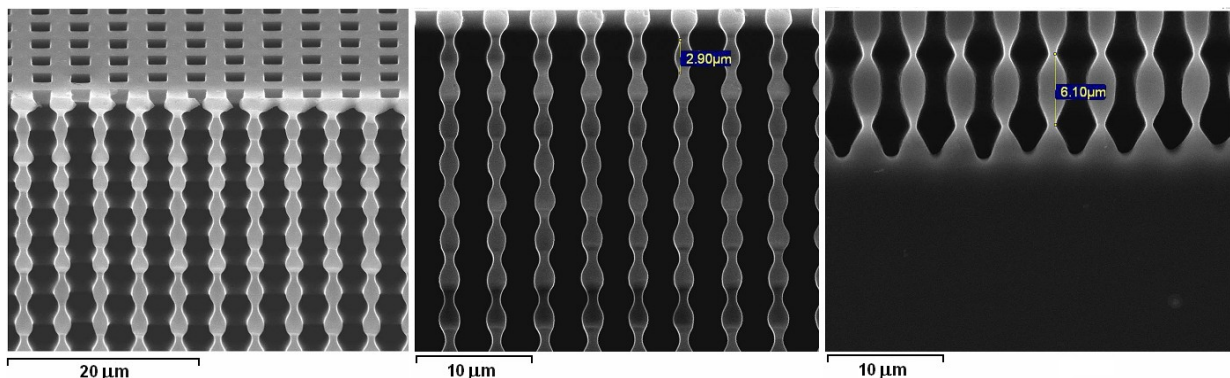


Figura 3.12. Fotografías SEM de una muestra de cuasi-cristal chirped fabricada. Se observa la distribución cuadrada en la superficie del cristal ( $a=4\mu\text{m}$ ), así como la evolución entre un periodo inicial de  $3\mu\text{m}$  hasta uno final de  $6\mu\text{m}$  a lo largo del poro. Las medidas mostradas en las fotografías denotan la diferencia entre el resultado final y el diseño inicial.

Como ocurría en los cuasi-cristales de Fibonacci, existen imperfecciones debidas al proceso de fabricación, aunque en este caso son menos severas dada la progresión que siguen los distintos periodos que forman el poro del cristal. Así, como se observa en las fotografías de la figura 3.12, el periodo inicial que pretendíamos de  $3\mu\text{m}$  es en realidad de  $2.9\mu\text{m}$ , y el final, que debería ser de  $6\mu\text{m}$ , tiene una longitud de  $6.1\mu\text{m}$ . Además, hay diferencias en la amplitud de la modulación y también en los diámetros máximos y mínimos a diferentes profundidades de la estructura. La amplitud de la modulación  $\Delta r$  y el radio nominal  $r_0$  resultan variados linealmente (chirped) del mismo modo que el periodo, aunque inicialmente se pretendía variar únicamente la periodicidad  $a_z$ . Esto es

debido a las propiedades específicas del proceso electroquímico que hemos discutido en el apartado anterior (fabricación de cuasi-cristales de Fibonacci).

Comparando el resultado teórico con el resultado experimental de la muestra fabricada (figura 3.13) podemos ver que existen pequeños desplazamientos en frecuencia debidos a los mismos efectos que comentábamos en el apartado sobre fabricación de cuasi-cristales de Fibonacci (ángulo de medida, diferencias entre periodos, diferencias entre poros, etc...).

Lo que sí es interesante comentar es que, como vemos, la zona del gap fotónico comprendida entre los  $14\mu\text{m}$  y los  $25\mu\text{m}$  está claramente definida, sin demasiadas oscilaciones. Esto es debido a que el *chirping* se ha realizado con un conjunto de parámetros del cristal correctos, como hemos comentado previamente. Recordemos además, que mediante procesos de oxidación y eliminación del óxido, los poros de la estructura pueden ser ensanchados, y la respuesta óptima mostrada en la figura 3.13, optimizada.

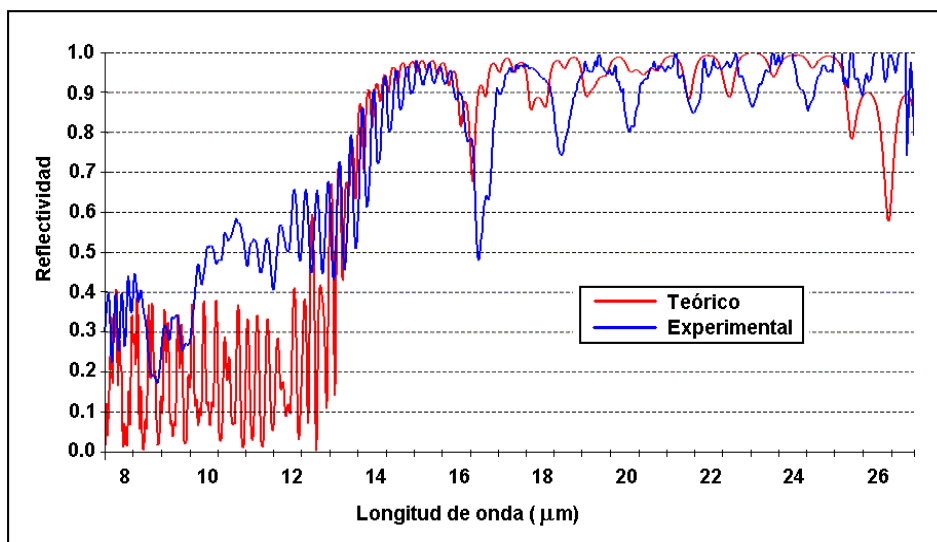


Figura 3.13. Diagrama de reflectividad del cuasi-cristal chirped presentado en la figura 3.12, con 41 periodos de poro. El diagrama azul corresponde con la medida experimental, mientras que el rojo se corresponde con la medida teórica ideal.

## Conclusiones. Trabajo futuro.

A lo largo del proyecto presentado, hemos dedicado nuestros esfuerzos al entendimiento de las propiedades ópticas de los cristales fotónicos, así como los mecanismos que nos permiten controlar y diseñar una respuesta espectral prediseñada. Los resultados que han sido mostrados son, en sí mismos, de gran utilidad, especialmente aquellos correspondientes a las cuasi-estructuras, ya que pueden presentar unos resultados inusuales e interesantes muy diferentes de los de sus predecesores perfectamente periódicos. En este apartado, seguidamente, examinaremos a fondo los detalles del trabajo presentado y presentaremos las futuras líneas de trabajo en las que se deben asumir los próximos esfuerzos.

Comenzamos el proyecto estudiando las propiedades ópticas de los cristales fotónicos bidimensionales. Los primeros resultados nos mostraron la dependencia de las propiedades ópticas de las estructuras con la constante dieléctrica del material empleado para la fabricación de los cristales. En este proyecto hemos considerado estructuras basadas en silicio macroporoso que tienen un contraste dieléctrico alto (11.7) comparado con otras técnicas que utilizan opalos (self-assembling) o polímeros (holography, direct laser writing). La otra ventaja del silicio cristalino es la compatibilidad con los procesos de la industria microelectrónica y la posibilidad de integración de estructuras fotónicas en un sólo chip. Sin embargo, para aplicaciones concretas podemos emplear materiales de constante dieléctrica más elevada (otros semiconductores, cerámicas, metales, etc...) que, mediante otras técnicas de fabricación, tengan las propiedades ópticas requeridas. En concreto, uno de los proyectos futuros más relevantes consiste en el relleno de las micro-estructuras basadas en silicio macroporoso con metal, creando así estructuras periódicas metálicas, o metalo-dieléctricos, que permitan un rango de trabajo y experimentación a más alta frecuencia, y también a más altas temperaturas.

