

**CENTRO DE INVESTIGACIÓN CIENTÍFICA Y DE EDUCACIÓN SUPERIOR  
DE ENSENADA**



**CICÉSE**

---

**PROGRAMA DE POSGRADO EN CIENCIAS  
EN FÍSICA DE MATERIALES**

---

**PROPIEDADES ÓPTICAS DE SUPERREDES METÁLICO-DIELECTRICAS**

TESIS

que para cubrir parcialmente los requisitos necesarios para obtener el grado de  
DOCTOR EN CIENCIAS

Presenta:

**DÍEGO SOTO PUEBLA**

Ensenada, Baja California, México. Abril de 2004.

TESIS DEFENDIDA POR

**Diego Soto Puebla**

Y APROBADA POR EL SIGUIENTE COMITÉ

  
\_\_\_\_\_  
Dr. Felipe Ramos Méndez

*Co-Director del Comité*

  
\_\_\_\_\_  
Dr. Mufei Xiao Wu

*Co-Director del Comité*

  
\_\_\_\_\_  
Dr. Roberto Machorro Mejía

*Miembro del Comité*

  
\_\_\_\_\_  
Dr. Jesús María Siqueiros Beltrones

*Miembro del Comité*

  
\_\_\_\_\_  
Dr. Marcelino Barboza Flores

*Miembro del Comité*

  
\_\_\_\_\_  
Dr. Leonel Susano Cota Araiza

*Director del Centro de Ciencias de la  
Materia Condensada-UNAM*

  
\_\_\_\_\_  
Dr. Luis Alberto Delgado Argote

*Director de Estudios de Posgrado*

Abril de 2004

**CENTRO DE INVESTIGACIÓN CIENTÍFICA Y DE EDUCACIÓN SUPERIOR  
DE ENSENADA**



**CICESE**

---

**PROGRAMA DE POSGRADO EN CIENCIAS  
EN FÍSICA DE MATERIALES**

---

**PROPIEDADES ÓPTICAS DE SUPERREDES METÁLICO-DIELECTRICAS**

TESIS

que para cubrir parcialmente los requisitos necesarios para obtener el grado de  
DOCTOR EN CIENCIAS

Presenta:

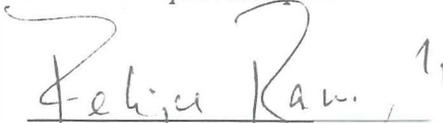
**DÍEGO SOTO PUEBLA**

Ensenada, Baja California, México. Abril de 2004.

RESUMEN de la tesis de Diego Soto Puebla presentada como requisito parcial para la obtención del grado de DOCTOR EN CIENCIAS en FISICA DE MATERIALES. Ensenada, B. C., México, Abril de 2004.

## PROPIEDADES OPTICAS DE SUPERREDES METALICO-DIELECTRICAS

Resumen aprobado por:

  
Dr. Felipe Ramos Mendieta  
Co-Director de Tesis

  
Dr. Mufei Xiao  
Co-Director de Tesis

En este trabajo se estudia teóricamente la estructura de bandas para una superred metal-dieléctrica, en donde la respuesta metálica se describe con una función dieléctrica tipo Drude en donde se toman en cuenta las pérdidas debidas a la absorción. La estructura de bandas se obtiene resolviendo un problema de eigenvalores complejo, en donde existen dos posibilidades para la solución: uno, el vector de onda es real y la frecuencia compleja, y dos, la frecuencia es real y el vector de onda complejo. Empleando la segunda posibilidad relacionamos la parte imaginaria del vector de Bloch con el comportamiento evanescente de la estructura de bandas, la cual muestra un comportamiento anómalo en la región de bajas frecuencias. Los espectros de reflexión, transmisión y absorción en la superred muestran que la estructura de bandas complejas con vector de Bloch complejo y frecuencia real constituye una herramienta adecuada para describir las propiedades ópticas de estructuras periódicas con absorción. Se consideran además los efectos en la transmisión al introducir variaciones aleatorias en el espesor y el espaciado de las capas metálicas para sistemas de longitud fija y longitud variable.

Palabras clave: cristales fotónicos, absorción metálica, medios desordenados

ABSTRACT of the Thesis presented by Diego Soto Puebla as a partial requirement to obtain the DOCTOR IN SCIENCES degree in PHYSICS OF MATERIALS. Ensenada, Baja California, México. April 2004.

## OPTICAL PROPERTIES OF METAL-DIELECTRIC SUPERLATTICES

In this work the band structure of a metal-dielectric superlattice is studied theoretically. The absorption in the metallic layers is taken into account using the Drude model for the dielectric function. The band structure is obtained by solving a complex eigenvalue problem having two possible solutions: one, real wave vector and complex frequency, and two, real frequency and complex wave vector. By using the latter we relate the imaginary part of the Bloch wave vector to the evanescent behavior of the band structure, which has an anomalous behavior in the low frequency region. The spectra of reflection, transmission and absorption show that a complex band structure with complex Bloch wave vector and real frequency is an adequate tool to describe the optical properties of periodic absorbent media. Additionally, the transmission spectra are obtained when disorder in the thickness and spacing of the metallic layers is introduced for fixed and variable total thickness of the multilayer.

Keywords: photonic crystals, metallic absorption, random media

## **DEDICATORIA**

**Para Susana**

## AGRADECIMIENTOS

A mi comité de tesis, por todo el apoyo y consejos recibidos.

Al Dr. Gustavo Hirata.

A todo el personal del Centro de Ciencias de la Materia Condensada de la UNAM.

Al personal de Servicios Escolares de CICESE.

Al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología, por la beca 85549.

Al Programa de Mejoramiento del Profesorado de la Secretaría de Educación Pública.

A las M.C. María Magdalena González A. y Azalea Lizárraga C.

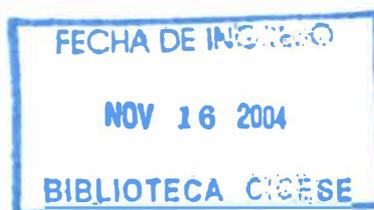
A la Dirección de Desarrollo Académico, la División de Ciencias Exactas y Naturales y al Departamento de Investigación en Física de la Universidad de Sonora.

y muy especialmente:

a Adriana Nava V., Alberto Hernández M., al Dr. Abraham Picos (†) y a todos mis amigos en Ensenada.

# CONTENIDO

	<b>Página</b>
<i>Capítulo . Introducción</i> .....	<i>1</i>
I.1 Materiales de bandas fotónicas prohibidas .....	1
I.2 Cristales fotónicos con componentes metálicas.....	5
I.3 Fabricación de cristales fotónicos.....	6
I.4 Desorden en cristales fotónicos .....	7
I.5 Esta tesis.....	8
<i>Capítulo II Materiales y métodos</i> .....	<i>9</i>
II.1 Matrices de fase y matrices dinámicas.....	9
II.2 Caso periódico infinito. Estructura de bandas .....	13
II.2.1 El teorema de Bloch.....	13
II.2.2 El método de expansión en ondas planas (MEOP).....	14
II.2.3 Soluciones con la matriz de transferencia (MMT) .....	16
II.2.4 Estructuras con componentes metálicas. El modelo de Drude .....	23
<i>Capítulo III Resultados y discusión</i> .....	<i>29</i>
III.1 Estructura de bandas .....	29
III.2 El límite de bajas frecuencias .....	40
III.3 Superredes desordenadas .....	42
III.3.1 Transmisión en una multicapa desordenada .....	45
III.3.1.1 Multicapa de longitud total constante .....	45
III.3.1.2 Multicapa de longitud total variable .....	51
III.3.2 Desorden y localización de luz .....	56
<i>Capítulo IV Conclusiones</i> .....	<i>63</i>
<i>Referencias</i> .....	<i>66</i>



## LISTA DE FIGURAS

Figura		Página
1	Ejemplo de un cristal fotónico unidimensional (tomado de Polman y Wiltzius, 2001).....	2
2	Ejemplo de un cristal fotónico en dos dimensiones (tomado de Polman y Wiltzius, 2001).....	2
3	Ejemplo de un cristal fotónico en tres dimensiones (tomado de Blaaderen, 2003).....	3
4	Diagrama de las relaciones de dispersión de un material dieléctrico homogéneo de índice $n$ (línea punteada) y de una superred infinita con índice efectivo $n$ . La región sombreada corresponde a una banda prohibida. ....	5
5	Sistema multicapa .....	10
6	Celda unitaria para una multicapa periódica.....	16
7	Estructura de bandas de una superred, en donde se han utilizado los valores $n_1 = 3.4$ , $n_2 = 1.4$ y $a = b$ .....	20
8	Reflectancia para distintos ángulos de incidencia para polarización $s$ y polarización $p$ . La región sombreada representa reflexión omnidireccional .....	21
9	Relación entre la estructura de bandas en una superred infinita y la reflectancia de un sistema finito. Los parámetros son los mismos de la figura 7.....	22
10	Dependencia espectral de $\epsilon_r$ y $\epsilon_i$ para un metal tipo Drude .....	26
11	Estructura de bandas para una multicapa dieléctrica con $n_1=2.35$ , $n_2=1$ , $a=10$ nm, $b=90$ nm.....	29
12	Estructura de bandas cuando la absorción metálica es cero .....	31
13	Estructura de bandas con $\gamma = 0.01\omega_p$ .....	32

## LISTA DE FIGURAS (continuación)

Figura		Página
14	Con $\gamma \neq 0$ no existe estructura de bandas .....	33
15	Estructura de bandas para distintos valores de $\gamma$ .....	34
16	Estructura de bandas para $\gamma = 0$ y $\gamma = \omega_p$ comparadas con la de propagación en aire .....	35
17	Estructura de la función $f_1$ con la frecuencia.....	35
18	Estructura de la función $f_2$ con la frecuencia .....	36
19	Estructura de bandas y transmisión para algunos valores de $\gamma$ .....	36
20	Absorción para algunos valores de $\gamma$ .....	37
21	Transmitancia para los mismos valores de $\gamma$ que en la figura 19.....	38
22	Transmitancia para valores crecientes de $\gamma$ .....	39
23	Distancia de decaimiento como función de la frecuencia. En el límite de bajas frecuencias las ondas pueden atravesar una muestra de 1100 nm.....	42
24	Esquema para la variación de: a) la posición de las capas metálicas, b) el espesor de las capas metálicas. En ambos casos la longitud total L permanece constante .....	44
25	Variación de la transmisión con desorden uniforme en la posición de las capas metálicas. $\gamma = 0.001\omega_p$ , $L = 5100$ nm, $f_a = 0.1$ y $d = 100$ nm.....	46
26	Variación de la transmisión con desorden gaussiano en la posición de las capas metálicas. $\gamma = 0.001\omega_p$ , $L = 5100$ nm, $f_a = 0.1$ y $d = 100$ nm.....	47
27	Variación de la transmisión con desorden uniforme en el espesor de las capas metálicas. $\gamma = 0.001\omega_p$ , $L = 5100$ nm, $f_a = 0.1$ y $d = 100$ nm.....	47

## LISTA DE FIGURAS (continuación)

Figura		Página
28	Variación de la transmisión con desorden gaussiano en el espesor de las capas metálicas. $\gamma = 0.001\omega_p$ , $L = 5100$ nm, $f_a = 0.1$ y $d=100$ nm .....	48
29	Transmisión con distintas fracciones de llenado $f$ en una multicapa periódica ( $f = a/d$ ), $d = 100$ nm .....	49
30	Variación de la transmisión con desorden uniforme en la posición y el espesor de las capas metálicas. $\gamma = 0.001\omega_p$ .....	50
31	Variación de la transmisión con desorden gaussiano en la posición y el espesor de las capas metálicas. $\gamma = 0.001\omega_p$ .....	51
32	Variación de la transmisión con desorden uniforme en el espesor de las capas metálicas. $\gamma = 0.001\omega_p$ .....	52
33	Variación de la transmisión con desorden gaussiano en el espesor de las capas metálicas. $\gamma = 0.001\omega_p$ .....	52
34	Variación de la transmisión con desorden uniforme en el espesor de las capas dieléctricas. $\gamma = 0.001\omega_p$ .....	53
35	Variación de la transmisión con desorden gaussiano en el espesor de las capas dieléctricas. $\gamma = 0.001\omega_p$ .....	53
36	Variación de la transmisión con desorden uniforme en el espesor de las capas metálicas y dieléctricas. $\gamma = 0.001\omega_p$ .....	54
37	Variación de la transmisión con desorden gaussiano en el espesor de las capas metálicas y dieléctricas. $\gamma = 0.001\omega_p$ .....	54
38	Transmisión para desorden en todas las capas en un sistema de longitud $L$ variable. Con alto grado de desorden las bandas desaparecen, excepto la asociada con el metal .....	55

## LISTA DE FIGURAS (continuación)

Figura		Página
39	Distribución del espesor total $L$ para distintas multicapas con variaciones aleatorias en torno al valor sin desorden (indicado por la flecha), cuando se varían los espesores de todas las capas. a) desorden uniforme. b) desorden gaussiano. El porcentaje de variación en cada capa es el mismo.....	57
40	Longitud de localización cuando la longitud total $L$ es constante y se introduce desorden en la posición. a) desorden uniforme. b) desorden gaussiano. Con desorden moderado es posible distinguir una estructura de bandas.....	58
41	Longitud de localización cuando la longitud total $L$ es constante y se introduce desorden en el espesor de las capas metálicas. a) desorden uniforme. b) desorden gaussiano. Con desorden moderado desaparece la semejanza con la estructura de bandas.....	59
42	Longitud de localización cuando la longitud total $L$ es variable y se introduce desorden en el espesor de las capas metálicas. a) desorden uniforme. b) desorden gaussiano. Aún para valores grandes de desorden la longitud de localización presenta una estructura semejante a la estructura de bandas.....	60
43	Longitud de localización $l$ para distintos grados de desorden cuando varía el espaciamiento de las capas metálicas. a) desorden uniforme. b) desorden gaussiano .....	61

# I. Introducción

## I.1 Materiales de bandas fotónicas prohibidas

En la última década ha habido un gran interés dentro del área de nuevos materiales cuyas propiedades mecánicas, químicas, electrónicas y ópticas se puedan controlar adecuadamente para una aplicación específica. Algunos de estos materiales (plásticos, cerámicas, aleaciones, etc.) pueden reemplazar o substituir a los materiales tradicionales o combinarse con éstos para formar estructuras novedosas susceptibles de emplearse en la elaboración de nuevos dispositivos (semiconductores, superconductores, fibras ópticas, etc.). Una clase especial de nuevos materiales son los llamados cristales fotónicos, en los que se busca el control del flujo de luz a escala microscópica, con un potencial de aplicaciones en óptica, optoelectrónica y en especial conmutadores ópticos para el desarrollo de la computación óptica (Joannopoulos et al, 1995; John y Florescu, 2001).

Cuando la luz interactúa con materiales de distinto índice de refracción se observan los fenómenos de esparcimiento y difracción. Si la variación de los índices de refracción es periódica (en una, dos o tres dimensiones) la luz reflejada por un conjunto de planos paralelos puede interferir constructivamente; a este fenómeno se le llama difracción de Bragg. A un sistema compuesto de distintos dieléctricos dispuestos de forma periódica se le denomina *cristal fotónico* si la periodicidad es del orden de la longitud de onda de la luz de interés. En las figuras 1, 2 y 3 se muestran ejemplos de cristales en una, dos y tres dimensiones, respectivamente. En estos sistemas la luz no puede propagarse en determinadas direcciones del cristal.

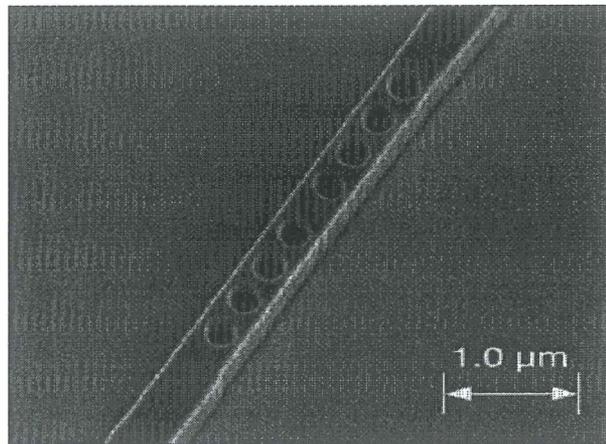


Figura 1. Ejemplo de un cristal fotónico unidimensional (tomado de Polman and Wiltzius, 2001).

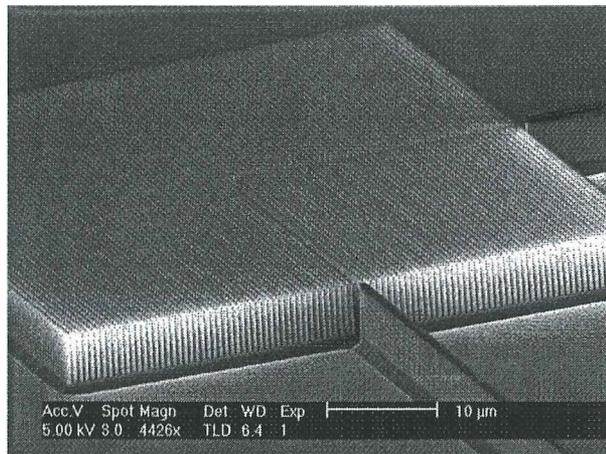


Figura 2. Ejemplo de un cristal fotónico en dos dimensiones (tomado de Polman and Wiltzius, 2001).

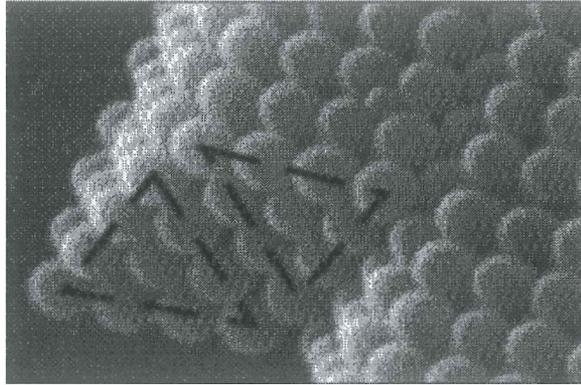


Figura 3. Ejemplo de un cristal fotónico en tres dimensiones (tomado de Blaaderen, 2003).

Las propiedades ópticas de un cristal fotónico se derivan de la relación de dispersión que expresa la frecuencia  $\omega$  en función del vector de propagación  $k$  de las ondas en el material. Para un medio homogéneo de constante dieléctrica  $\varepsilon$  la dispersión de la luz es una línea recta:

$$\omega = \frac{c}{\sqrt{\varepsilon}} k \quad (1)$$

en donde  $c$  es la velocidad de la luz en el vacío. En un caso más general la constante dieléctrica en realidad es una función de la frecuencia:  $\varepsilon = \varepsilon(\omega)$ . Al introducir una variación periódica del índice de refracción la relación de dispersión cambia significativamente. En la figura 4 se muestran las relaciones de dispersión de un medio homogéneo y de un cristal fotónico unidimensional, o superred. Para ésta última vemos que la relación de dispersión muestra una curvatura alrededor del vector de onda 0.5, correspondiente al borde de la primera zona de Brillouin (Ashcroft, 1976). En este borde hay un intervalo de frecuencias para las cuales no existe un vector de onda real asociado,

por lo que la radiación a estas frecuencias no puede propagarse en la superred. Los vectores de onda son imaginarios, y decaen exponencialmente en el medio. A este intervalo de frecuencias prohibidas a la propagación de la luz se le llama brecha o banda prohibida. Para cristales en dos y tres dimensiones es posible la existencia de bandas prohibidas en varias direcciones, y si se superponen las bandas prohibidas en todas las direcciones se dice que existe una banda prohibida completa en la que la luz no puede propagarse en ninguna dirección, por lo que una fuente dentro del mismo (p.e. un átomo excitado) no podría emitir espontáneamente radiación a frecuencias comprendidas dentro de la banda prohibida (Yablonovitch, 1987). Yablonovitch fabricó en 1991 el primer cristal fotónico con bandas reproduciendo una red cúbica centrada en la cara (Yablonovitch et al, 1991), al que han seguido distintos tipos de arreglos para obtener bandas completas (Ho et al, 1990; Sözüer y Dowling, 1994). En dos dimensiones los cristales fotónicos se pueden fabricar colocando cilindros en diferentes configuraciones (Villeneuve y Piché, 1992), y son de gran importancia por la relativa facilidad con la que se pueden integrar a la tecnología existente de guías de onda y fibras ópticas para su uso en telecomunicaciones; otras aplicaciones incluyen el diseño de diodos emisores de luz (Fan et al, 1997; Meier et al, 1999) y guías de onda de alta transmisión con ángulos pronunciados (Mekis et al, 1996)

El uso más común de los cristales fotónicos se encuentra en sistemas unidimensionales (1D), que en este caso denominaremos superredes, donde se diseñan multicapas para la elaboración de espejos dieléctricos de alta reflectividad y como filtros para determinadas longitudes de onda. A estos sistemas se les conoce como reflectores de Bragg (Yeh, 1988), y típicamente funcionan a incidencia normal, perdiéndose rápidamente

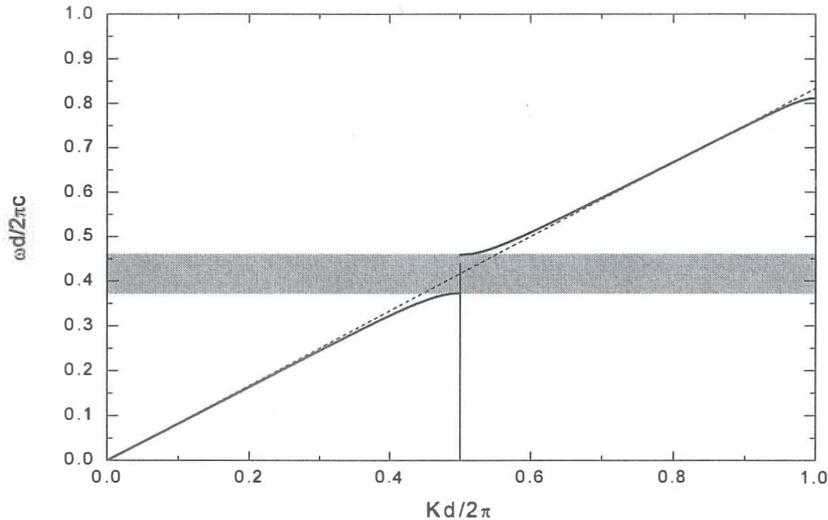


Figura 4. Diagrama de las relaciones de dispersión de un material dieléctrico homogéneo de índice  $n$  (línea punteada) y de una superred infinita con índice efectivo  $n$ . La región sombreada corresponde a una banda prohibida.

la alta reflectividad a otros ángulos de incidencia. Sin embargo, combinando adecuadamente los parámetros de espesores e índices de refracción de la multicapa es posible obtener espejos omnidireccionales con una reflectividad relativamente alta (Chigrin et al, 1999, Bruyant et al, 2003). Otras aplicaciones para estos sistemas son la implementación de moduladores electro-ópticos y elaboración de detectores de radiación (Nelson y Haus, 2003), así como arreglos que posibilitan modificar la radiación de cuerpo negro de fuentes dentro del cristal fotónico (Cornelius y Dowling, 1999).

## I.2 Cristales fotónicos con componentes metálicas

La mayor parte del trabajo desarrollado en la investigación de cristales fotónicos se ha centrado en la elaboración de estructuras con constituyentes puramente dieléctricos dejando en un segundo plano estructuras con componentes metálicas, ya que de esta manera

se evitan los problemas asociados a la absorción en el metal. Al considerar la presencia de metales es práctica común emplear el modelo de Drude (ver por ejemplo, Wooten, 1972) para obtener la respuesta metálica. Considerando el caso sin amortiguamiento se ha encontrado que en un sistema metal-dieléctrico la estructura de bandas sufre modificaciones respecto del caso puramente dieléctrico, apareciendo una banda prohibida adicional en el régimen de baja frecuencia (McGurn y Maradudin, 1993); por otro lado, debido a la alta reflectividad en la interfaz metal-dieléctrico la anchura de la banda prohibida aumenta (Bloemer y Scalora, 1998; Moroz et al, 2001). Cuando se toma en cuenta la presencia de amortiguamiento metálico la estructura de bandas desaparece (Tip et al, 2000), aunque para amortiguamiento moderado el efecto es muy pequeño para ser apreciado en cálculos de transmisión, misma que depende del grosor del cristal y aumenta conforme aumenta la frecuencia (Sigalas et al, 1994). Una ventaja de los cristales fotónicos metal-dieléctricos es su menor tamaño respecto de las estructuras puramente dieléctricas equivalentes, lo que los hace más atractivos para elaborar recubrimientos antirreflejantes.

### **I.3 Fabricación de cristales fotónicos**

La fabricación de medios con variaciones periódicas de la constante dieléctrica generalmente se basa en el uso de dos materiales de distinto índice de refracción como elementos básicos de construcción de la red periódica, cuya escala es de milímetros a centímetros si se usan microondas y de nanómetros en el caso visible e infrarrojo cercano. En la elaboración de cristales fotónicos en dos y tres dimensiones a escalas submicrométricas se pueden distinguir dos enfoques: el autoensamblaje de partículas

coloidales, donde se usan esferas coloidales que se acomodan en distintos arreglos cristalinos y la litografía (de haz de electrones, por ejemplo) en combinación con técnicas de corrosión (de Dood, 2002). En el caso unidimensional la industria emplea de forma rutinaria diversas técnicas de crecimiento de películas delgadas: métodos evaporativos (térmica, por haz de electrones o iones), por descarga eléctrica (espurreo, procesos de plasma), por deposición (de vapor químico, electrolítica), procesos térmicos (oxidación, polimerización) y mediante procedimientos químicos de fase líquida (anodización electrolítica, reducción química) (Furman y Tikhonravov, 1992; Kern y Schuegraf, 1988).

## **I.4 Desorden en cristales fotónicos**

En principio, los cristales fotónicos son estructuras perfectamente periódicas. En la práctica, al fabricar un cristal fotónico siempre se introducen desviaciones de los parámetros ideales provocando un desordenamiento del sistema y es de esperar que estos cambios se reflejen en la estructura de bandas. Para sistemas 3D se ha encontrado que las bandas prohibidas se mantienen incluso para grados de desorden relativamente grandes (Fan et al, 1995; Sigalas et al, 1999). Por otra parte, estudios en estructuras dieléctricas 1D y 2D muestran que la transmisión para frecuencias dentro de la banda prohibida aumenta al considerar valores moderados de desorden (Freilikher et al, 1995), y al aumentar el grado de desorden se llega a un umbral en donde ya no es posible hablar de existencia de bandas prohibidas (Vlasov et al, 1999; Kaliteevski et al, 2002). Sin embargo, se sabe que en sistemas desordenados es posible la existencia de estados localizados debidos a la interferencia de la luz esparcida dentro del medio (John, 1987; Wiersma et al, 1997),

fenómeno conocido como localización de Anderson, efecto que es más probable de observar cuando la frecuencia de la onda se encuentra en la vecindad del borde de una banda prohibida en la estructura de bandas para un sistema en promedio periódico (John, 1987). Para el caso de una estructura periódica unidimensional se puede obtener una configuración desordenada en promedio periódica introduciendo variaciones aleatorias en los espesores de las distintas capas del sistema. Para un número grande de configuraciones, en promedio, los aumentos y disminuciones de los espesores tienden a cancelarse, por lo que al promediar se puede considerar al sistema periódico.

## **I.5 Esta tesis**

En el presente trabajo se estudia la estructura de bandas y la transmisión para un sistema periódico unidimensional compuesto de capas metálicas y dieléctricas, así como los efectos de desorden sobre el espectro de transmisión del sistema. Las bandas de energía fotónica las obtenemos dentro de la aproximación de vector de onda complejo y frecuencia real. Como veremos esta no ha sido una forma muy popular de hacer este tipo de cálculos pues en la literatura se reportan soluciones de sistemas similares con vector de onda real y frecuencia compleja. No obstante, nosotros procedimos considerando que una frecuencia real es más apropiada para la realización experimental. En el capítulo II se discute el método de la matriz de transferencia para el cálculo de la transmisión y la estructura de bandas de una superred. El capítulo III contiene los resultados obtenidos de estructura de bandas y transmisión. En el capítulo IV se aborda la forma de introducir desorden en la superred y los efectos del desorden en la transmisión. Finalmente, en el capítulo V se presentan las conclusiones

## II. Materiales y métodos

La propagación de ondas electromagnéticas en sistemas multicapas constituye un fenómeno de esparcimiento múltiple. Si la estructura es periódica, por ejemplo, los campos que se reflejan y transmiten en cada interfaz pueden alcanzar estados estacionarios de oscilación en donde no ocurre transmisión efectiva de energía. Por su parte, una sistema no periódico que posee cierto grado de correlación entre los parámetros materiales y estructurales que lo constituyen puede soportar un fenómeno de localización de campos. En la práctica estos fenómenos se estudian considerando la solución a las ecuaciones de Maxwell en forma de onda plana dentro de cada capa homogénea. Luego, las condiciones de frontera para los campos así como otras consideraciones específicas para sistemas periódicos o desordenados (teorema de Bloch, criterio de desorden, etc.) permitirán su completa descripción. Iniciamos esta exposición presentando las matrices dinámicas y de fase (de propagación) las cuales son el pilar del método de transferencia que usaremos en este trabajo.

### II.1 Matrices de fase y matrices dinámicas

Consideremos la propagación de ondas electromagnéticas en el sistema multicapa mostrado en la figura 5. Cada capa está definida por un espesor  $d_l = x_{l+1} - x_l$  y un índice de refracción  $n_l$ . El arreglo de capas se encuentra limitado a la izquierda por el medio de índice  $n_0$  (medio incidente), y a la derecha por un medio de índice  $n_s$  (substrato). El plano

de propagación es el plano  $x$ - $z$ , y  $\beta$  es la componente del vector de onda  $\mathbf{k}$  a lo largo del eje  $z$ . Con estas condiciones podemos escribir para cada capa (Yeh, 1988):

$$E(x, z) = E(x) e^{i(\omega t - \beta z)} \quad (2)$$

en donde:

$$E_l(x) = a_l e^{-ik_{xl}(x-x_l)} + b_l e^{ik_{xl}(x-x_l)}, \quad x_{l-1} < x < x_l \quad (3)$$

La ecuación (3) expresa que el campo total en cada capa se compone de las ondas reflejadas y transmitidas en cada una de las interfaces que definen cada capa. Las amplitudes  $a_l$  y  $b_l$  son constantes, y:

$$k_{lx} = \left[ \left( n_l \frac{\omega}{c} \right)^2 - \beta^2 \right]^{\frac{1}{2}} \quad (4)$$

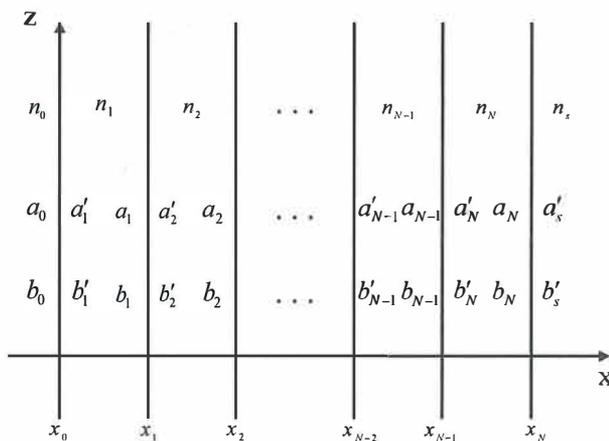


Figura 5. Sistema multicapa.