El segundo concepto que estudiamos fue la dependencia del espectro óptico con la distribución periódica. Más allá de tecnicismos como la zona de Brillouin, el concepto que debe prevalecer es cómo influye la distribución sobre las propiedades ópticas, y si ciertas distribuciones periódicas presentan gap fotónico en determinadas direcciones, o si el gap es absoluto para cualquier dirección de propagación de la luz. En concreto fueron presentadas la distribución cuadrada y la hexagonal, aunque las posibilidades son numerosas: concretamente, la distribución no tiene por qué ser perfectamente periódica, o tener periodicidad equivalente en todas las direcciones, sino que pueden haber diferencias con respecto a la periodicidad respecto a un eje X, y uno Y (como por ejemplo la distribución rectangular), lo que dará como resultado una dependencia del comportamiento óptico también de la dirección, lo cuál implica un grado de libertad más para obtener la óptima respuesta óptica.

Seguidamente estudiamos las propiedades de las estructuras tridimensionales. La flexibilidad del ataque electro-químico presentado en el documento, y en el cuál se ha basado la fabricación de todas las muestras del proyecto, consiste en poder modular el diámetro de los poros en profundidad y, de este modo, crear estructuras con variaciones en profundidad. Como ya vimos en el primer capítulo, la técnica permite controlar la cantidad de material disuelto, en función del tiempo, mediante la retro-iluminación de la muestra. La flexibilidad de la técnica, como vimos, radica en que con ella podemos

grabar formas arbitrarias, dentro de un determinado límite, y longitudes de poro grandes. Otra característica del proceso que puede ser ventajosa para aplicaciones no fotónicas (microfluídica, microreactores) es la posibilidad de realizar el proceso sobre toda la superficie de la oblea (6 o 8 pulgadas), es decir, se pueden fabricar estructuras grandes atacando toda la superficie a la vez.

No obstante, el proceso tiene limitaciones. Como ya vimos, especialmente en el apartado sobre cuasi-cristales de Fibonacci, la no existencia de un modelo preciso que controle el ataque electro-químico, y la existencia de demasiadas variables a controlar (todas ellas empíricamente) durante el proceso de grabado, da como resultado formas imperfectas y pérdidas de periodicidad en los poros fabricados. Estas imperfecciones aumentan conforme se complica la estructura prediseñada, y esto es un grave problema ya que empeora su respuesta óptica. De hecho, la aparición y la anchura del gap fotónico es muy sensible a las imperfecciones de la fabricación, por lo cuál estas se deben minimizar.

Por ello es necesario centrar gran parte de los futuros esfuerzos en el estudio del proceso físico de ataque electro-químico, esfuerzos que den como resultado una mejora en la precisión de los resultados de los ataques. Aunque bien cierto es que, como ya hemos presentado en varias ocasiones a lo largo del proyecto, estas imperfecciones de las que hablamos pueden suavizarse mediante oxidaciones posteriores al ataque. Dichas oxidaciones mejorarán, a su vez, el comportamiento óptico (entendiendo por mejorar la generación de un mayor número de gaps fotónicos y con mayor anchura) como ya explicamos al introducir el concepto de porosidad de la estructura, concepto que vale la pena remarcar, referencia a una de las propiedades más importantes de los cristales fotónicos.

Finalmente, en el último capítulo del proyecto, se presentaron nuevas estructuras fotónicas que rompen con la periodicidad descrita en apartados anteriores, y que, sin embargo, siguen manteniendo propiedades ópticas similares a las de los cristales fotónicos, a pesar de su no periodicidad. Las estructuras fabricadas y caracterizadas, los cuasi-cristales de Fibonacci y los cristales chirped, son una muestra del gran abanico de posibilidades que nos ofrecen los cristales fotónicos, y nos motivan a continuar el estudio de estos nuevos materiales y de sus propiedades. Especialmente relevante es el resultado mostrando la evolución de los gaps fotónicos conforme generamos cuasi-cristales de Fibonacci de ordenes cada vez mayores, así como también los resultados mostrando cómo, mediante un *chirping* entre periodos  $a_0$  y  $a_n$ , conseguimos unir los gaps de las secuencias periódicas ideales en un gap mucho más ancho.



## Anexo I. Métodos de caracterización experimental.

### 1. Espectroscopía infrarroja por transformada de Fourier.

La espectroscopía por transformada de Fourier es una técnica de medida dónde el espectro se obtiene mediante medidas de coherencia temporal. La coherencia temporal está relacionada con la correlación de la señal: si consideramos el campo eléctrico en un punto en dos instantes de tiempo, el tiempo de coherencia es el máximo retardo entre ambas señales para que la diferencia de fase del campo permanezca predecible.

Para que quede más claro, vamos a considerar una señal monocromática. Una onda que solamente tiene una frecuencia corresponde a una senoide que se extiende desde  $t=-\infty$  hasta  $t=\infty$ . Como dicha senoide es perfectamente periódica a lo largo de cualquier instante de tiempo, si la comparo con una señal retardada de sí misma siempre podré predecir el desfase entre ambas señales, ya que, como hemos dicho, la onda siempre es perfectamente periódica. En este caso, el tiempo de coherencia es infinito, puesto que siempre puedo predecir la fase.

De lo anterior se extrae que conforme nuestra señal va aumentando su ancho de banda, su perfecta periodicidad se va perdiendo, y el tiempo de coherencia  $\tau_c$  se reduce desde infinito hasta un valor finito, al comparar la señal con una versión retardada de sí misma. Por esta razón, podemos relacionar el tiempo de coherencia con la anchura espectral de la señal que estamos midiendo, y obtener así el espectro de la señal a partir de las medidas de coherencia. En las ecuaciones (A.1) se muestran las relaciones entre el ancho de banda ( $\Delta f$  o  $\Delta \lambda$ ) y el tiempo de coherencia ( $\tau_c$ ):

$$\tau_c \cdot \Delta f \approx 1 \quad \text{o} \quad \frac{c \cdot \tau_c \cdot \Delta \lambda}{\lambda^2} \approx 1 \quad (\text{A.1})$$

Para medir la coherencia temporal de una señal luminosa utilizamos el método de interferometría. Los fotones que provienen de una fuente lumínica se dividen en dos haces mediante un espejo semi-transparente. Uno de los haces se refleja hacia un espejo fijo, mientras que el otro se ve transmitido hacia un espejo cuya posición puede ser ajustada, introduciendo así un desfase temporal entre ambos haces. Los haces sufren una interferencia en el momento en que, al deshacer el camino, vuelven al espejo semi-transparente y se ven de nuevo unidos en dirección al detector.

Mediante la medición de la señal en el detector en función de diversas posiciones del espejo móvil, el espectro puede ser reconstruido mediante la transformada de Fourier de la coherencia temporal de la luz. Aunque este método va cayendo cada vez más en desuso, pues es mucho más sencillo fabricar interferómetros basados en la cavidad de Fabry-Perot que los interferómetros de Michaelson-Morley, el método es muy eficaz cuando realizamos medidas en el infrarrojo y nos vemos limitados por detectores de un solo píxel.

En la figura A.1b puede verse un esquema del interferómetro de Michaelson-Morley, mientras que en la figura A..1a se muestra una fotografía del interior de un espectrómetro FTIR.