Empleando las condiciones de frontera para los campos en una interfaz definida por los medios  $l$  y  $l+1$ , que son continuidad de  $E_y$  y  $H_z$  para *polarización s* (TE), y de  $E_z$  y  $H_y$  para *polarización p* (TM), los campos a la izquierda y derecha de la interfaz, denotados como  $a_l$ ,  $b_l$ ,  $a'_{l+1}$  y  $b'_{l+1}$ , respectivamente, cumplen la relación:

$$D_l \begin{pmatrix} a_l \\ b_l \end{pmatrix} = D_{l+1} \begin{pmatrix} a'_{l+1} \\ b'_{l+1} \end{pmatrix} \quad (5)$$

en donde:

$$D_l = \begin{cases} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \frac{c}{\omega} k_{lx} & -\frac{c}{\omega} k_{lx} \end{pmatrix} & \text{polarización s} \\ \begin{pmatrix} \frac{c}{n_l \omega} k_{lx} & \frac{c}{n_l \omega} k_{lx} \\ n_l & -n_l \end{pmatrix} & \text{polarización p} \end{cases} \quad (6)$$

Las matrices  $D_l$  se conocen como las matrices dinámicas del medio  $l$ . Para ir de la interfaz  $l$  a la siguiente interfaz  $l+1$  la onda atraviesa un medio de anchura  $d_{l+1} = x_{l+1} - x_l$  en la capa  $l+1$ , por lo que experimenta un cambio de fase  $\phi_{l+1} = k_{l+1} d_{l+1}$ , de manera que las amplitudes  $a_{l+1}$ ,  $b_{l+1}$  se relacionan con  $a'_{l+1}$  y  $b'_{l+1}$  en la capa  $l+1$  medio de la matriz de propagación  $P_{l+1}$  como:

$$\begin{pmatrix} a'_{l+1} \\ b'_{l+1} \end{pmatrix} = P_{l+1} \begin{pmatrix} a_{l+1} \\ b_{l+1} \end{pmatrix}, \quad P_{l+1} = \begin{pmatrix} e^{i\phi_{l+1}} & 0 \\ 0 & e^{-i\phi_{l+1}} \end{pmatrix} \quad (7)$$

La combinación de las matrices dinámicas y de propagación nos permite describir la propagación de los campos a través de cualquier distribución discreta de índices de refracción al emplearlas sucesivamente. De esta manera podemos escribir:

$$\begin{pmatrix} a_0 \\ b_0 \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} a'_s \\ b'_s \end{pmatrix} \quad (8)$$

en donde

$$M = D_0^{-1} \left[ \prod_{l=1}^N D_l P_l D_l^{-1} \right] D_s \quad (9)$$

$M$  es una matriz 2x2 que relaciona los campos en el medio incidente con los campos en el medio transmitido. A esta matriz se le conoce como Matriz de Transferencia. Para el cálculo de la reflexión y transmisión definimos las relaciones:

$$r \equiv \begin{pmatrix} b_0 \\ a_0 \end{pmatrix}_{b'_s=0} \quad (10)$$

$$t \equiv \begin{pmatrix} a'_s \\ a_0 \end{pmatrix}_{b'_s=0} \quad (11)$$

con la condición  $b'_s = 0$  pues en el substrato la onda únicamente se transmite. Con las ecuaciones (8), (10) y (11) los coeficientes de reflexión y transmisión tienen la forma:

$$r = \frac{M_{21}}{M_{11}} \quad (12)$$

$$t = \frac{1}{M_{11}} \quad (13)$$

## II.2 Caso periódico infinito. Estructura de bandas.

### II.2.1 El teorema de Bloch

Un caso especial de multicapa es aquella donde las capas se ordenan de forma periódica ABABAB..., en donde A corresponde a una capa de espesor  $a$  y constante dieléctrica  $\varepsilon_a$  y B a una capa de espesor  $b$  y constante dieléctrica  $\varepsilon_b$ . La propagación de ondas de luz a través de esta estructura infinita libre de superficie es una situación análoga al movimiento de electrones en un cristal (Stefanou et al, 1992; Mishra y Satpathy, 2003), donde la disposición periódica de los átomos modifica la relación de dispersión de los electrones libres. En nuestro caso la periodicidad de las capas proporciona una distribución periódica de la constante dieléctrica, con lo que podemos emplear el teorema de Bloch, el cual establece que los campos se pueden escribir como el producto de dos funciones de la forma:

$$\psi_K(x) = e^{iKx} u_K(x) \quad (14)$$

donde  $u_K(x) = u_K(x+d)$ . Es decir, la función  $u_K(x)$  posee la misma periodicidad que la multicapa. La soluciones quedan determinadas entonces por el valor del vector de onda de

Bloch  $K$  y por la función periódica  $u_K(x)$ . Un aspecto importante del vector de Bloch es que los estados determinados por los valores  $K$  y  $K + \frac{2m\pi}{d}$ ,  $m = \pm 1, \pm 2, \dots$  son iguales, por lo que basta con encontrar las soluciones en el intervalo  $-\frac{\pi}{d} < K \leq \frac{\pi}{d}$ . A esta región se le conoce como primera zona de Brillouin.

## II.2.2 El método de expansión en ondas planas (MEOP)

La ecuación de ondas electromagnéticas puede resolverse utilizando una base completa de funciones. Debido a la periodicidad en una dimensión las funciones apropiadas son las ondas planas de la forma  $\exp(iG_n x)$  con  $G_n = 2\pi n/d$ . Son los vectores de la red recíproca asociada a la red de periodicidad unidimensional.

Las ecuaciones a resolver son :

$$\left[ \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{1}{\varepsilon(x)} \frac{\partial}{\partial x} \right) + \frac{1}{\varepsilon(x)} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] \mathbf{H} = \left( \frac{\omega}{c} \right)^2 \mathbf{H} \quad (15)$$

para polarización  $p$ , y:

$$\frac{1}{\varepsilon(x)} \left[ \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] \mathbf{E} = \left( \frac{\omega}{c} \right)^2 \mathbf{E} \quad (16)$$

para polarización  $s$ . Utilizando el teorema de Bloch (14) y la base ortogonal de ondas planas las soluciones toman la forma (Ramos-Mendieta y Halevi, 1997):

$$\psi_K(x, z) = \sum_G \psi_K(G) e^{i(K+G)x} e^{i\beta z} \quad (17)$$

donde  $\beta$  es la constante de propagación a lo largo del eje  $z$  y  $K$  es el vector de Bloch.  $\psi_K$  representa la amplitud del campo magnético(eléctrico) y la suma se realiza sobre el conjunto infinito de vectores de la red recíproca de la superred. Puesto que la función dieléctrica (y su inversa) son funciones periódicas, usamos la misma base ortogonal para hacer una expansión en series de Fourier y obtenemos:

$$\frac{1}{G} \sum_G \mu_G \exp[iGx] \quad (18)$$

Substituyendo las ecuaciones (17) y (18) en las ecuaciones (15) y (16), y considerando que las funciones  $\exp[-iGx]$  y  $\exp[-iG'x]$  son ortonormales en la celda unitaria, obtenemos:

$$\sum_G \mu_{G-G'} [(K+G')^2 + \beta^2] E_K(G') = \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 E_K(G) \quad \text{pol. s} \quad (19)$$

y:

$$\sum_G \mu_{G-G'} [(K+G)(K+G') + \beta^2] H_K(G') = \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 H_K(G) \quad \text{pol. p} \quad (20)$$

Si permitimos que  $G$  tome todos los puntos de la red recíproca, entonces las ecuaciones (19) y (20) representan cada una un conjunto infinito de ecuaciones lineales para los vectores propios  $E_K$  y  $H_K$ . Para valores dados del vector de Bloch  $K$  y la constante de propagación  $\beta$  cada conjunto de ecuaciones tiene soluciones para un ciertos valores

proprios  $\omega_j(K, \beta)$ , donde el índice  $j$  especifica los distintos modos de oscilación de los campos electromagnéticos

### II.2.3 Soluciones con la matriz de transferencia (MMT)

Un método alternativo para resolver la ecuación de onda lo constituye el MMT. Como veremos, a diferencia del MEOP, este método permite obtener una relación de dispersión semi-analítica para las ondas en sistemas infinitos, además de su utilidad para obtener las propiedades ópticas R y T de sistemas finitos como hemos mencionado en la sección II.

En la multicapa periódica podemos identificar una celda básica (o unitaria) que se repite periódicamente (ver figura 6).

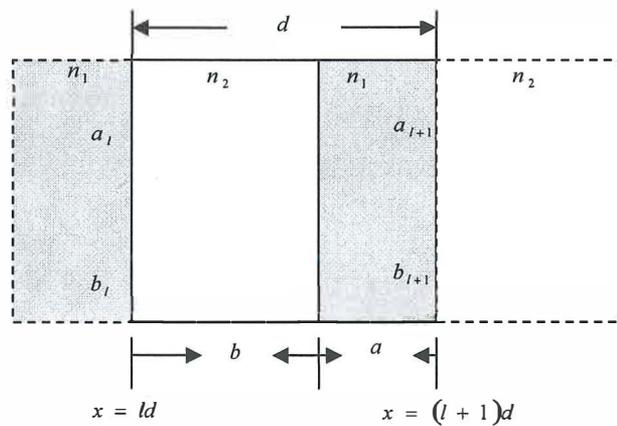


Figura 6. Celda unitaria para una multicapa periódica.

La matriz de transferencia  $M$  en este caso se obtiene al construir una matriz  $M_C$  para la celda unitaria de manera que  $M = (M_C)^N$ , donde  $N$  es el número de celdas que hay en el sistema. Sea  $M_C$  es la matriz de transferencia para una celda:

$$\begin{pmatrix} a_{l+1} \\ b_{l+1} \end{pmatrix} = M_C \begin{pmatrix} a_l \\ b_l \end{pmatrix} \quad (21)$$

Empleando el teorema de Bloch podemos expresar el campo eléctrico en un medio periódico como:  $E(x) = E_K(x) \exp(iKx)$ , donde  $E_K(x+d) = E_K(x)$ . De esta manera podemos escribir:

$$\begin{pmatrix} a_{l+1} \\ b_{l+1} \end{pmatrix} = e^{iKd} \begin{pmatrix} a_l \\ b_l \end{pmatrix} \quad (22)$$

y con la ecuación (21) obtenemos:

$$M_C \begin{pmatrix} a_l \\ b_l \end{pmatrix} = e^{iKd} \begin{pmatrix} a_l \\ b_l \end{pmatrix} \quad (23)$$

La ecuación anterior constituye un problema de eigenvalores  $M\mathbf{x} = m\mathbf{x}$ , cuya solución es de la forma:

$$m_{\pm} = e^{iKd} = \frac{(M_{C11} + M_{C22})}{2} \pm \left[ \left( \frac{(M_{C11} + M_{C22})}{2} \right)^2 - 1 \right]^{\frac{1}{2}} \quad (24)$$

Ahora, de la ecuación (21) tenemos que al aplicar  $M_C$  a una superred infinita, cuando  $N \rightarrow \infty$  el límite de  $(M_C)^N$  debe existir. Si  $\frac{1}{2}(M_{C11} + M_{C22}) > 1$  entonces los eigenvalores  $m_{\pm}$  son reales y  $\lim_{N \rightarrow \infty} |m_{\pm}^N| \rightarrow \infty$ , con lo que la amplitud de la onda se vuelve infinita. De esta manera con  $\frac{1}{2}(M_{C11} + M_{C22}) \leq 1$ . obtenemos:

$$\cos Kd \leq \frac{1}{2}(M_{C11} + M_{C22}) \quad (25)$$

Todos los valores de frecuencia para los cuales  $\left| \frac{1}{2}(M_{C11} + M_{C11}) \right| \leq 1$  dan como resultado ondas propagantes. En caso contrario las ondas son evanescentes; esto es, se ven sujetas a un amortiguamiento exponencial.

De la ecuación (25) obtenemos la *relación de dispersión*:

$$f(\omega, K) = \cos Kd - \frac{1}{2}(M_{C11} + M_{C22}) = 0 \quad (26)$$

que describe el comportamiento de las ondas de Bloch en la superred. En términos de los índices de refracción  $n_1, n_2$  y los espesores  $a$  y  $b$  de las capas escribimos la relación de dispersión como:

$$\cos(Kd) = \cos(k_{1x}a)\cos(k_{2x}b) - \frac{1}{2} \left[ \frac{k_{2x}}{k_{1x}} + \frac{k_{1x}}{k_{2x}} \right] \sin(k_{1x}a)\sin(k_{2x}b) \quad (27)$$

para polarización s y:

$$\cos(Kd) = \cos(k_{1,x}a)\cos(k_{2,x}b) - \frac{1}{2} \left[ \frac{n_1^2 k_{2,x}}{n_2^2 k_{1,x}} + \frac{n_2^2 k_{1,x}}{n_1^2 k_{2,x}} \right] \sin(k_{1,x}a)\sin(k_{2,x}b) \quad (28)$$

para polarización  $p$ .

En la figura 7 se muestra una estructura de bandas proyectada correspondiente a una superred infinita compuesta de capas de índices  $n_1=3.4$  y  $n_2=1.4$ , que son valores cercanos al  $\text{SiO}_2$  y  $\text{Si}$  en el infrarrojo (Chigrin y Sotomayor, 2000), donde se ha considerado igual espesor para cada capa ( $a = b$ ). Las regiones en gris claro indican estados accesibles a la propagación de las ondas electromagnéticas, en tanto que las regiones en blanco corresponden a estados evanescentes y se conocen como bandas prohibidas (a la propagación), de manera que una onda de frecuencia  $\omega$  que incida sobre la superred con un ángulo  $\theta_i$  será fuertemente reflejada si la frecuencia encuentra en una banda prohibida.

Cuando la onda incidente tiene polarización  $p$  y el ángulo de incidencia se aproxima al

ángulo de Brewster  $\theta_B = \arctan\left(\frac{n_1}{n_2}\right)$ , indicado por la línea  $L_B$ , las bandas prohibidas se

estrechan hasta desaparecer, y la reflexión disminuye a cero.

Las líneas rectas en la figura 7 corresponden a las *líneas de luz*, y representan la propagación en el vacío. En la región comprendida por encima de las líneas de luz los modos de Bloch para la propagación se pueden excitar externamente (Fink et al, 1998) y corresponden a la zona gris claro entre dichas líneas. La región gris oscuro representa estados prohibidos a la propagación para las dos polarizaciones simultáneamente. Además,

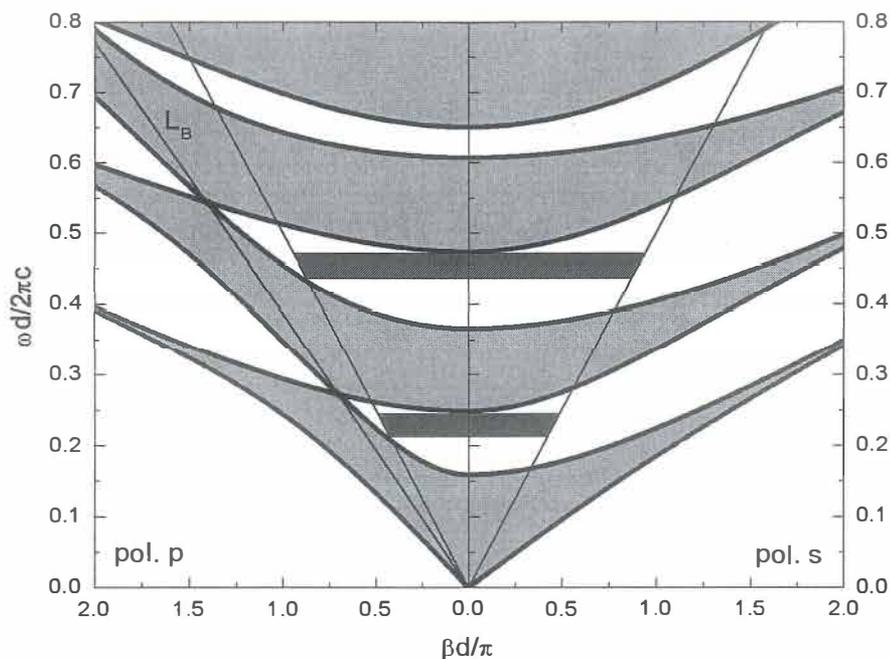


Figura 7. Estructura de bandas de una superred, en donde se han utilizado los valores  $n_1 = 3.4$ ,  $n_2 = 1.4$  y  $a=b$ .

para una frecuencia fija dentro de esta región las ondas incidentes serán reflejadas no importando el ángulo de incidencia; es decir, la superred se comporta como un espejo omnidireccional. En la figura 8 se muestra la reflectancia para distintos ángulos de incidencia y polarización; las regiones en gris son las bandas de reflexión omnidireccional.

Cuando la incidencia es normal desaparece la distinción entre las dos polarizaciones. La figura 9 muestra la reflectancia para una onda que incide normalmente en una superred de 15 capas. Las regiones sombreadas corresponden a las bandas prohibidas y las ondas incidentes con frecuencias en estos intervalos son totalmente reflejadas. El origen de esta banda prohibida se encuentra en la interferencia de los haces reflejados por todas las interfaces, los cuales se combinan constructivamente a la entrada

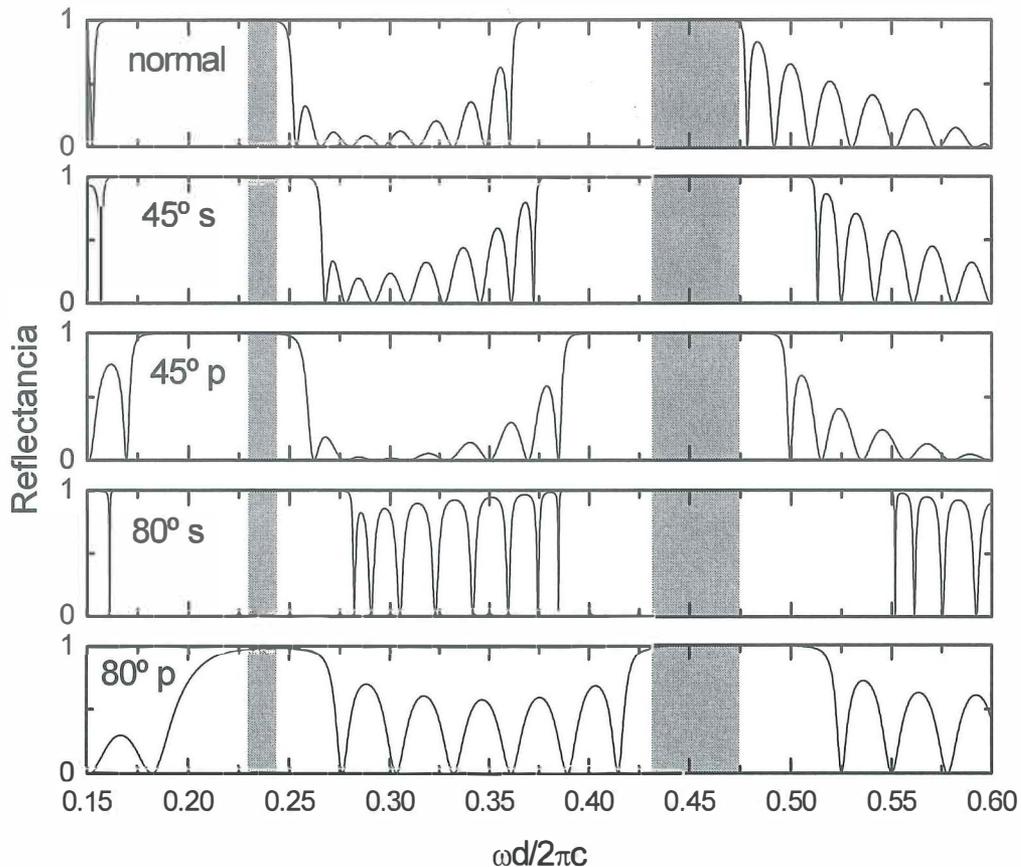


Figura 8. Reflectancia para distintos ángulos de incidencia para polarización s y polarización p. La región sombreada representa reflexión omnidireccional.

(interfaz con el medio incidente) de la multicapa. La extensión de esta región depende del contraste dieléctrico, es decir del cociente de los índices de refracción de los materiales empleados así como del número de capas (Macleod, 1986). Notamos que en las bandas prohibidas superiores la reflectancia es menor a 1, y al tratarse de materiales dieléctricos en los que se ha despreciado la absorción entonces la transmisión debe ser distinta de cero. Esto a primera vista está en contradicción con el hecho de que se trata de una banda prohibida; sin embargo, recordemos que la estructura de bandas corresponde a un sistema

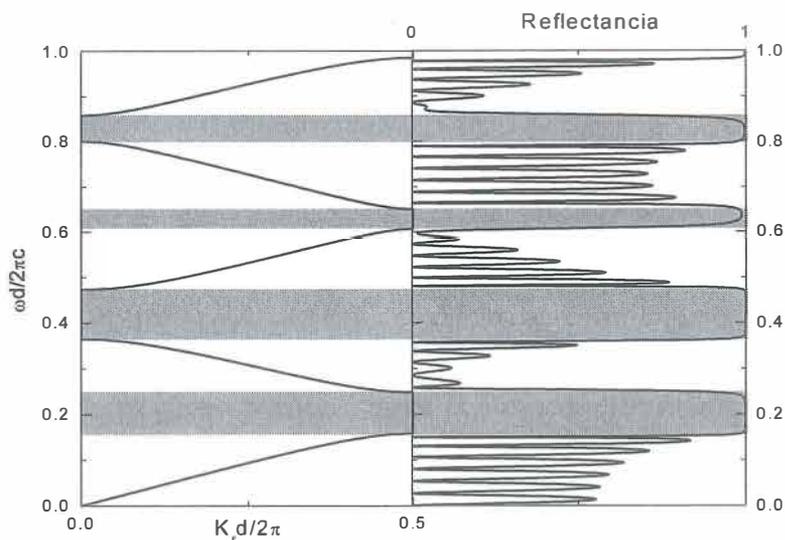


Figura 9. Relación entre la estructura de bandas de una superred infinita y la reflectancia de un sistema finito. Los parámetros son los mismos de la figura 7.

infinito, en tanto que la transmisión se calcula para sistemas de determinada longitud. Aumentando el número de capas obtenemos una mejor delimitación de las bandas.

Hasta aquí hemos empleado el método de la matriz de transferencia para describir la propagación de ondas electromagnéticas en superredes dieléctricas. Cuando consideramos arreglos periódicos obtenemos una *estructura de bandas* de la cual podemos inferir algunas propiedades de los espectros de reflexión y transmisión correspondientes a sistemas finitos. En la siguiente sección se examinan superredes en las que uno de los componentes es un metal, y las diferencias respecto del caso dieléctrico.

## II.2.4 Estructuras con componentes metálicas. El modelo de Drude.

Hace tiempo existe la propuesta de estructuras metal-dieléctricas de periodicidad unidimensional como dispositivos útiles para incrementar la reflectividad respecto al caso homogéneo (Scalora et al, 1998). Los resultados teóricos muestran que la reflectividad de 96% para aluminio homogéneo aumenta hasta el valor de 98% en una multicapa. Por lo tanto, podría ser posible obtener un arreglo de capas metálicas cuyo resultado sea obtener mejores espejos. Sin embargo, se ha demostrado (Scalora et al, 1998; Bloemer y Scalora, 1998) que también es posible hacer que los metales se vuelvan transparentes a la luz visible y opacos para el resto del espectro hasta el UV, aún si el contenido total metálico es varias veces la longitud de penetración, o centenas de nanómetros de grosor. Este fenómeno se relaciona con el tunelamiento resonante de ondas electromagnéticas a través de una superred que puede contener capas metálicas relativamente gruesas (30-50nm). Con un espaciado apropiado de las capas metálicas es posible obtener una estructura de bandas fotónicas. Es característica de las estructuras metálico-dieléctricas la existencia de una banda prohibida muy ancha en la región de bajas frecuencias cuya extensión abarca hasta el límite estático, lo cual implica alta reflectancia. Esta alta reflectividad de la multicapa a bajas frecuencias se debe a las propiedades dispersivas del metal las cuales pueden describirse por el modelo de Drude. Entre las propuestas de aplicación para estos dispositivos se encuentran sensores, películas para boquear el UV, electrodos transparentes y pantallas conductoras.

En un medio conductor no todos los electrones están ligados a los átomos; algunos electrones pueden moverse libremente de manera similar a las partículas de un gas en tanto los núcleos atómicos se encuentran en reposo (Aschroft, 1976), y se les denomina electrones libres. En ausencia de un campo electromagnético los electrones libres siguen trayectorias aleatorias, por lo que no existe un flujo neto de corriente. Bajo la acción de un campo eléctrico los electrones siguen un movimiento más ordenado, dando origen a un flujo neto de corriente. La ecuación de movimiento para un electrón en un campo eléctrico  $\mathbf{E}$  es (Wooten, 1972):

$$m\ddot{\mathbf{r}} + m\gamma\dot{\mathbf{r}} = -e\mathbf{E} \quad (29)$$

en donde  $m$  es la masa del electrón y  $\gamma$  es una constante asociada con un amortiguamiento viscoso. En ausencia del campo  $\mathbf{E}$  un electrón que se mueve con velocidad  $v_0$  se frena de forma exponencial con un tiempo de decaimiento  $\tau = \gamma^{-1}$ , típicamente del orden de  $10^{-14}$  s (Born y Wolf, 1999). Calculando  $\mathbf{r}$  en presencia de un campo armónico  $\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 e^{-i\omega t}$  y suponiendo que la densidad de corriente  $\mathbf{j}$  es  $\mathbf{j} = Ne\dot{\mathbf{r}} = \sigma\mathbf{E}$ , donde  $N$  es el número de electrones por unidad de volumen, obtenemos:

$$\sigma = \frac{Ne^2}{m(\gamma - i\omega)} \quad (30)$$

Introduciendo el resultado anterior en las ecuaciones de Maxwell obtenemos la ecuación de Helmholtz:

$$(\nabla^2 + \hat{k}^2)\mathbf{E} = 0 \quad (31)$$

con:

$$\hat{k}^2 = \frac{\omega^2 \mu}{c^2} \left( \varepsilon + i \frac{4\pi\sigma}{\omega} \right) = \frac{\omega^2 \mu \hat{\varepsilon}}{c^2} \quad (32)$$

En la ecuación anterior identificamos la función dieléctrica compleja:

$$\hat{\varepsilon} = \varepsilon + i \frac{4\pi\sigma}{\omega} \quad (33)$$

De las ecuaciones (30) y (33) escribimos:

$$\hat{\varepsilon} = \varepsilon + i \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\gamma)} \quad (34)$$

en donde  $\omega_p^2 = \frac{4\pi N e^2}{m}$  es la frecuencia de plasma del gas de electrones. En la figura 10 se muestran las partes real ( $\varepsilon_r$ ) e imaginaria ( $\varepsilon_i$ ) de la función dieléctrica para los valores  $\omega_p = 8.3215 \times 10^{15} \text{ s}^{-1}$  y  $\gamma = 3.0386 \times 10^{13} \text{ s}^{-1}$  (aprox. 5.5 eV y 0.02 eV, respectivamente).

Con este resultado y la ecuación (32) tenemos que las ecuaciones (27) y (28) adquieren la forma general:

$$\cos(Kd) = f_1(\omega) + i f_2(\omega) \quad (35)$$

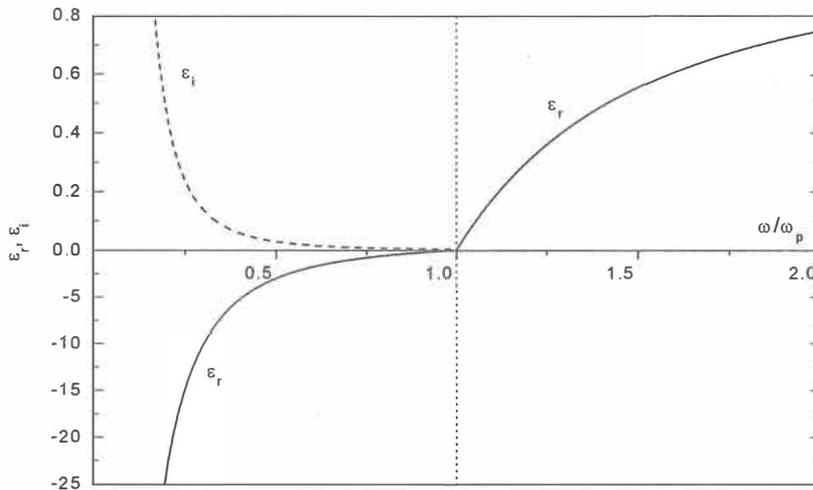


Figura 10. Dependencia espectral de  $\varepsilon_r$  y  $\varepsilon_i$  para un metal tipo Drude.

lo cual implica que  $K$  debe ser complejo,  $K = K_R + i K_I$ , con lo que escribimos:

$$\cos(K_R d + i K_I d) = f_1(\omega) + i f_2(\omega) \quad (36)$$

y por tanto todas las soluciones tienen una parte propagante y otra evanescente. En otras palabras, la presencia de absorción en las capas significa que no es posible obtener una estructura en donde el vector de Bloch sea imaginario puro en la región correspondiente a una banda prohibida y real en las bandas permitidas. En este sentido, se puede decir que desaparece la estructura de bandas, resultado que concuerda con estudios previos en el dominio de frecuencia compleja y vector de propagación real (Tip et al, 2000; Van der Lem et al, 2003). En general, la relación de dispersión para una onda electromagnética que se propaga en un medio (periódico o no), se puede escribir como (Krokhin y Halevi, 1996):

$$f(\omega, \mathbf{k}) = 0 \quad (37)$$

en donde la función  $f$  depende de las propiedades dieléctricas del medio y  $\mathbf{k}$  es el vector de propagación. En un medio no disipativo una onda propagante se caracteriza por una frecuencia real  $\omega$  que es solución de la ecuación anterior:

$$\omega = \omega(\mathbf{k}) \quad (38)$$

En un medio periódico la ecuación (38) corresponde a la estructura de bandas con regiones prohibidas y permitidas a la propagación, y  $\mathbf{k}$  corresponde al vector de Bloch. Para una dirección de propagación  $v = \mathbf{k}/k$  esta ecuación se puede resolver con respecto al vector de onda  $k$ . Si  $\omega$  pertenece a una banda permitida la solución es real y obtenemos un punto  $\mathbf{k} = (v, k_n)$  dentro de la zona de Brillouin:

$$k_n = k_n(\omega, v) \quad (39)$$

Para una dirección fija  $v$  el conjunto de puntos  $(v, k_n)$  en la ecuación (39) se reduce a la expresión:

$$k = k_n(\omega) \quad (40)$$

Dentro de una banda prohibida la solución (39) es compleja y la onda electromagnética no se puede propagar en el cristal infinito. Cuando existe absorción debido a que la parte imaginaria de la constante dieléctrica es distinta de cero las soluciones a la ecuación (37) son complejas, y se pueden escribir de la forma (10), que representa

amortiguamiento temporal con  $\omega = \omega_r + i\omega_i$  y  $\mathbf{k}$  real, o también se pueden escribir de la forma (40) que representa amortiguamiento espacial con  $\mathbf{k} = \mathbf{k}_r + i\mathbf{k}_i$  y  $\omega$  real. En la presencia de absorción,  $k_i \neq 0$  aún si  $\omega_r$  corresponde a un valor en una banda prohibida. Esto se deduce también de las ecuaciones (35) y (36).

### III. Resultados y discusión

#### III.1 Estructura de bandas

Las soluciones a la ecuación (35) nos permiten obtener una estructura de bandas para la superred unidimensional tanto para el caso de materiales puramente dieléctricos como para arreglos con capas metálicas. En la figura 11 presentamos la estructura de bandas en la zona reducida para un sistema en donde los materiales son dieléctricos no absorbentes con  $n_1 = 2.35$  (ZnS),  $n_2 = 1$ ,  $a = 10$  nm,  $b = 90$  nm.

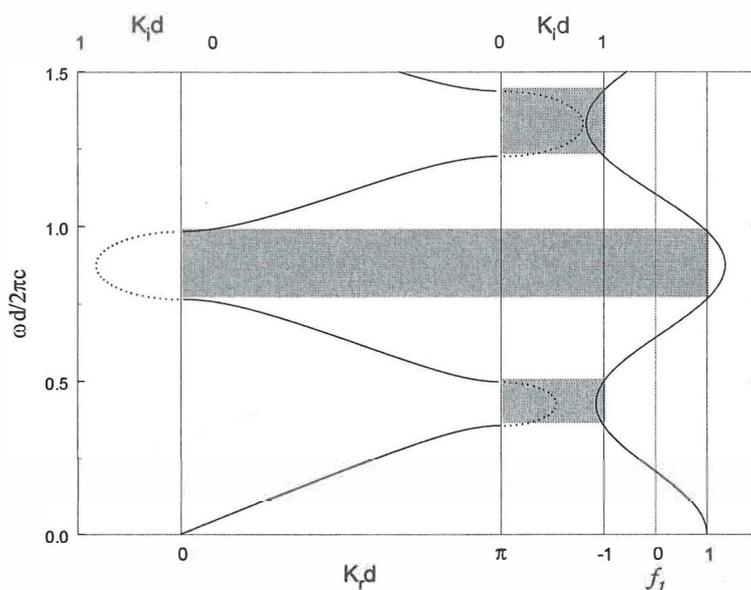


Figura 11. Estructura de bandas para una multicapa dieléctrica con  $n_1 = 2.35$ ,  $n_2 = 1$ ,  $a = 10$  nm,  $b = 90$  nm.

En esta estructura de bandas notamos que la parte real del vector de Bloch varía monótonamente desde cero a  $\pi$ , este último valor para  $\omega d / 2\pi c = 0.36$ , formando la

primera banda permitida. Las bandas prohibidas está definida por los valores de frecuencia para los cuales  $|f_1| \leq 1$ , correspondientes a las regiones sombreadas. En la primera banda prohibida  $K_d d$  mantiene el valor de  $\pi$  en tanto que la parte imaginaria del vector  $K_d d$  aumenta hasta un valor máximo (0.54 en  $\omega d / 2\pi c = 0.43$ ) y luego disminuye hasta cero (a una frecuencia normalizada de 0.5). El comportamiento en las siguientes bandas es similar, variando la parte real en la banda permitida en tanto la parte imaginaria es cero, y variando la parte imaginaria en la banda prohibida mientras el valor de la parte real permanece constante e igual a 0 ó  $\pi$ .

Cuando uno de los componentes de la superred es metal, podemos distinguir dos situaciones: con o sin absorción metálica. Por supuesto, sin absorción es sólo una aproximación para la realización de cálculos teóricos pues en la realidad siempre hay efectos de absorción. En la figura 12 se muestra la estructura de bandas para un sistema similar al de la figura 11, aunque el índice  $n_1$  es una función dependiente de la frecuencia de acuerdo a la ecuación (34), con los valores de  $\omega_p = 15.1925 \times 10^{15} \text{ s}^{-1}$  y  $\gamma = 0$ . Con este modelo la primera banda de la estructura es una banda prohibida, en contraste con el caso dieléctrico donde la primera banda es permitida. A partir de la primera banda permitida el comportamiento es similar al caso dieléctrico. Las bandas prohibidas siguen determinadas por la función  $f_1$ , pues con  $\gamma = 0$  en la ecuación (35) tenemos  $f_2 = 0$ .

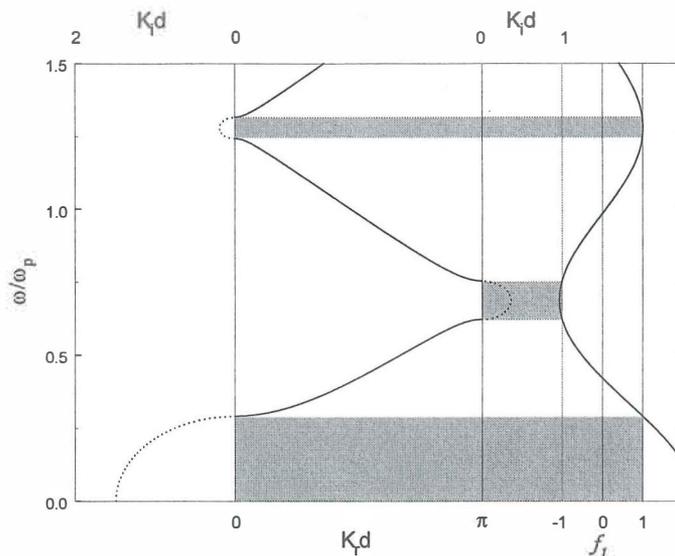


Figura 12. Estructura de bandas cuando la absorción metálica es cero.