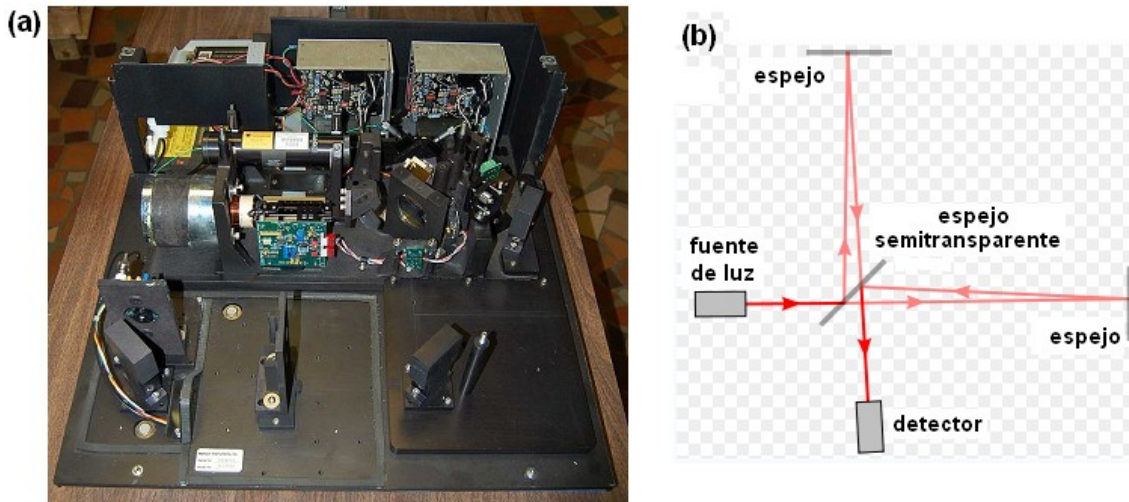


Figura A.1. (a) Fotografía del interior de un FTIR. (b) Esquema del interferómetro de Michaelson.

El sistema FTIR utilizado para la medición de las muestras realizadas en este proyecto trabaja en el rango de  $370-7500\text{cm}^{-1}$ , lo que corresponde a una longitud de onda infrarroja entre  $1.33$  y  $27\mu\text{m}$ . La resolución es de  $0.5\text{cm}^{-1}$ , lo que supone un total de  $14800$  puntos de medición espectral. Además, el resultado de las medidas siempre está referido al espectro el oro en un determinado instante de tiempo, con el fin de calibrar las medidas y realizar una medición coherente, verídica y fiable.



## 2. Caracterización morfológica.

Las muestras fabricadas deben ser estudiadas en el microscopio con el fin de analizar su morfología. Se deben comprobar tanto que el grabado del cristal se ha realizado correctamente, como que los valores de periodo, radio máximo y radio mínimo se han alcanzado en los diversos poros formados. Con esta finalidad trabajamos con el microscopio electrónico de barrido (SEM o Scanning Electron Microscope, por sus siglas en inglés). El SEM utiliza electrones para formar una imagen, tiene una gran profundidad de campo, lo que permite que se enfoque a la vez una gran parte de la muestra, y produce imágenes de alta resolución.

En el SEM es necesario acelerar los electrones en un campo eléctrico, para aprovechar su comportamiento ondulatorio, lo cuál se lleva a cabo en el cañón del microscopio. Los electrones acelerados por un voltaje pequeño son utilizados para muestras muy sensibles, como las muestras biológicas, o muestras muy aislantes, ya que para que el SEM funcione correctamente, las muestras deben ser conductoras. Los altos voltajes se utilizan para muestras metálicas, ya que éstas en general, no sufren daños, y de esta manera se aprovecha la menor longitud de onda para tener una mejor resolución.

Los electrones acelerados salen del cañón y son enfocados por las lentes condensadora y objetiva, cuya función es reducir la imagen del filamento, de manera que incida en la muestra un haz de electrones lo más pequeño posible. Cuando el haz incide sobre la muestra se producen muchas interacciones que, al final, conllevan la información necesaria sobre la muestra para realizar su imagen. Dichas interacciones pueden ser: electrones reflejados, electrones secundarios, se pueden producir rayos-X, fotones, etc... El método más común suele ser la lectura de electrones secundarios producidos por la pérdida de energía de los electrones del haz al “chocar” con la muestra.

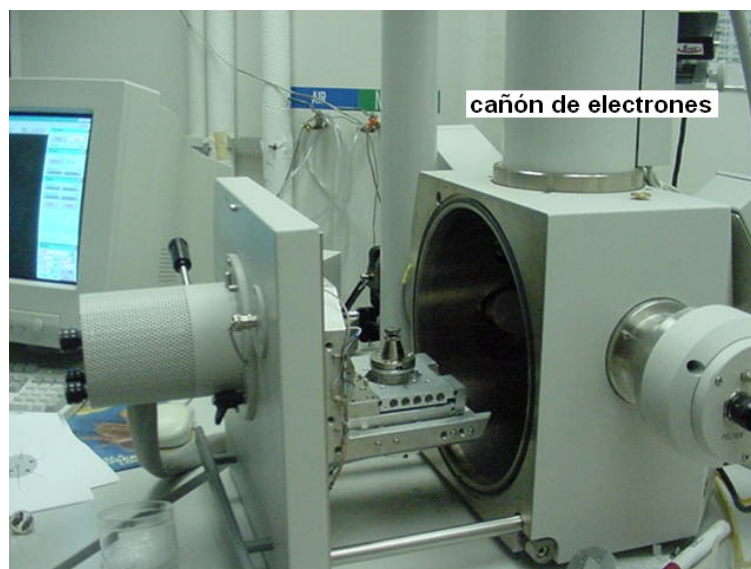


Figura A.2. Fotografía de la cámara interior de un microscopio SEM.

En la figura A.2 se muestra una imagen de la cámara donde se colocan las muestras a analizar en un microscopio SEM. A lo largo de este documento se han presentado diversos ejemplos de la caracterización morfológica con SEM, tanto a nivel de imagen como de medidas sobre longitudes y anchuras de los poros, por lo que no es necesario presentar en este anexo más fotografías de muestras.

## **Anexo II. Aplicaciones.**

En los capítulos de este documento se han presentado los cristales y cuasi-cristales fotónicos, se han descrito las ecuaciones más importantes que describen su comportamiento óptico, así como los métodos utilizados en el cálculo y fabricación de las estructuras. Se ha presentado, además, una serie de resultados, tanto teóricos como experimentales, sobre el comportamiento óptico de las estructuras diseñadas en el proyecto. No obstante, todavía no ha sido presentada una visión de las aplicaciones de dichos cristales. Por ello vamos a ver en este anexo, con el fin de comprender mejor la utilidad de estos materiales, diferentes aplicaciones en las que cristales fotónicos 1D, 2D y 3D son empleados en diversos sistemas ópticos o de comunicaciones.

El objetivo de este segundo apartado de los anexos es, por lo tanto, presentar varias aplicaciones en las que se centran los esfuerzos e investigaciones en el campo de los cristales fotónicos. La intención del proyecto es la de presentar un estudio y caracterización de los cristales fotónicos, objetivo que se complementa en este apartado con la presentación de varias aplicaciones que ayuden a entender la utilidad y validez del trabajo realizado.