La figura 13 corresponde a la estructura de bandas para  $\gamma = 0.01\omega_p$ , que puede considerarse un valor típico para el amortiguamiento metálico (Kuzmiak y Maradudin, 1997). En la región correspondiente a la primera banda prohibida observamos que la parte real de  $Kd$  exhibe un comportamiento inusual: parte de cero y aumenta hasta llegar a un punto en el cual empieza a decrecer, sin volver a cero, y cerca de la frecuencia que define la primera banda prohibida vuelve a crecer para unirse a la curva correspondiente en la primera banda permitida hasta llegar al valor de  $\pi$ , en donde aparentemente permanece constante en la segunda banda prohibida y mostrando un efecto de borde en el límite superior de esta banda. En cuanto a la parte imaginaria del vector de onda, en la primera banda prohibida se tiene que la curva se deforma penetrando en la región correspondiente a la primera banda permitida, en tanto que para las siguientes bandas los cambios son insignificantes. Vemos entonces que el efecto del amortiguamiento metálico es introducir

componentes reales del vector de onda en la banda prohibida y componentes imaginarias en la banda permitida, desapareciendo así el concepto mismo de bandas. Ahora las regiones donde  $|f_1| > 1$  ya no representan bandas prohibidas.

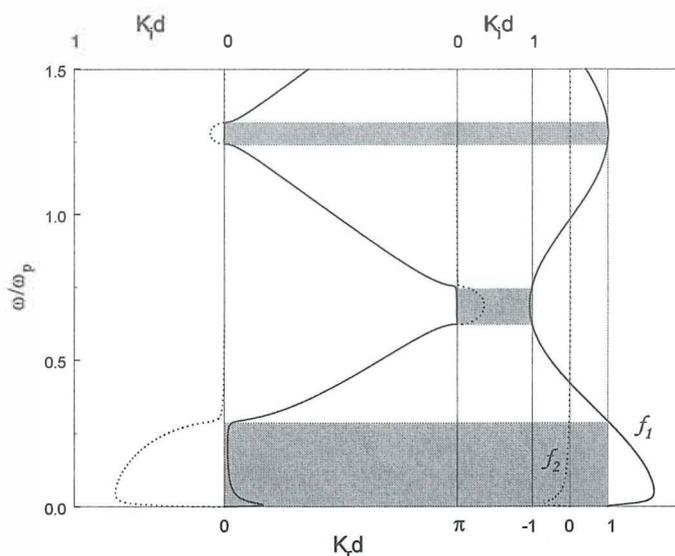


Figura 13. Estructura de bandas con  $\gamma = 0.01\omega_p$ .

En presencia de disipación la función  $f_2$  es distinta de cero cerca de  $\omega/\omega_p = 0$  y después decrece rápidamente para acercarse a 0, en tanto que  $f_1$  parte del valor 1 y crece hasta superponerse a la curva para el caso sin disipación. El efecto sobre la estructura de bandas se aprecia en la región cercana a  $\omega/\omega_p = 0$ . Para el resto del intervalo de frecuencias consideradas la función  $f_2$  es muy pequeña, por lo que esperamos que se asemeje a la estructura original sin disipación.

Mencionamos que en la segunda banda prohibida la parte real del vector de Bloch aparentemente permanece constante, con excepción de la región cercana al límite superior

de la banda. Examinando más de cerca la figura 13 encontramos que en realidad el vector  $K_r d$  toma el valor  $\pi$  en un solo punto ubicado en  $\omega/\omega_p = 0.622$  para después alejarse de este borde. Este punto corresponde al límite inferior de la banda prohibida en cuestión, como se muestra en la figura 14. En cuanto a la parte imaginaria, observamos que  $K_i d$  es cero en el punto mencionado y distinto de cero en cualquier otra parte, de forma semejante a la parte real.

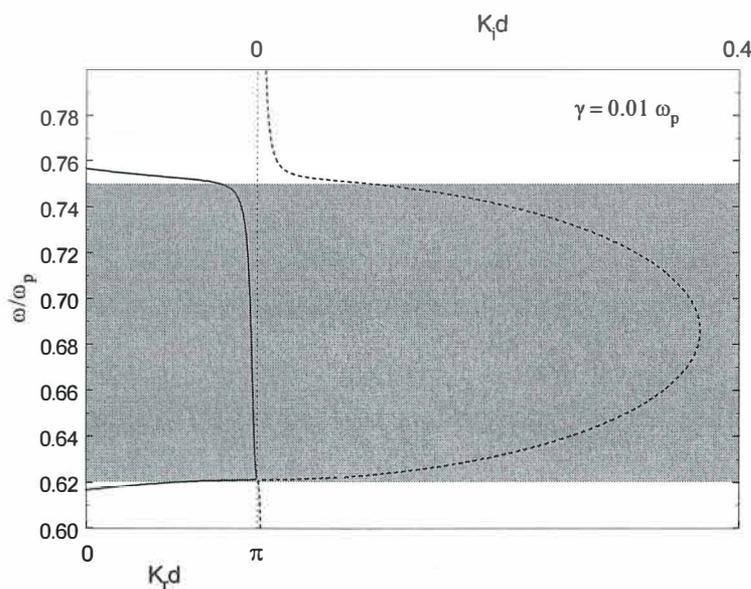


Figura 14. Con  $\gamma = 0$  no existe estructura de bandas.

El efecto descrito anteriormente se ve más claramente en la figura 15, en donde se emplean distintos valores de  $\gamma$ , aunque algunos pueden no ser realistas, como  $0.3 \omega_p$  y  $0.5 \omega_p$ . Sin embargo, realizamos los cálculos con estos valores para observar el comportamiento de la estructura de bandas en función de este parámetro. Vemos que conforme aumenta el amortiguamiento metálico la estructura de bandas desaparece y la

parte imaginaria del vector de onda es cada vez menor, lo que significa que la atenuación disminuye y la onda viaja una mayor distancia. De esta forma, con mayor absorción metálica nos acercamos a la estructura que describe una onda propagante.

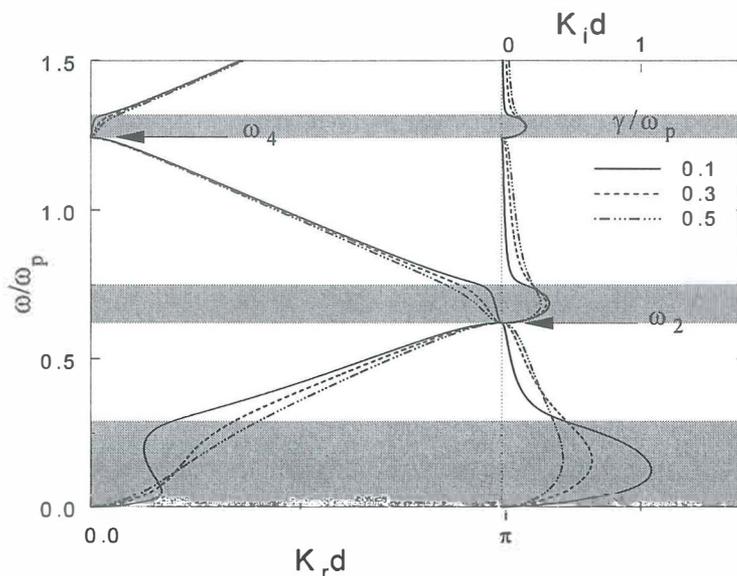


Figura 15. Estructura de bandas para distintos valores de  $\gamma$ .

De acuerdo al modelo de Drude, si el amortiguamiento metálico aumenta entonces la movilidad de los electrones en el metal es menor, con lo que se reduce su contribución a las propiedades ópticas del metal (Harris, 1997). Dicho de otra manera, el metal tiende a ser un dieléctrico conforme  $\gamma$  aumenta. En un caso límite que la movilidad de los electrones sea cero (esto es,  $\gamma \rightarrow \infty$ ) entonces, de acuerdo a la ecuación (34), el coeficiente de refracción es 1, correspondiente al aire. Vemos entonces que el comportamiento inusual en la figura 15 significa que la estructura de bandas tiende a la estructura correspondiente a la propagación en aire, como se muestra en la figura 16.

Las frecuencias  $\omega_2$  y  $\omega_4$ , en las figuras 15 y 16, donde coinciden las gráficas para

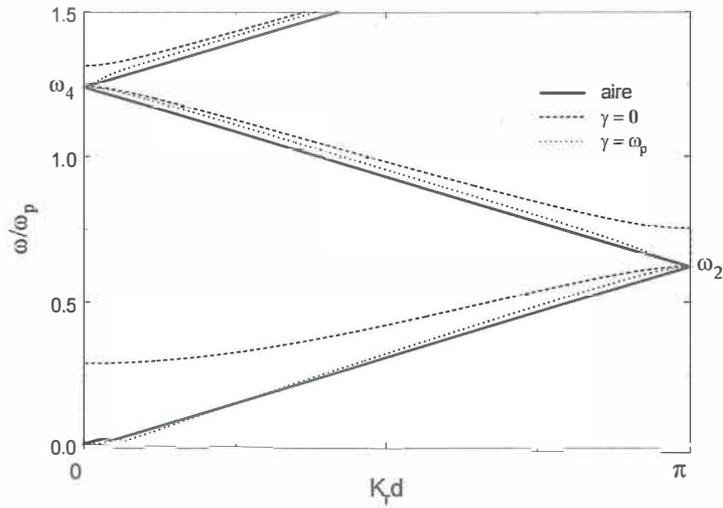


Figura 16. Estructura de bandas para  $\gamma = 0$  y  $\gamma = \omega_p$  comparadas con la de propagación en aire.

distintos valores de  $\gamma$  están determinadas por los ceros de la función  $f_2$ . A estas frecuencias la función  $f_1$  toma los valores -1 y 1, respectivamente, como se observa en la figuras 17 y 18. Cuando  $f_2=0$  el vector de Bloch es real, describiendo una onda que viaja sin atenuación, por lo que en estos puntos la transmisión en un sistema finito es máxima.

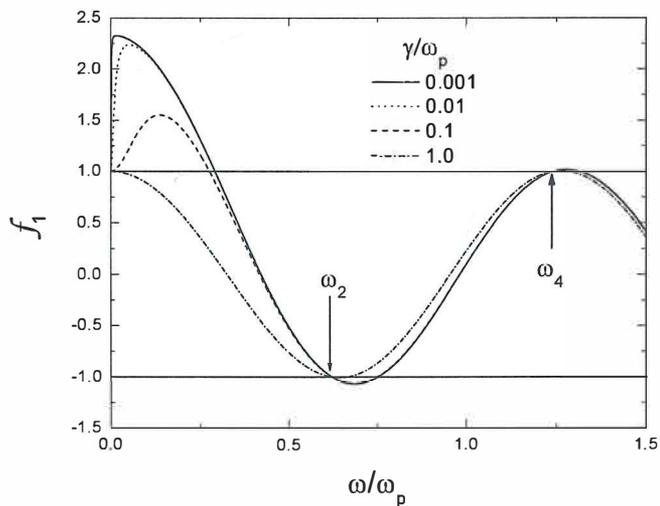


Figura 17. Estructura de la función  $f_1$  con la frecuencia.

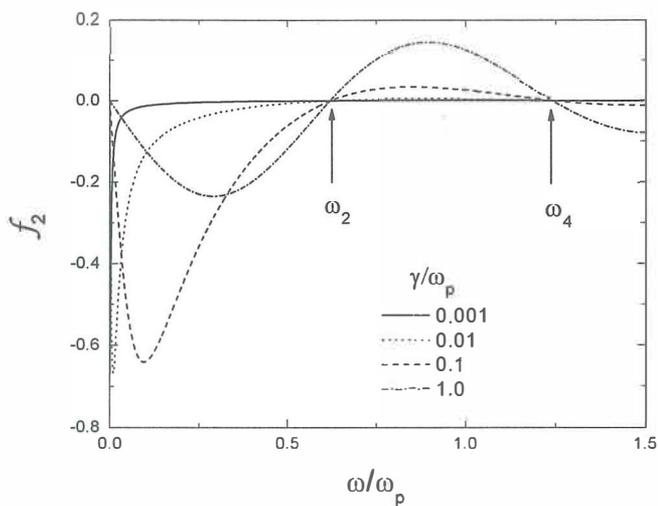


Figura 18. Estructura de la función  $f_2$  con la frecuencia.

Ahora bien, si al aumentar el factor de amortiguamiento el sistema tiende al caso dieléctrico, entonces este efecto debe manifestarse en un aumento en la transmitancia. En la figura 19 se muestran algunos espectros de transmisión para una superred de 11 celdas con  $a=10 \text{ nm}$  y  $b=90 \text{ nm}$ , y se compara con la estructura de bandas.

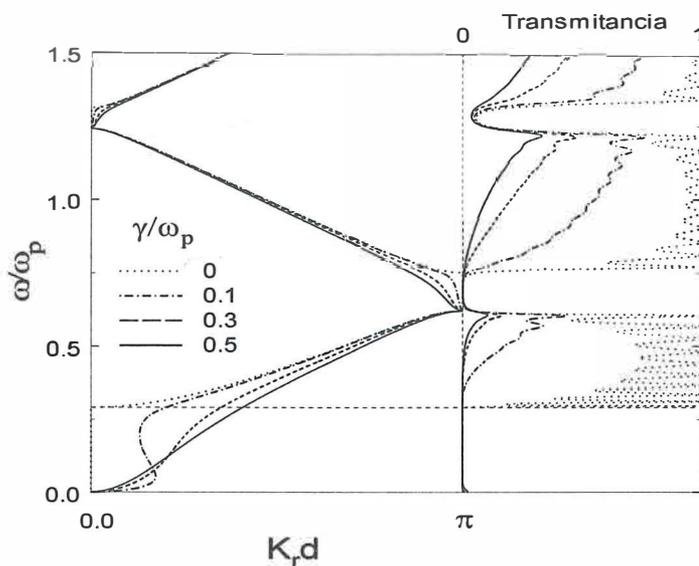


Figura 19. Estructura de bandas y transmisión para algunos valores de  $\gamma$ .

Podemos observar que las curvas de transmisión coinciden con la estructura de bandas. La transmisión que se observa en la tercera banda prohibida se debe a que las curvas corresponden a un sistema finito. Vemos que al aumentar el amortiguamiento metálico el borde superior de la primera banda prohibida se recorre a frecuencias dentro de la primera banda permitida, creando un ensanchamiento de la banda prohibida. Por otra parte, los espectros de transmisión no son simétricos respecto al centro de la banda permitida correspondiente, lo que revela la existencia de componentes imaginarias en el vector de propagación; es decir, absorción. En la figura 20 tenemos la absorción, calculada como  $A=1-R-T$ , para tres valores del amortiguamiento metálico. Notamos que para la frecuencia  $\omega/\omega_p = 0.621$ , correspondiente al borde inferior de la segunda banda prohibida, la absorción disminuye en todos los casos, en concordancia con la figura 15, en donde a esta frecuencia el valor de  $K_i d$  es cero.

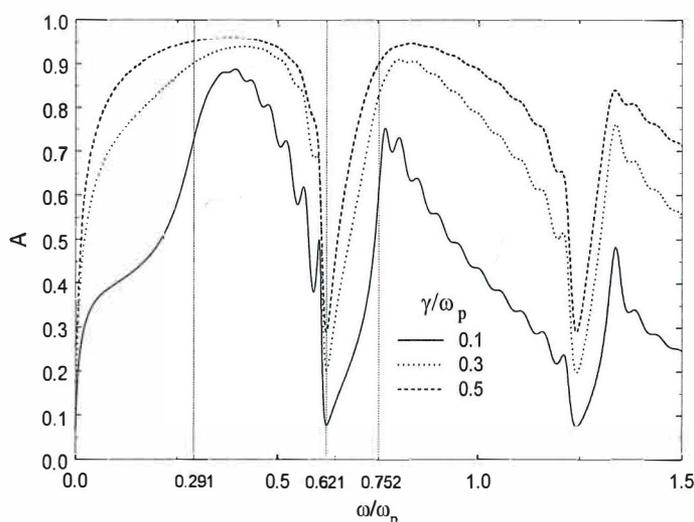


Figura 20. Absorción para algunos valores de  $\gamma$ .

Vemos, además, que en la primera banda prohibida la absorción es grande y aumenta para los valores de  $\gamma$  considerados. Esto explica por qué aún cuando en la figura 15 se predice transmisión en la primera banda, en la figura 19 no se aprecia dicha transmisión. Sin embargo, en una escala más apropiada se vuelve evidente, como se muestra en la figura 21.

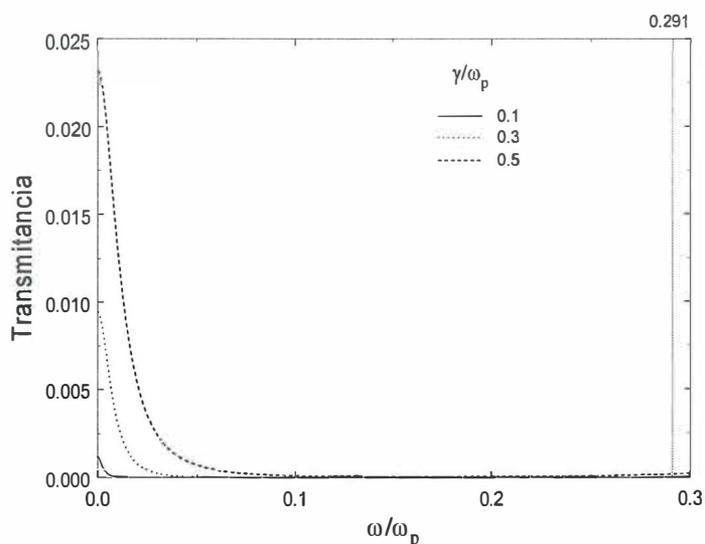


Figura 21. Transmancia para los mismos valores de  $\gamma$  que en la figura 19.

En la figura 22 vemos que con amortiguamiento metálico muy grande la transmisión en la banda permitida aumenta de manera uniforme, sin presentar estructura alguna, hasta un valor máximo en el borde superior de esta banda, ubicado en  $\omega_2$  donde la componente imaginaria del vector de Bloch es cero. A esta frecuencia los campos eléctricos se localizan en el dieléctrico (Bloemer, 1998), en tanto que en el borde superior de la banda prohibida los campos se localizan en el metal, dando lugar a una mayor absorción. En el

límite  $\gamma \rightarrow \infty$ , el espectro de transmisión resultante es el de la propagación en aire, como se deduce de la figura 16.

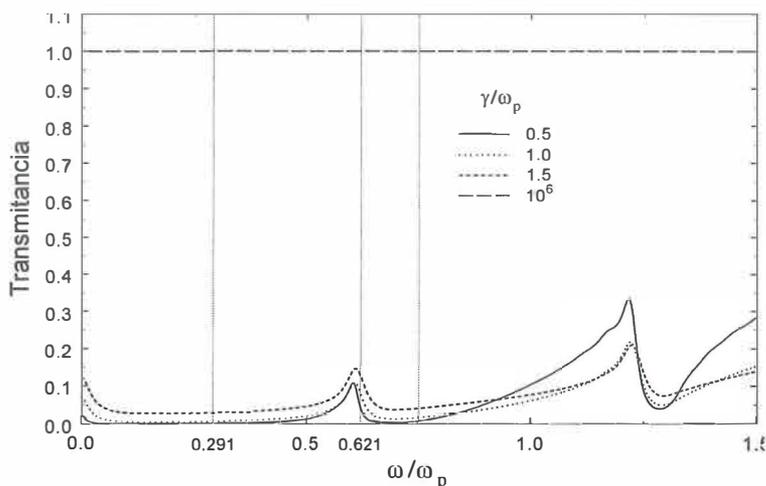


Figura 22. Transmancia para valores crecientes de  $\gamma$ .

Vemos entonces que las variaciones en el amortiguamiento metálico se reflejan en la estructura de bandas de la superred introduciendo componentes reales del vector de Bloch en las bandas prohibidas, con lo que existen estados de propagación en dichas bandas, y valores imaginarios en las bandas permitidas, lo que significa absorción. Debido a esto, las soluciones obtenidas solamente se pueden relacionar con la propagación en sistemas finitos. En el caso límite de absorción muy grande la estructura de bandas desaparece, dejando su lugar la relación de dispersión para una onda propagante en el aire. Este efecto se refleja en los espectros de transmisión, que exhiben estados de transmisión en las antes bandas prohibidas, y esta transmisión aumenta conforme aumenta el amortiguamiento metálico.

## III.2 El límite de bajas frecuencias

En el límite de bajas frecuencias podemos definir una constante dieléctrica para la superred como:

$$\varepsilon_{eff} = \varepsilon_a f_a + \varepsilon_b (1 - f_a) \quad (41)$$

en donde  $\varepsilon_a$  se obtiene de la ecuación (34) y  $f_a = a/d$  es la fracción de llenado de la superred. Es decir, la superred se sustituye por un medio homogéneo cuya función dieléctrica está dada por la ecuación (41). Con esta ecuación y la ec. (34), y considerando  $\varepsilon_b = 1$ :

$$\varepsilon_{eff} = 1 - \frac{\omega_p^2 f_a}{\omega(\omega + i\gamma)} \quad (42)$$

Tomando el límite  $\omega \rightarrow 0$  obtenemos:

$$\varepsilon_{eff} = -\frac{\omega_p^2}{\omega^2}, \quad \gamma = 0 \quad (43)$$

y

$$\varepsilon_{eff} = i \frac{\omega_p^2 f_a}{\gamma \omega}, \quad \gamma \neq 0 \quad (44)$$

Con las ecuaciones anteriores tenemos que el índice efectivo de refracción es:

$$n_{eff} = i \frac{\omega_p}{\omega} \sqrt{f_a}, \quad \gamma = 0 \quad (45)$$

y

$$n_{eff} = \omega_p \sqrt{\frac{f_a}{2\gamma\omega}} (1+i) \quad , \quad \gamma \neq 0 \quad (46)$$

La ec. (46) muestra que tanto la componente real como la componente imaginaria del índice efectivo aumentan significativamente en el límite  $\gamma\omega \rightarrow 0$ .

De las ecuaciones (45) y (46) obtenemos el vector de onda efectivo  $k_{eff} = \frac{\omega}{c} n_{eff}$ :

$$k_{eff} = i \frac{\omega_p}{c} \sqrt{f_a} \quad , \quad \gamma = 0 \quad (47)$$

y

$$k_{eff} = \frac{\omega_p}{c} \sqrt{\frac{f_a\omega}{2\gamma}} (1+i) \quad , \quad \gamma \neq 0 \quad (48)$$

En ausencia de absorción el vector de onda es imaginario y dependiente de la frecuencia (ecuación (47)). Debido a esta independencia la curva de dispersión toca perpendicularmente a la abscisa, como se aprecia en la figura 12. Por otra parte, la absorción causa que tanto la parte real como la parte imaginaria de  $k_{eff}$  tiendan a cero conforme lo hace la frecuencia. Por tanto, los campos pueden penetrar en el medio efectivo pero decaen exponencialmente. Esto significa que los campos pueden atravesar un sistema de grosor finito si la distancia de decaimiento de los campos  $d_d = 1/\text{Im}(k_{eff})$  es del orden del grosor  $D$  de la muestra. La figura 23 muestra que  $d_d$  adquiere valores significativos a

bajas frecuencias. Con  $\gamma/\omega_p=0.1$   $d_d$  es del orden de 800 nm para la frecuencia normalizada  $\omega/\omega_p=0.001$ . Con esto, si la muestra es de 800 nm las ondas pueden atravesar la superred y, por lo tanto, existe transmisión.

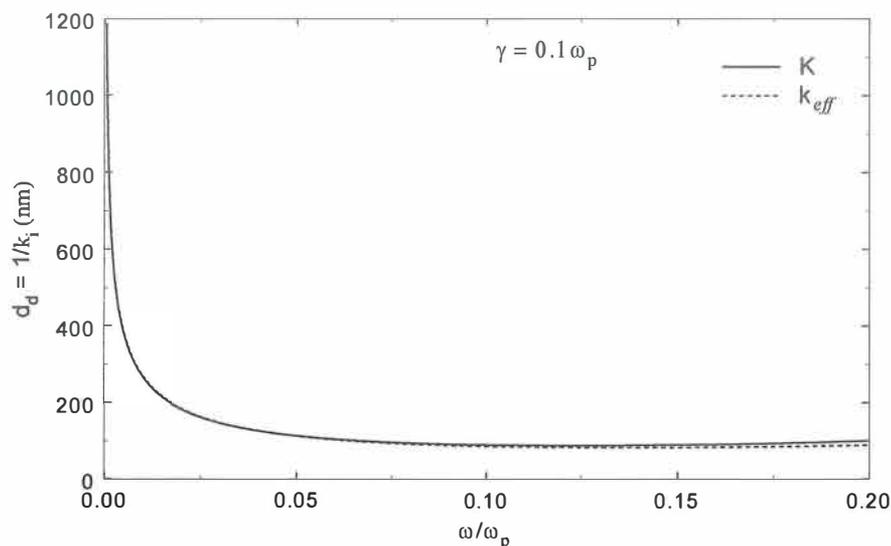


Figura 23. Distancia de decaimiento como función de la frecuencia. En el límite de bajas frecuencias las ondas pueden atravesar una muestra de 1100 nm.

### III.3 Superredes desordenadas

La existencia de una estructura de bandas para la propagación de la luz en un medio es una consecuencia directa de la suposición de que el sistema es perfectamente periódico y, por tanto, representa un caso ideal. En la práctica los procesos de fabricación generan desviaciones o errores en los parámetros establecidos que pueden afectar las propiedades de la superred por lo que es importante conocer la respuesta de sistema ante tales desviaciones.

Para nuestro sistema metal-dieléctrico estudiamos el efecto que sobre la transmisión ejerce un desorden aleatorio de las capas considerando diversas situaciones:

1. si la longitud total de la multicapa  $L$  permanece constante:
  - a) variamos la posición de las capas metálicas sin variar su espesor.
  - b) variamos el espesor de las capas metálicas sin variar su posición
  - c) variamos simultáneamente la posición y el espesor de las capas metálicas.

En todos los casos los cambios en las capas metálicas producen variaciones en el espesor de las capas dieléctricas.

2. Variamos independientemente el espesor de las capas metálicas y dieléctricas, permitiendo que aumente o disminuya la longitud total de la multicapa. En este caso, tenemos tres combinaciones
  - a) cambios en el espesor de las capas metálicas únicamente.
  - b) cambios en el espesor de las capas dieléctricas únicamente.
  - c) cambios en los espesores de todas las capas.

Las variaciones se introducen al multiplicar la posición o el espesor por un factor que depende del grado de desorden  $\delta$  que se desea introducir y de una variable aleatoria  $RND$ , la cual puede ser de dos clases: i)  $RND$  se extrae al azar de una distribución uniforme (es decir, equiprobable) en el intervalo  $[-0.5, 0.5]$ , y ii)  $RND$  pertenece a una distribución normal con media cero y variancia 1. Veremos que dependiendo del tipo de desorden la transmisión se ve afectada de manera diferente.

Cuando las capas metálicas cambian aleatoriamente de la posición  $x_j$  sin desorden a la

la posición  $x'_j$  (ver figura 24a) utilizamos la regla:

$$x'_j = x_j + \delta_p d RND. \quad (49)$$

donde  $\delta_p$  es el grado de desorden en la posición y  $d$  es la longitud de un periodo de la multicapa.

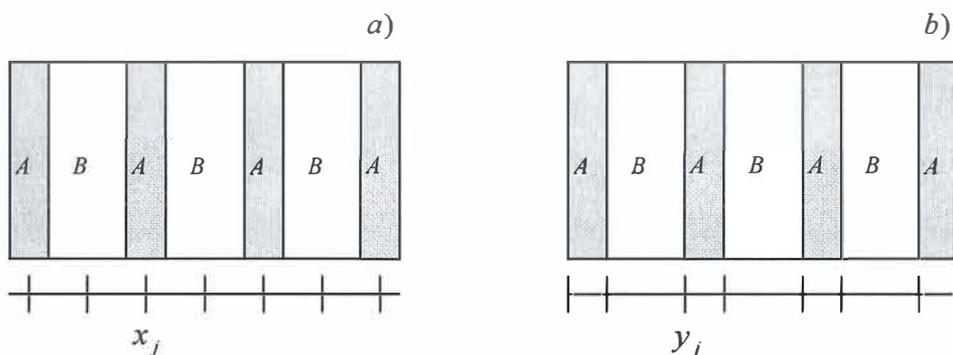


Figura 24. Esquema para la variación de: a) la posición de las capas metálicas, b) el espesor de las capas metálicas. En ambos casos la longitud total  $L$  permanece constante.

Para variar el grosor de las capas metálicas sin cambiar la posición de las mismas introducimos cambios en las posiciones  $y_j$  de las interfaces que definen la capa metálica de manera que las nuevas posiciones  $y'_j$  (ver figura 24b) están dadas por:

$$y'_j = y_j + \delta_g d RND \quad (50)$$

en donde  $\delta_g$  representa el grado de desorden en el espesor. En las ecuaciones (49) y (50) podemos seleccionar la variable  $RND$  de dos tipos: uniforme y normalmente distribuidas. Para el primer caso tenemos  $RND = rnd - 0.5$ , donde  $rnd$  es un número al azar en el intervalo  $[0,1]$  que se obtiene usando la función de números aleatorios (*random number*) incorporada en el compilador Compaq Visual Fortran V6.1. Para el segundo caso tomamos dos variables aleatorias uniformes  $rnd1$  y  $rnd2$  y por medio de las transformaciones:

$$\begin{aligned} X &= \sqrt{-2 \ln(rnd1)} \cos(2\pi rnd2) \\ Y &= \sqrt{-2 \ln(rnd1)} \sin(2\pi rnd2) \end{aligned} \quad (51)$$

obtenemos dos números aleatorios independientes que siguen una distribución normal con media cero y variancia unitaria. A la ecuación anterior se le conoce como Transformación de Box-Muller (Press et al, 1990; Ross, 1990).

### III.3.1 Transmisión en una multicapa desordenada

#### III.3.1.1 Multicapa de longitud total constante

A continuación presentamos resultados de la transmitancia promedio para un sistema metal-dieléctrico compuesto de 51 capas en donde se mantiene constante la longitud total de la multicapa; el promedio se obtiene usando 100 configuraciones aleatorias, eliminando así las resonancias asociadas con una distribución en particular, de

acuerdo con Bulgakov y Nieto-Vesperinas (1997). Las capas metálicas son tipo Drude con una frecuencia de plasma  $\omega_p$  correspondiente a 10eV y un factor de amortiguamiento  $\gamma = 0.001\omega_p$ . Las figuras 25 y 26 corresponden a desorden en la posición, y las figuras 27 y 28 a desorden en el espesor.

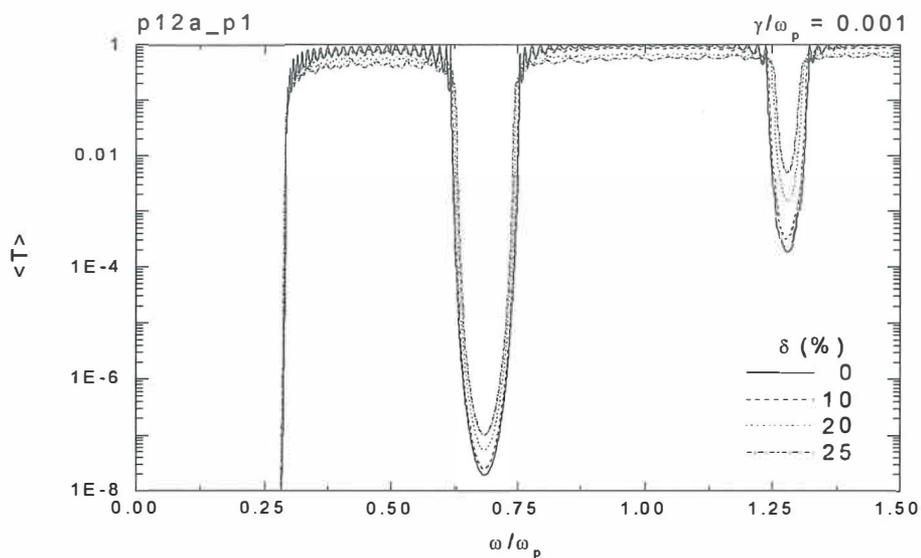


Figura 25. Variación de la transmisión con desorden uniforme en la posición de las capas metálicas.  $\gamma = 0.001\omega_p$ ,  $L = 5100$  nm,  $f_a = 0.1$  y  $d = 100$  nm.

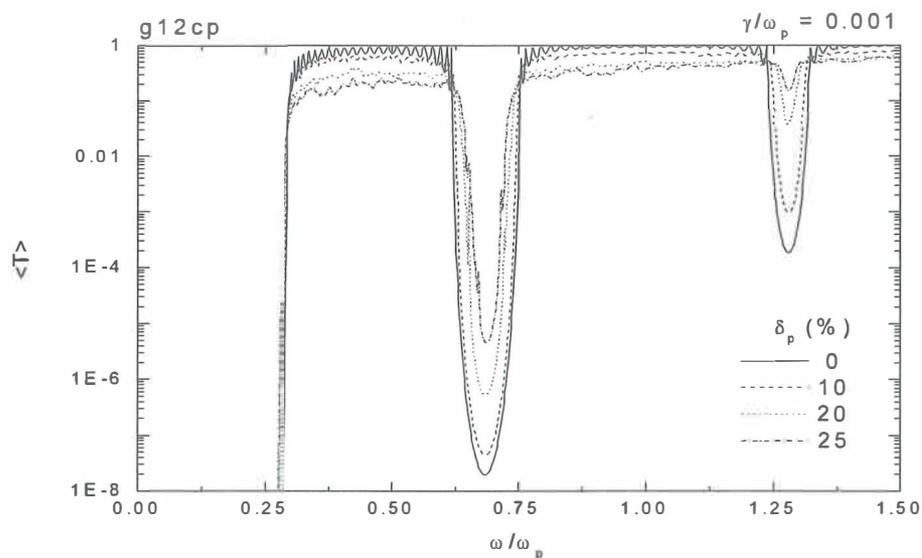


Figura 26. Variación de la transmisión con desorden gaussiano en la posición de las capas metálicas.  $\gamma = 0.001\omega$ ,  $L = 5100$  nm,  $f_a = 0.1$  y  $d = 100$  nm.