El apartado se divide en tres secciones en las que se muestran las aplicaciones más extendidas de los cristales fotónicos. Cada una de estas secciones se corresponde con aplicaciones de cristales 1D, 2D y 3D. En el primero presentaremos el espejo de Bragg, la que podríamos considerar aplicación más extendida de los cristales fotónicos unidimensionales. Con respecto a los cristales bidimensionales, los esfuerzos de los investigadores se centran en conseguir circuitos para las señales ópticas utilizadas en comunicaciones, por lo que serán presentados varios de estos circuitos ópticos. Finalmente, en el último capítulo se presentará una aplicación de los cristales tridimensionales basada en su capacidad para prohibir bandas de transmisión en cualquier dirección del espacio.

Cabe destacar que una de las aplicaciones más interesantes de los cristales fotónicos 3D consiste en la inclusión de un defecto en la estructura perfectamente periódica con el fin de atrapar modos de propagación y acumular energía. Esta idea ya ha sido presentada con anterioridad al estudiar las propiedades de los cristales fotónicos con defectos en su estructura, por ello, en este anexo solamente se presentará, para los cristales 3D, una aplicación basada en la supresión de bandas de emisión.

## 1. Cristales fotónicos unidimensionales. Filtrando la luz.

Aunque el término cristal fotónico no fue acuñado hasta 1987 por los investigadores E. Yablonovitch y S. John en sendos artículos, lo cierto es que para entonces los cristales fotónicos unidimensionales, en forma de dieléctricos multicapa, ya habían sido extensamente estudiados.

Lord Rayleigh comenzó su estudio en 1887, demostrando que una sucesión periódica de capas formadas por dos materiales de distinta constante dieléctrica mostraba un gap fotónico unidimensional (una zona del espectro con una gran reflectividad para una incidencia normal a la multi-capa). Posteriormente, el dispositivo se conocería como espejo de Bragg (o *Distributed Bragg Reflector*) tras el estudio que W.L. Bragg y W.H. Bragg llevaron a cabo sobre la difracción de rayos X en medios cristalinos.

Un ejemplo de un espejo de Bragg cuya separación entre capas es del orden de 250 nm puede verse en las fotografías SEM de la figura A.3a. En la figura A.3b está representado el diagrama de reflectividad del mismo espejo, pero esta vez con una separación entre capas de 100 nm, para ajustar su banda prohibida a la región visible del espectro.

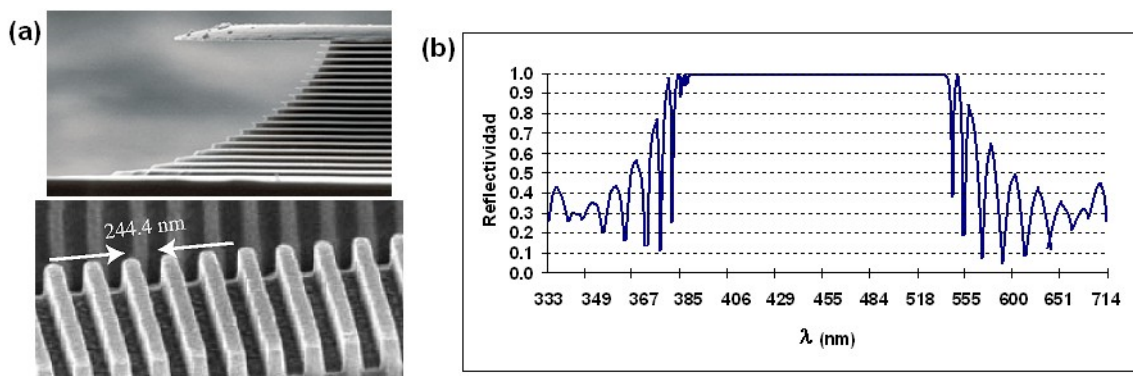


Figura A.3. (a) Fotografía SEM de un cristal fotónico unidimensional espejo de Bragg. (b) Respuesta espectral de la estructura para ambos modos TE y TM, e incidencia normal de la onda al cristal. Los parámetros de la estructura son los siguientes:  $\epsilon_{\text{Si}}=11.7$ ,  $\epsilon_{\text{aire}}=1$ , grosor de las capas de silicio y aire := 100nm, y número de capas de cada dieléctrico :=10.

Hoy en día dichas estructuras se utilizan en diversas aplicaciones, las más destacadas son su utilización en láseres y LEDs para aumentar la eficiencia de los dispositivos. La gran ventaja de dichas estructuras radica en que mediante la elección del contraste dieléctrico, el número de capas y la separación entre ellas, podemos controlar la reflectividad del cristal a una determinada longitud de onda, lo que permite realizar espejos del 80%, 90%, 99%, o del 99.99% de reflectividad.

De hecho, a nivel unidimensional, este tipo de cristales presentan las mismas propiedades ópticas que hemos estudiado a lo largo del proyecto, por lo que no es de extrañar que podamos diseñar los parámetros de la estructura para obtener cristales en los que podamos controlar la posición espectral, anchura y reflectividad de sus gaps.

El principio de funcionamiento de estos cristales sigue la misma física que los cristales fotónicos bi y tridimensionales. En cada frontera de cambio de medio (entre cada capa del cristal) se produce una reflexión parcial de la onda. Para ondas cuya longitud sea

múltiplo del cuádruple del espesor óptico de las capas, las reflexiones parciales interfieren constructivamente y dicha onda resulta completamente reflejada.

La reflectividad y el ancho de banda espectral de la estructura están modelados por las ecuaciones (A.2), mientras que su espectro en reflexión está representado en la figura A.3.

$$R = \left( \frac{n_2^{2N} - n_1^{2N}}{n_2^{2N} + n_1^{2N}} \right)^2 \quad \text{y} \quad \Delta \nu = \frac{4\nu_0}{\pi} \arcsin \left( \frac{n_2 - n_1}{n_2 + n_1} \right) \quad (\text{A.2})$$

donde  $n_1$  y  $n_2$  son los índices de refracción de las capas alternas y  $\nu_0$  es la frecuencia central de la banda. De hecho, como la función *arcoseno* es una función periódica, la respuesta espectral de este tipo de cristales (la representada en la figura A3b) se repite a lo largo del espectro, propiedad que nos otorga un grado más de libertad a la hora de diseñar los espejos.

Como hemos comentado con anterioridad, el gap de estos cristales solamente aparece para una dirección incidente normal a la multicapa. Si resolvemos el diagrama de dispersión (o diagrama de bandas) veremos que no existe un gap completo de la estructura, no obstante, ya comentamos en el capítulo II del documento que esto no implicaba una desaparición del gap para ángulos mayores a la normal, sino su decaimiento progresivo.

Si resolvemos experimentalmente el espectro de la estructura para distintos ángulos de incidencia (figura A.4), vemos el comportamiento descrito: un decaimiento progresivo de la anchura espectral del gap, hasta desaparecer. Este comportamiento, no obstante, se da únicamente para los modos de propagación TM, donde el gap se mantiene hasta los 50° aproximadamente respecto a la normal, mientras que para los modos TE, por su configuración en el plano que contiene el campo eléctrico, el gap se mantiene hasta los 90°.