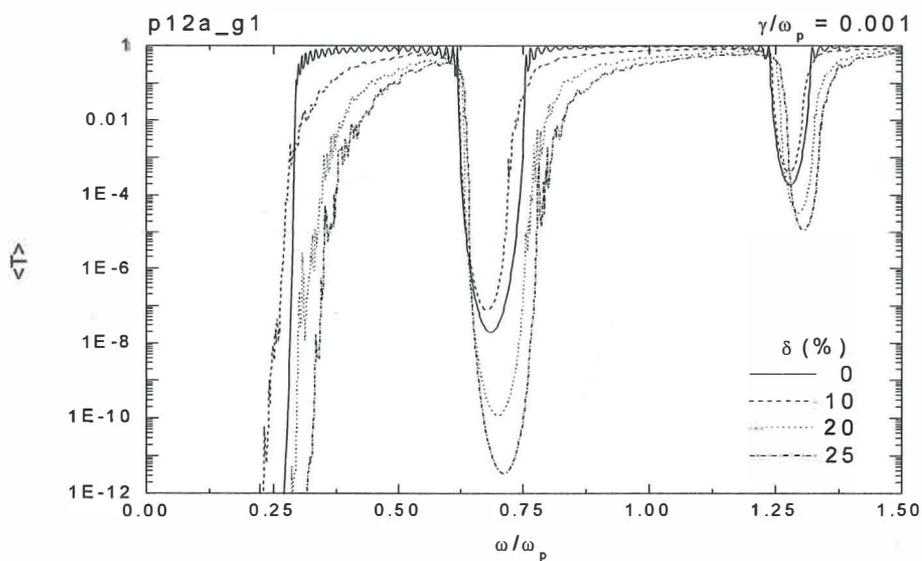


Figura 27. Variación de la transmisión con desorden uniforme en el espesor de las capas metálicas.  $\gamma = 0.001\omega_p$ ,  $L = 5100$  nm,  $f_a = 0.1$  y  $d = 100$  nm.

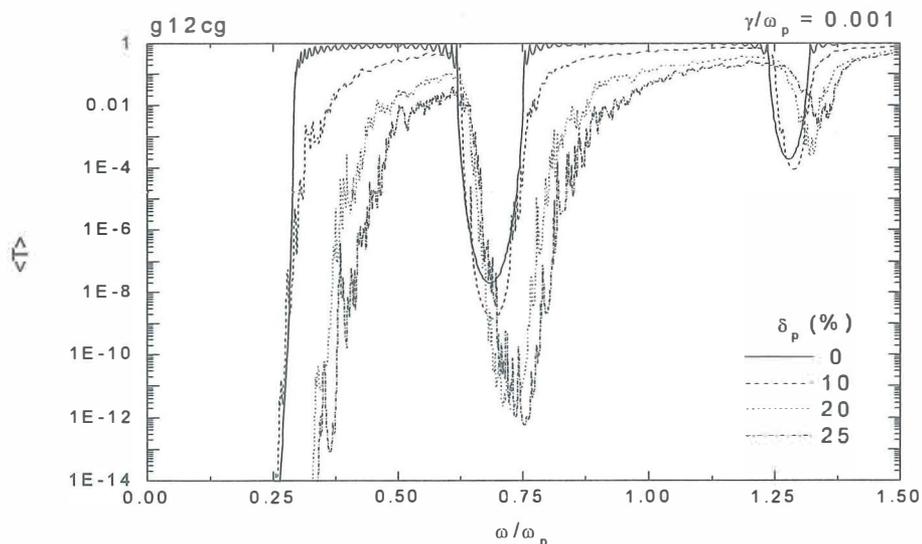


Figura 28. Variación de la transmisión con desorden gaussiano en el espesor de las capas metálicas.  $\gamma = 0.001\omega_p$ ,  $L = 5100 \text{ nm}$ ,  $f_a = 0.1$  y  $d = 100 \text{ nm}$ .

En las figuras 25 y 26 observamos que con variaciones en la posición de las capas metálicas el efecto del desorden es aumentar la transmisión en la banda prohibida, tanto para desorden uniforme como para desorden gaussiano, lo que está en concordancia con estudios previos con estructuras dieléctricas (Freilikher et al, 1995) donde se establece que este comportamiento es independiente del tipo de fluctuaciones que originan el desorden. Vemos, además, que el desorden gaussiano introduce cambios de dos a tres órdenes de magnitud mayores que el desorden uniforme. En ambos casos las bandas se estrechan y tienden a desaparecer con grados crecientes de desorden, desapareciendo primero las bandas prohibidas superiores, coincidiendo con resultados obtenidos para sistemas dieléctricos en una y dos dimensiones (ver Vlasov et al, 1999; Lidorikis et al, 2000; Sigalas et al, 1996). En cuanto al desorden en el espesor de las capas metálicas, en las figuras 27 y

28 notamos un comportamiento opuesto al de desorden en la posición: conforme aumenta el grado de desorden  $\delta_g$  la transmisión disminuye en alrededor de cuatro órdenes de magnitud y la banda prohibida no desaparece sino que experimenta un corrimiento hacia frecuencias más altas. Este comportamiento se relaciona con los cambios en la fracción de llenado (contenido metálico) en la multicapa por efectos del desorden. El corrimiento a frecuencias mayores indica un aumento en la cantidad de metal en la multicapa, como se muestra en la figura 29 para el caso periódico usando tres fracciones de llenado.

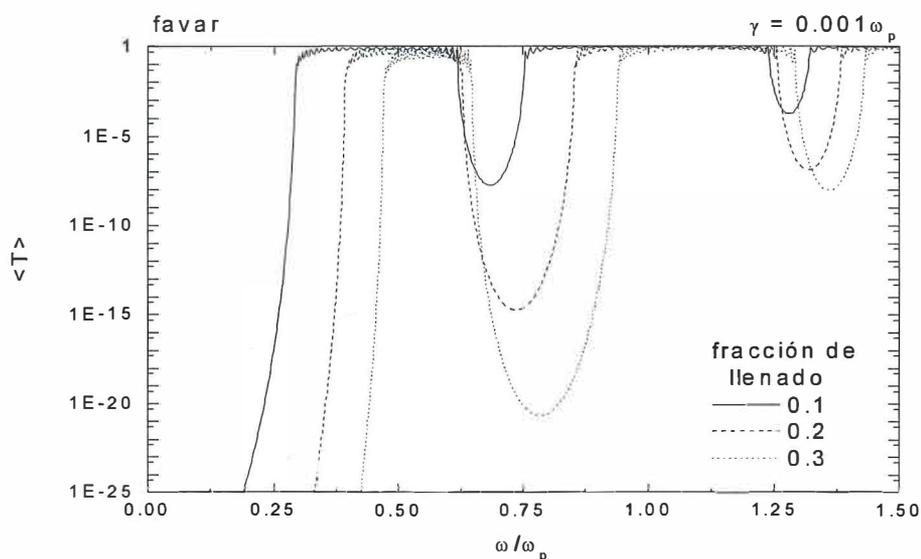


Figura 29. Transmisión con distintas fracciones de llenado  $f$  en una multicapa periódica ( $f=a/d$ ).  $d=100$  nm.

De las figuras 25-29 observamos que al mantener constante la longitud total de la multicapa las bandas tienden a desaparecer con desorden en la posición y a mantenerse, aunque deformadas, con desorden en el espesor, por lo que cabe preguntarnos qué comportamiento será dominante al considerar un desorden combinado en la posición y el espesor. En las figuras 30 y 31 tenemos la transmisión con desorden uniforme y gaussiano, respectivamente, donde hemos tomado el mismo valor del parámetro de desorden para las variaciones en la posición y en el espesor. Notamos que el efecto más importante se relaciona con variaciones en el espesor, siendo más pronunciado en el caso de desorden gaussiano.

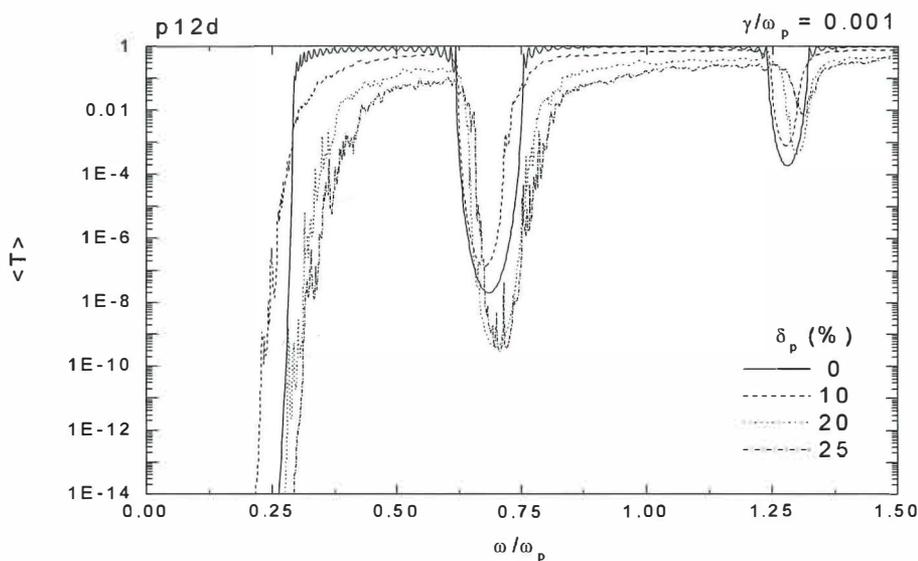


Figura 30. Variación de la transmisión con desorden uniforme en la posición y el espesor de las capas metálicas.  $\gamma = 0.001\omega_p$ .

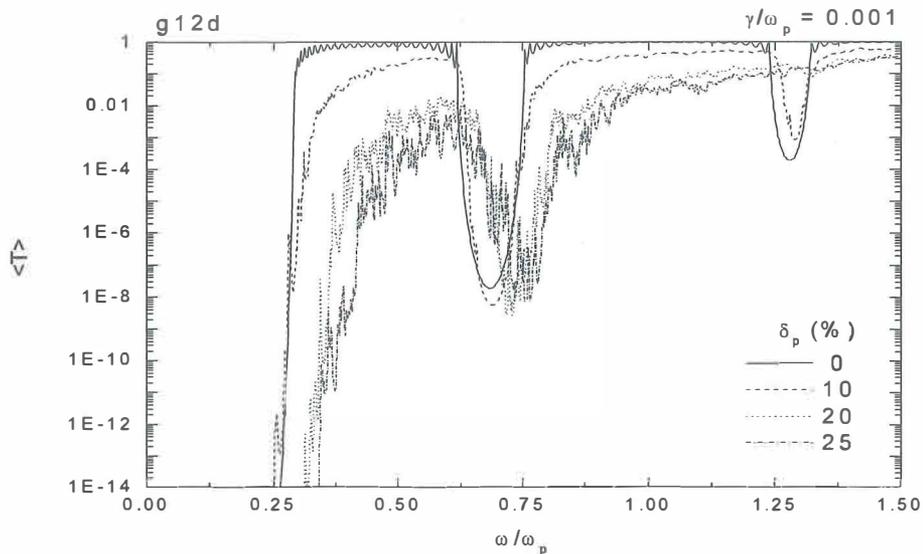


Figura 31. Variación de la transmisión con desorden gaussiano en la posición y el espesor de las capas metálicas.  $\gamma = 0.001\omega_p$

### III.3.1.2 Multicapa de longitud total variable

Ahora examinamos la transmisión cuando se introduce desorden en el espesor cada una de las capas del sistema, con lo que cambia la longitud total  $L$  de la multicapa. Los nuevos espesores  $d_l$  se obtienen aplicando la fórmula:

$$d'_j = d_j(1 + \delta RND) \quad (52)$$

en donde  $RND$  es una función aleatoria con distribución uniforme o gaussiana. Las figuras 32-33 corresponden a desorden en las capas metálicas solamente, las figuras 34 y 35 a desorden en las capas dieléctricas y las figuras 36 y 37 a desorden simultáneo de las capas metálicas y dieléctricas. En todos los casos el parámetro de desorden varía de 0 a 0.25.

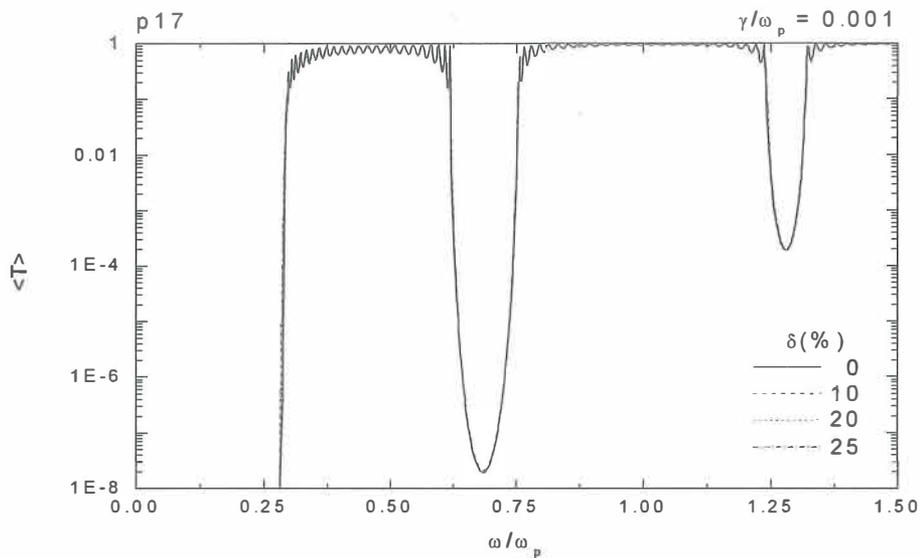


Figura 32. Variación de la transmisión con desorden uniforme en el espesor de las capas metálicas.  
 $\gamma = 0.001\omega_p$ .

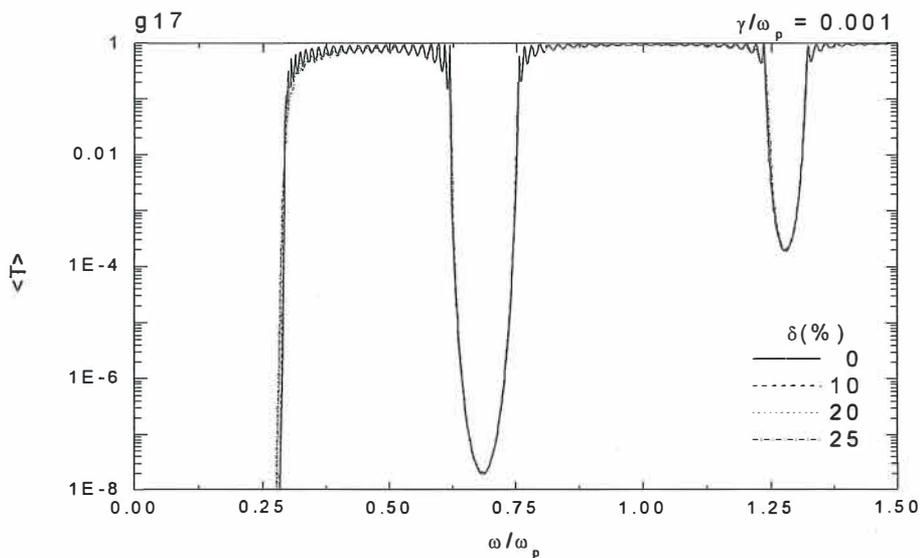


Figura 33. Variación de la transmisión con desorden gaussiano en el espesor de las capas metálicas.  
 $\gamma = 0.001\omega_p$ .

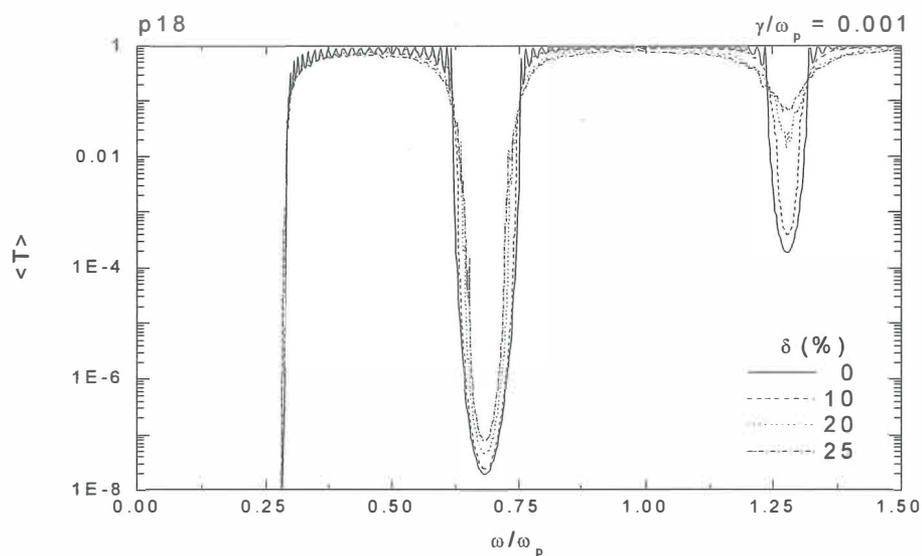


Figura 34. Variación de la transmisión con desorden uniforme en el espesor de las capas dieléctricas.  $\gamma = 0.001\omega_p$ .