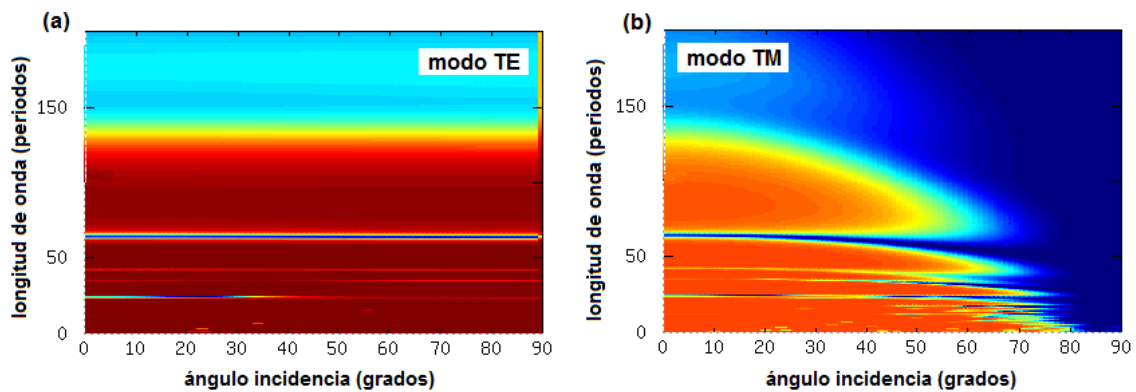


Figura A.4. Espectro de reflexión del modo TE (a) y TM (b) en función del ángulo de incidencia y la longitud de onda. En la gráfica (a), el color rojo intenso indica zonas del espectro con  $R=1$ , y el azul claro zonas con  $R=0$ ; mientras que en la gráfica (b) es el color naranja el que implica  $R=1$  y el azul oscuro  $R=0$ .

## 2. Cristales fotónicos bidimensionales. Guiando la luz.

Una de las aplicaciones más extendidas de los cristales fotónicos consiste en guiar la luz a través de un circuito óptico. Ya que podemos definir estructuras fotónicas en las cuáles la propagación de la luz a una determinada longitud de onda está prohibida, el guiado de la luz se consigue acoplando el modo de transmisión en una región del espacio del cristal (donde el modo debe estar permitido) rodeada de una estructura que prohíba dicho modo. De esta forma la luz queda “atrapada” en el circuito que hemos diseñado, y su guiado resulta automático.

Esta manera de trabajar resulta óptima si consideramos que la manera más extendida de la que disponemos en comunicaciones para guiar la luz es el uso de fibras ópticas. Realizar un circuito con fibras ópticas para el guiado de la luz, que sea equivalente a los circuitos electrónicos para el guiado de los electrones, es una tarea complicada, mientras que diseñar circuitos como el representado en la figura A.5a requiere únicamente de la definición de la máscara adecuada para el proceso de litografía. Además, como ya hemos visto, la periodicidad de los cristales fotónicos debe ser del orden de  $\lambda/2$ , donde  $\lambda$  es la longitud de onda de la señal que vamos a guiar, por lo que estos circuitos tienen un tamaño mucho más reducido que las fibras ópticas de guiado tradicional, lo que permite el desarrollo de sistemas de comunicaciones integrados.

Además de lo considerado en el párrafo anterior, esta manera de funcionar de los cristales fotónicos resulta más eficiente que el método de reflexión interna total en el que se basan las fibras ópticas convencionales. Diversos estudios llevados a cabo demuestran que al doblar una fibra óptica, con un radio de curvatura inferior a 1mm, perdemos la práctica totalidad del campo de su interior, ya que éste abandona el núcleo y pasa a la envoltura de la fibra. Sin embargo, aprovechando las propiedades de los cristales fotónicos, podemos construir circuitos con radios de curvatura del orden de micrómetros, pues el efecto de banda prohibida nos garantiza unas pérdidas mínimas de señal. Del mismo modo, también podemos definir una estructura periódica en nuestra fibra óptica convencional para que el guiado se realice por banda prohibida. Un ejemplo de esta *photonic crystal fiber* puede verse en la figura A.5b.

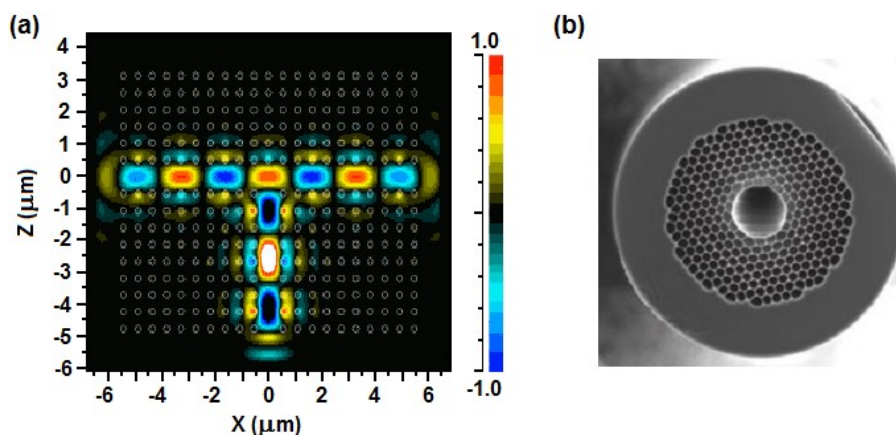


Figura A.5. (a) Circuito fotónico formado por cilindros de aire grabados en un sustrato de silicio. En la figura se representa la distribución del campo  $E_y$  a lo largo de la guía. El color rojo representa un máximo del campo mientras que el color azul representa un mínimo. (b) Fotografía SEM del núcleo de una *photonic crystal fiber*. Los poros grabados impiden la propagación de las ondas más allá del núcleo central de la fibra por presentar un gap en la propagación del modo.



A parte de los ejemplos mostrados hasta ahora, podemos complicar las estructuras y diseñar diversos sistemas ópticos si aprovechamos la inclusión de defectos en el interior de estas guías. Seguidamente vamos a presentar dos aplicaciones basadas en el guiado de la luz a través de estructuras con defectos.

En la primera de ellas (figura A.6a), los defectos que incluimos en la estructura realizan una división en potencia de la señal óptica de entrada. Tras la división nos quedamos con la mitad de la señal, tras la primera línea de defectos, un tercio de ella tras la segunda línea, y una sexta parte de la señal de entrada al final. El sistema se completa con la inclusión de fotodetectores al final de las guías que sirven de puertos de salida: si la potencia óptica que llega al detector es lo suficientemente elevada, éste se activa. De este modo, a la salida de los puertos podemos tener los tres fotodetectores activados, solamente los dos primeros, sólo el primero, o ninguno de ellos, constituyendo así un sistema conversor analógico-digital realizado con un cristal fotónico.

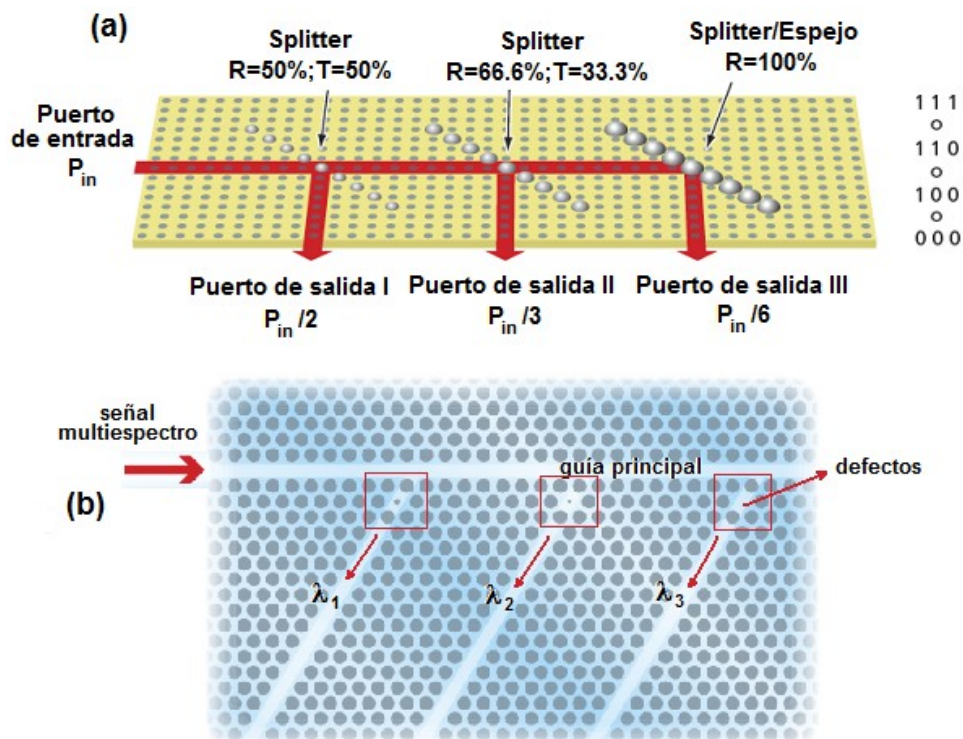


Figura A.6. (a) Conversor AD de 2 bits basado en cristales fotónicos donde una línea de defectos se encarga de dividir la señal de entrada en los diversos puertos. (b) Demultiplexador basado en cristales fotónicos donde, ahora, los defectos dividen la señal en longitud de onda hacia los diversos puertos.

En la segunda de las aplicaciones (figura A.6b), los defectos que incluimos generan un modo de transmisión dentro de la banda prohibida del cristal. Partimos de una señal multispectral con señales a longitudes de la onda  $\lambda_1$ ,  $\lambda_2$  y  $\lambda_3$ . Cada uno de los defectos está diseñado para que el modo de transmisión que genera dentro de la banda prohibida del cristal coincida con  $\lambda_1$ ,  $\lambda_2$  y  $\lambda_3$ , respectivamente, por lo que realizamos un filtraje en frecuencia en cada puerto de salida del cristal. El sistema constituye, por tanto, un demultiplexador óptico.

### 3. Cristales fotónicos tridimensionales. Controlando la emisión de luz.

En este apartado vamos a estudiar una estructura fotónica que permite suprimir un conjunto de bandas en su espectro. Esta propiedad no solamente implica que las ondas incidentes a la frecuencia del gap serán reflejadas, sino que la emisión de radiación a la frecuencia del gap también está suprimida. Una característica única de los cristales fotónicos consiste en la modificación de la emisión espontánea (el gap del cristal proporciona un confinamiento óptico para la radiación a longitudes de onda del gap, desplazando y modificando la densidad de estados fotónicos de la estructura). Por ello vamos a introducir el concepto de efecto termo-fotovoltaico.

El efecto termo-fotovoltaico se basa en una conversión energética de calor a electricidad, a través de fotones. El sistema termo-fotovoltaico más simple consiste en un par emisor térmico más célula fotovoltaica: el emisor térmico, al calentarse, convierte la energía de calor a luz, y la célula convierte la luz en electricidad. Si el emisor térmico se diseña con una estructura de cristal fotónico, entonces no emitirá en el margen de frecuencias delimitado por el gap de la estructura, concentrando así la energía en el resto de bandas. Si se diseña el sistema correctamente, la eficiencia de conversión de las células fotovoltaicas se ve muy aumentada, ya que el emisor térmico concentrará la emisión de luz en aquella banda en la que la célula es más eficiente.

El diseño de cristales fotónicos en este campo tiene una gran importancia dado que cuanto mayor sea el gap de la estructura, más se concentrará la emisión en una banda espectral más estrecha. De ahí la relevancia de los cuasi-cristales fotónicos presentados en este proyecto. Sus aplicaciones potenciales van desde la industria militar, a la propulsión espacial, la comercialización de productos como fuentes de energía auxiliar y la cogeneración de electricidad y calor.

La ley de Plank describe la radiancia espectral de las ondas electromagnéticas producidas por un cuerpo negro a temperatura  $T$  en todas las longitudes de onda del espectro. La radiancia espectral del cuerpo negro viene determinada por la siguiente fórmula:

$$L(\lambda, T) = \frac{2hc^2}{\lambda^5 \left( e^{\frac{hc}{\lambda kT}} - 1 \right)} \quad (\text{A.3})$$

De la fórmula anterior se desprende que cuanto mayor sea la temperatura del sistema, mayor será la frecuencia y la amplitud de la radiación del sistema.

Estudios realizados por *Sandia National Laboratories (Nuevo Méjico)* demuestran que, mediante un cristal fotónico fabricado en tungsteno que presenta un gap completo para longitudes de onda  $\lambda > 3\mu\text{m}$ , a una temperatura efectiva de  $1535\text{ K}$  el cristal fotónico presenta una emisión centrada en  $\lambda = 1.5\mu\text{m}$  y con un estrecho ancho de banda ( $FWHM = 0.9\mu\text{m}$ ).

El cristal fotónico diseñado puede verse en la figura A.7a. Consiste en una estructura *woodpile* realizada a partir de barras de tungsteno de  $0.5\mu\text{m}$  de anchura y  $0.75\mu\text{m}$  de

altura, separadas  $1.5\mu\text{m}$ . En la figura A.7b puede verse el espectro de emisión de la estructura.

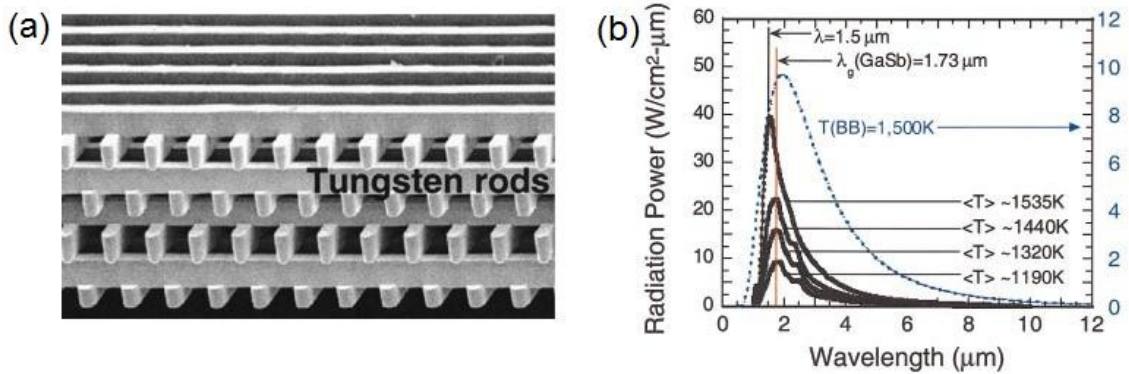


Figura A.7. (a) Fotografía SEM de un cristal fotónico de tungsteno con distribución cristalina en diamante cuya radiación espectral (b) permite la concentración de la energía en una banda mucho más reducida que la de la emisión del cuerpo negro (representado por la línea de puntos azul).

Las líneas de emisión en negro de la figura A.7b representan la curva de emisión del cristal fotónico diseñado para una tensión aplicada de 3, 4, 5 y 6.5 V, respectivamente, lo que genera una temperatura media de emisión de 1190, 1320, 1440 y 1535 K respectivamente. La línea azul punteada representa la curva de emisión del cuerpo negro a  $T = 1500\text{ K}$ . Además, la línea vertical roja representa la situación, en longitud de onda, del gap electrónico del compuesto *GaSb*, con el fin de entender mejor cómo se vería aumentada la eficiencia de una célula fotovoltaica situada tras el cristal fotónico a  $T = 1535\text{ K}$  (en comparación con el espectro del cuerpo negro).



### Anexo III. Set-up de fabricación.

El proceso de fabricación de las muestras comienza, como ya hemos comentado, con un proceso litográfico. En la figura A.8 se pueden ver instantáneas de la sala de litografía donde se realiza el procesado previo de las obleas, y el procesado de la resina necesario en el proceso fotolitográfico.



Figura A.8. (a) Previo al proceso de litografía, las muestras deben lavarse con detenimiento utilizando varios productos químicos (acetona y propanol) y un generador de ultrasonidos para eliminar las pequeñas partículas que puedan haber en la superficies de la oblea, y que estropearía la litografía posterior. (b) Para fijar la resina a la oblea de manera uniforme utilizamos una centrifugadora para esparcir el producto sobre la muestra. La centrifugadora puede ser programada con distintas velocidades, aceleraciones y tiempos de trabajo con el fin de optimizar el grosor y la uniformidad del deposito de la resina. (c) Tras colocar la resina, la oblea debe ser calentada durante unos 90 segundos para evaporar parcialmente el disolvente y prepararla para el posterior proceso de exposición. (d) Finalmente, se utiliza la máquina alineadora de la imagen para transferir el patrón de la máscara a la resina, y volvemos a (a) para revelar la resina y acabar el proceso.

Tras el proceso de litografía, las muestras son cortadas en tamaños de algo más de 2x2cm para realizar el ataque electroquímico y transferir el patrón tridimensional al futuro cristal fotónico. En la figura A.9 se muestra el set-up de ataque, que ya fue presentado en la figura 1.7, así como la celda electroquímica donde se coloca la muestra, y la matriz de LEDs que proporcionan la retro-iluminación necesaria para la generación de portadores. Los diodos están colocados en una red hexagonal para asegurar una distribución de la luz más uniforme sobre el dorso de la oblea.

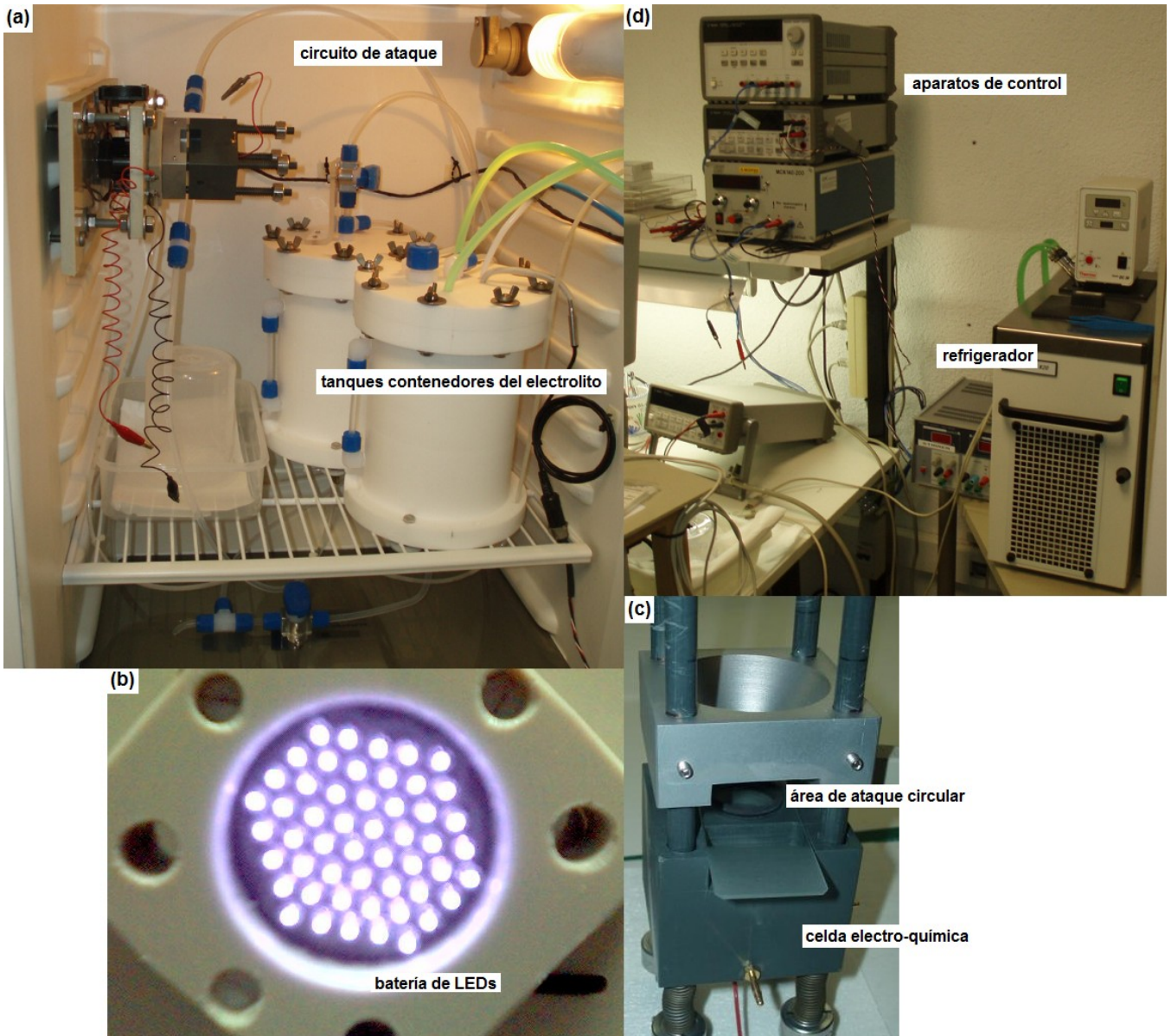


Figura A.9. (a) Set-up de ataque electro-químico con el circuito y los tanques que contendrán y por el que circulará el electrolito que atacará el silicio. (b) Fotografía de la matriz de LEDs que iluminarán la muestra para la generación de pares electrón-hueco. Delante de la matriz mostrada se sitúa también un elemento difusor para uniformizar la iluminación sobre la muestra a atacar. (c) Celda de ataque. El área limitada por la junta de Viton será donde el electrolito entre en contacto con la muestra de silicio. El resto del elemento está diseñado para evitar fugas y facilitar la circulación del ácido, así como para conectar los terminales positivos y negativos a la muestra y electrolito y crear la diferencia de potencial necesaria. (d) El proceso está controlado mediante un software de ordenador que lee las medidas tomadas por todos los aparatos de control y actúa en consecuencia, del mismo modo, la temperatura se mantiene constante durante todo el ataque con ayuda de una aparato de refrigeración.



Finalmente, para terminar con el tratamiento de las muestras, se realizan procesos de oxidación y eliminación del óxido, como ya hemos relatado en repetidas ocasiones. En la figura A.10 se muestran los hornos, con sus controles de temperatura y atmósfera, así como el banco químico en dónde posteriormente se elimina el óxido de las muestras mediante un ataque con HF.



Figura A.10. (a) Sala de hornos donde se realizan los procesos de alta temperatura como oxidación, difusión y recocido, siendo cada horno dedicado a un determinado proceso. Los hornos consisten en un tubo de cuarzo donde se realiza el proceso, y sus sistemas de control de la atmósfera y la temperatura. (b) En el horno de oxidación podemos controlar si la atmósfera será de oxígeno seco, vapores de agua o de inerte nitrógeno. (c) También podemos controlar la temperatura en tres zonas del horno: en la zona cercana a la apertura del tubo de cuarzo, media e interior. Creando así un gradiente de temperatura determinado. (d) Tras la oxidación debemos eliminar el óxido de las muestras mediante un ataque químico con HF, que se realiza en el banco químico mostrado especialmente preparado para el uso de agentes químicos peligrosos.

## Bibliografía.

- [1] J.D. Joannopoulos, R.D. Meade, y J.N. Winn, *Photonic crystals: molding the flow of light*, Princeton University Press, Princeton, 1995
- [2] J-M. Lourtioz, H. Benisty, V. Berger, y J-M. Gerard, *Photonic crystals: towards nanoscale photonic devices*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, Berlin, 2005
- [3] Bahaa E. A. Saleh, *Fundamentals of photonics*, John Wiley and Sons, Inc., 1991
- [4] A. Gopinath, S.V. Boriskina, N. Feng, B.M. Reinhard, y L. Dal Negro, *Photonic-plasmonic scattering resonances in deterministic aperiodic structures*, Nano Letters, V 8, 2423-2431, 2008
- [5] D.M. Sullivan, *Electromagnetic simulation using the FDTD method*, IEEE Press Series, 2000
- [6] L.T. Canham, *Properties of porous silicon*, IEE INSPEC, Londres, 1997
- [7] V. Lehmann, y H. Föll, *Formation mechanism and properties of electrochemically etched trenches in n-type silicon*, J. Electrochem. Soc. 137, 653-659, 1990
- [8] V. Lehmann, y U. Grüning, *The limits of macropore array fabrication*, Thin Solid Films 297, 13-17, 1997
- [9] H. Föll, M. Christophersen, J. Carstensen, y G. Hasse, *Formation and application of porous silicon*, Mater. Sci. & Eng. R, V 39, 93-141, 2002
- [10] J. Schilling, A. Birner, F. Müller, R.B. Wehrspohn, R. Hillebrand, U. Gösele, K. Busch, S. John, S.W. Leonard, y H.M. van Driel, *Optical characterisation of 2D macroporous silicon photonic crystals with bandgaps around 3.5 and 1.3  $\mu\text{m}$* , Opt. Mater., V 17, 7-10, 2001
- [11] T. Trifonov, M. Garín, A. Rodríguez, P.Ortega, L.F. Marsal, y R. Alcubilla, *Post etching shaping of macroporous silicon*, Photonic Materials, 2007
- [12] M. Garín, T. Trifonov, A. Rodríguez, L.F. Marsal, y R. Alcubilla, *Optical properties of 3D macroporous silicon structures*, Mater. Sci. and Eng. B, V 149, 275-280, 2008
- [13] M. Garín, T. Trifonov, A. Rodríguez, y R. Alcubilla, *Infrared thermal emission in macroporous silicon three-dimensional photonic crystals*, Appl. Phys. Lett., V 91, 2007
- [14] M. Qi, E. Lidorikis, P.T. Rakich, S.G. Johnson, J.D. Joannopoulos, E.P. Ippen, y H.I. Smith, *A three-dimensional optical photonic crystal with designed point defects*, Nature, V 429, 538, 2004
- [15] M. Garín, T. Trifonov, A. Rodríguez, R. Alcubilla, F. Marquier, C. Arnold, y J.J. Greffet, *Improving selective thermal emission properties of three-dimensional macroporous silicon through porosity tuning*, Appl. Phys. Lett. 93, 2008
- [16] MIT, “MIT Photonic Bands – AbInitio”, [http://ab-initio.mit.edu/wiki/index.php/MIT\\_Photonic\\_Bands](http://ab-initio.mit.edu/wiki/index.php/MIT_Photonic_Bands)
- [17] MIT, “Meep”, <http://ab-initio.mit.edu/wiki/index.php/Meep>
- [18] G. Gumbs, y M.K. Ali, *Dynamical maps, cantor spectra, and localization for Fibonacci and related quasiperiodic lattices*, Phys. Rev. Lett., V 60, 1081-1085, 1988
- [19] L. Chow, y K.H. Guenther, *Critical field patterns in optical Fibonacci multilayers*, J. Opt. Soc. Am. A, V 10, 2231-2235, 1993
- [20] R.B. Capaz, B. Koiller, y S.L.A. de Queiroz, *Gap states and localization properties of one-dimensional Fibonacci quasicrystals*, Phys. Rev. B, V 42, 6402-6407, 1990
- [21] W. Gellermann, M. Kohmoto, B. Sutherland, y P.C. Taylor, *Localization of light waves in Fibonacci dielectric multilayers*, Phys. Rev. Lett., V 72, 633-636, 1994
- [22] A.W. Rodriguez, A.P. McCauley, Y. Avniel, y S. Johnson, *Computation and visualization of photonic quasicrystal spectra via Bloch's theorem*, ArXiv, 0711.2052v1, 2007
- [23] A. Peña, S. Di Finizio, T. Trifonov, J.J. Carvajal, M. Aguiló, J. Pallarès, A. Rodríguez, R. Alcubilla, L.F. Marsal, F. Díaz, y J. Martorell, *A two-dimensional KTiOPO4 photonic crystal grown using a macroporous silicon template*, Adv. Mater. 18, 2220-2225, 2006

- [24] A. Rodríguez, D. Molinero, E. Valera, T. Trifonov, L.F. Marsal, J. Pallarès, y R. Alcubilla, *Fabrication of silicon oxide microneedles from macroporous silicon*, Sensors and Actuators B 109, 135-140, 2005
- [25] E. Xifré Pérez, T. Trifonov, J. Pallarès, y L.F. Marsal, *One-dimensional porous silicon photonic crystals for visible and NIR applications*, Phys. Stat. Sol. 9, 3466-3470, 2005
- [26] L.F. Marsal, T. Trifonov, A. Rodríguez, J. Pallarès, y R. Alcubilla, *Larger absolute photonic band gap in two-dimensional air-silicon structures*, Physica E 16, 580-585, 2003
- [27] T. Trifonov, A. Rodríguez, L.F. Marsal, J. Pallarès, y R. Alcubilla, *Two- and three-dimensional microstructures produced by electrochemical etching of silicon*, IEEE, 2005
- [28] T. Trifonov, M. Garín, A. Rodríguez, L.F. Marsal, y R. Alcubilla, *Tuning the shape of macroporous silicon*, Phys. Stat. Sol. A 204, V 10, 3237-3242, 2007
- [29] T. Trifonov, L.F. Marsal, A. Rodríguez, J. Pallarès, y R. Alcubilla, *Fabrication of two-and three-dimensional photonic crystals by electrochemical etching of silicon*, Phys. Stat. Sol. C 2, V 8, 3104-3107, 2005
- [30] Z. Král, J. Ferré-Borrull, J. Pallarès, T. Trifonov, A. Rodríguez, R. Alcubilla, y L.F. Marsal, *Characterization of 2D macroporous silicon photonic crystals: improving the photonic band identification in angular-dependent reflection spectroscopy in the mid-IR*, Mater. Sci. Eng. B, 2007