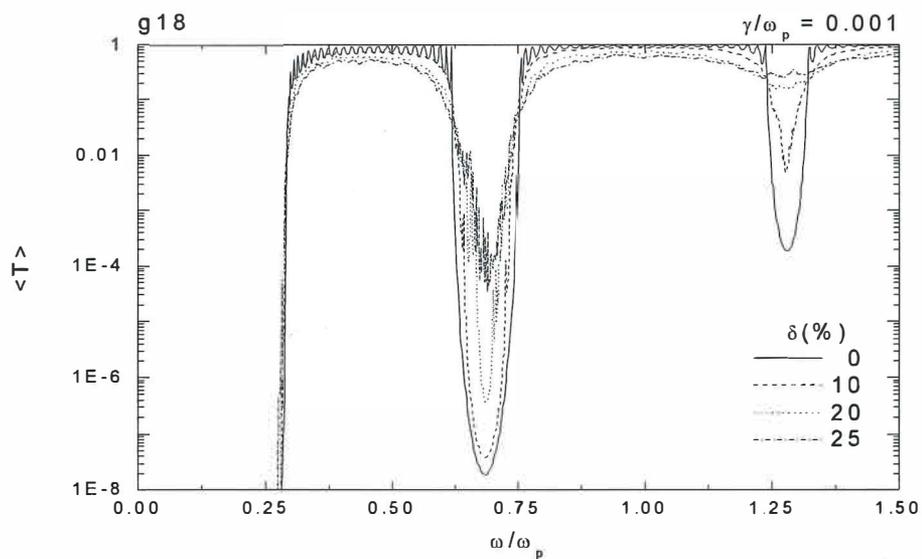


Figura 35. Variación de la transmisión con desorden gaussiano en el espesor de las capas dieléctricas.  $\gamma = 0.001\omega_p$ .

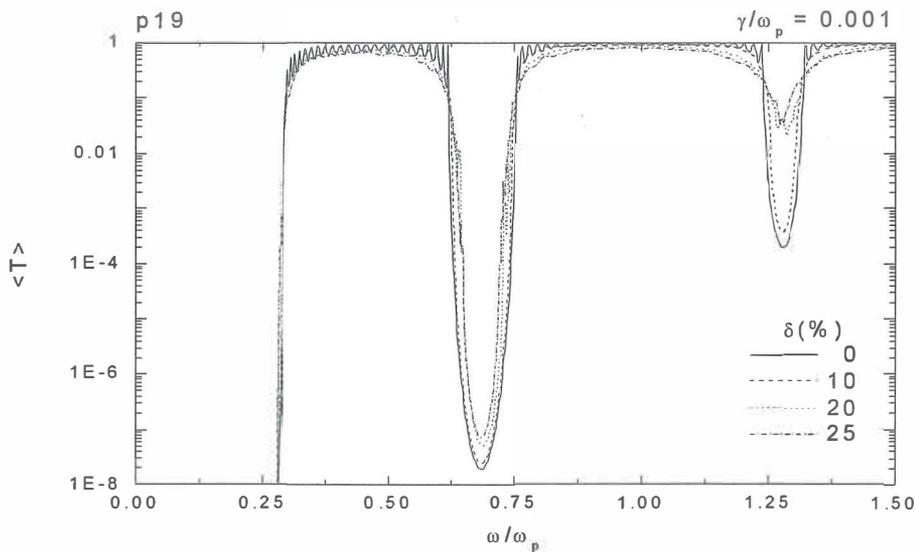


Figura 36. Variación de la transmisión con desorden uniforme en el espesor de las capas metálicas y dieléctricas.  $\gamma = 0.001\omega_p$

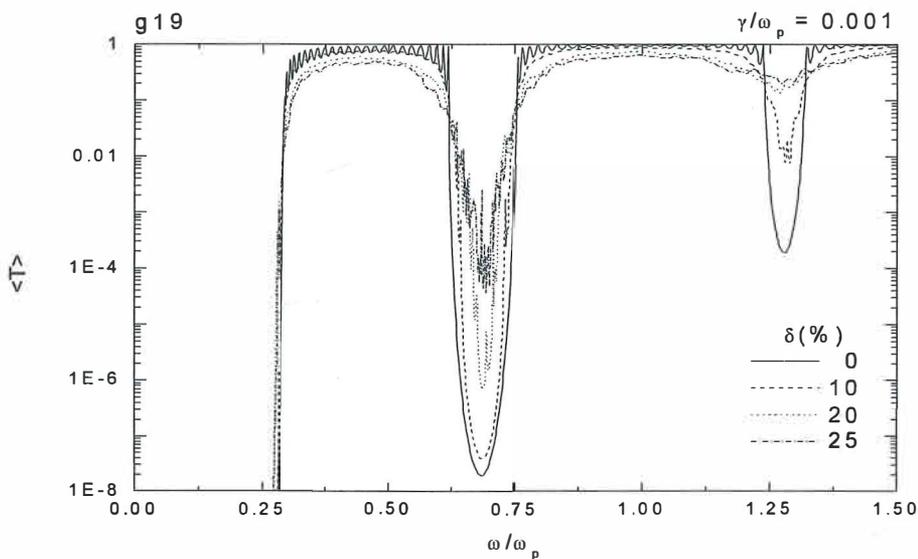


Figura 37. Variación de la transmisión con desorden gaussiano en el espesor de las capas metálicas y dieléctricas.  $\gamma = 0.001\omega_p$

En las figuras 32 y 33 observamos que las variaciones en el espesor de las capas metálicas tienen efectos muy pequeños en el espectro de transmisión. Al considerar variaciones en el espaciado de las capas metálicas, figuras 34 y 35, el desorden induce un aumento apreciable de la transmisión en la banda prohibida, para valores de desorden tanto uniforme como gaussiano, siendo mayores los cambios en este último caso (alrededor de cinco órdenes de magnitud). Este comportamiento se repite en el caso de desordenar los espesores de las capas metálicas y dieléctricas simultáneamente. En todos los casos un desorden moderado mantiene la estructura de bandas. Cuando el grado de desorden  $\delta$  es muy grande la estructura de bandas efectivamente desaparece con excepción de la primera banda prohibida (relacionada con la presencia de metal en la multicapa), la cual se estrecha ligeramente, como podemos apreciar en la figura 38 en donde existe desorden en todas las capas.

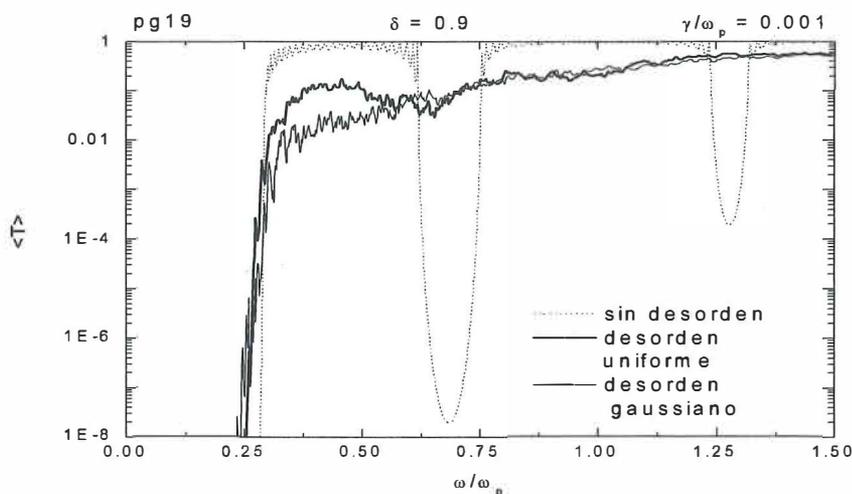


Figura 38. Transmisión para desorden en todas las capas en un sistema de longitud  $L$  variable. Con alto grado de desorden las bandas desaparecen, excepto la asociada con el metal.

### III.3.2 Desorden y localización de luz

Un aspecto relevante de la propagación de ondas en multicapas desordenadas es el fenómeno de localización, el cual se refiere a una atenuación exponencial de la intensidad de la luz en relación con la distancia recorrida en el medio y cuyo origen no es la absorción, de acuerdo con Kondilis y Tzanetakis (1992). El origen de esta atenuación se encuentra en el esparcimiento de la luz en el interior del medio. Para la longitud de localización  $l$  usamos la expresión empleada por McGurn et al (1993):  $l = -L / \langle \ln T \rangle$ , donde  $L$  es la longitud total de la multicapa en términos del período  $d$  y  $\langle \rangle$  es un promedio sobre un número determinado de sistemas desordenados. En nuestro caso esto significa generar diferentes multicapas desordenadas variando el parámetro de desorden, calcular la transmisión para cada sistema desordenado y tomar un promedio de la cantidad  $\ln T$ . Para obtener este promedio debemos generar distintas multicapas que tengan la misma longitud total  $L$  con el mismo grado de desorden (ver Zhang et al, 1994). Esta condición se cumple en el primer tipo de multicapas que hemos considerado, en donde se mantiene constante la longitud total del sistema sin embargo, en condiciones prácticas es muy difícil, si no imposible, mantener dicha longitud fija. Al fabricar una multicapa, lo más probable es que existan errores en cada capa, con lo que la longitud resultante puede diferir del valor nominal  $L$ . Para calcular la longitud de localización en este caso suponemos que el sistema es en promedio periódico, lo que significa que el espesor promedio calculado sobre un número grande de configuraciones tiende a coincidir con el valor nominal  $L$ , pues los errores aleatorios introducidos se compensan: es posible que una capa aumente su espesor en tanto que otra lo

reduzca, de manera que en promedio la longitud total es más o menos constante. Para considerar que un sistema es periódico en promedio debemos tomar un número relativamente grande de configuraciones (es decir, de multicapas desordenadas) y obtener el promedio sobre el conjunto. En nuestros cálculos tomamos el valor nominal  $L$  igual a 51 capas sin desorden, equivalente a 2510 nm y, como ya hemos mencionado, un total de 100 configuraciones. La figura 39 muestra la distribución de espesores para distintos grados de desorden. Podemos observar que con valores pequeños del parámetro de desorden el espesor resultante es cercano a 2510nm: para  $\delta = 25\%$  los errores en el espesor son del orden de 2.6 y 3.4% en el caso de desorden uniforme y de 5.6-6.4% en el caso de desorden gaussiano.

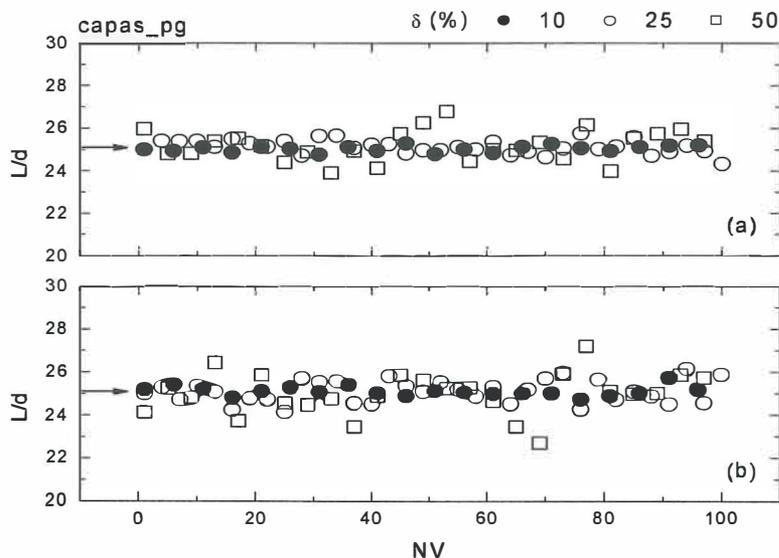


Figura 39. Distribución del espesor total  $L$  para distintas multicapas con variaciones aleatorias en torno al valor sin desorden (indicado por la flecha), cuando se varían los espesores de todas las capas. a) desorden uniforme. b) desorden gaussiano. El porcentaje de variación en cada capa es el mismo.

En las figuras 40 y 41 mostramos la longitud de localización cuando mantenemos constante la longitud total  $L$  para los casos de desorden en la posición y desorden en el espesor, respectivamente. En el primer caso observamos que la longitud de localización aumenta en las bandas prohibidas y disminuye en las bandas permitidas, tendiendo a un valor constante cuando el desorden es muy grande, a excepción de la región correspondiente a la primera banda prohibida. Con desorden en la posición la longitud de localización “sigue” la estructura de bandas, de manera que este tipo de desorden induce un esparcimiento relativamente débil de la luz.

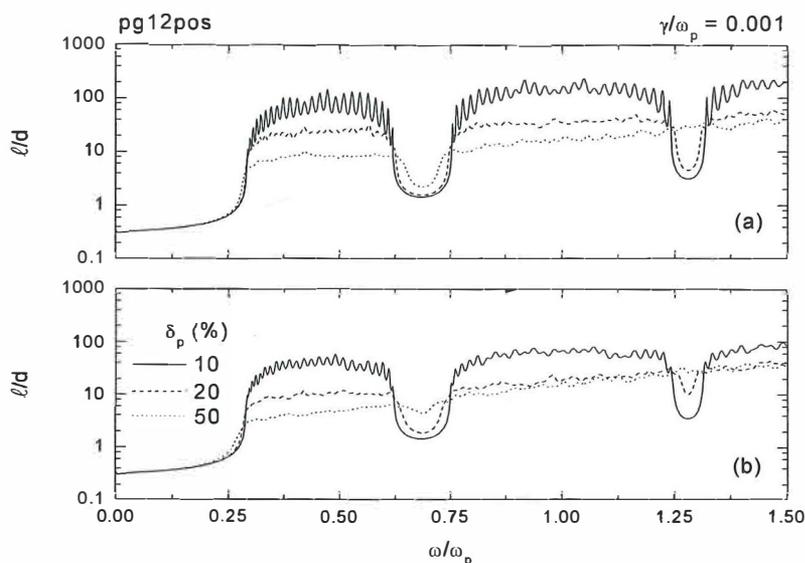


Figura 40. Longitud de localización cuando la longitud total  $L$  es constante y se introduce desorden en la posición. a) desorden uniforme; b) desorden gaussiano. Con desorden moderado es posible distinguir una estructura de bandas.

Cuando consideramos desorden en el espesor de las capas metálicas el esparcimiento de la luz es mayor, pues estamos variando el contenido metálico, afectando la longitud de localización. Con desorden moderado, existen mínimos locales para frecuencias cercanas a las bandas prohibidas originales, los que tienden a desaparecer conforme aumenta el desorden. Vemos entonces que el desorden en el espesor produce mayores efectos que el desorden en la posición.

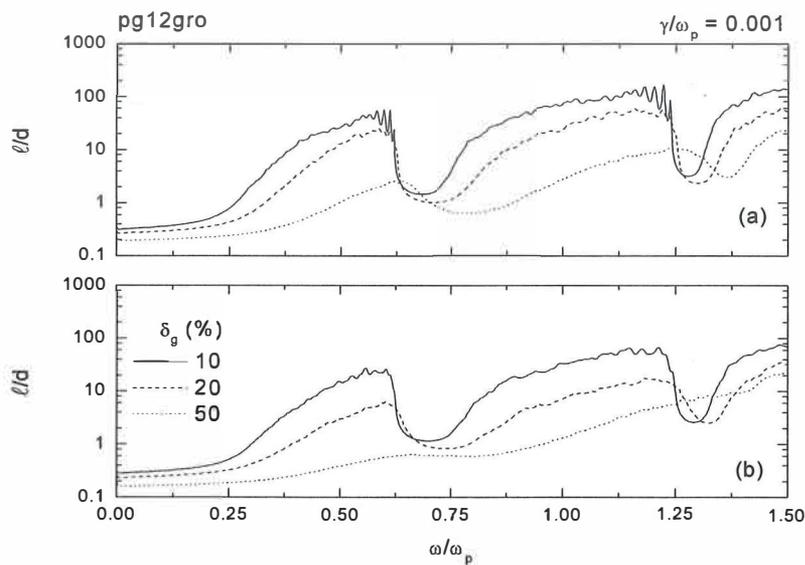


Figura 41. Longitud de localización cuando la longitud total  $L$  es constante y se introduce desorden en el espesor de las capas metálicas. a) desorden uniforme; b) desorden gaussiano. Con valores moderados de desorden desaparece la semejanza con la estructura de bandas.

Consideremos ahora desorden en el caso de espesor total variable de la multicapa.

En la figura 42 tenemos la longitud de localización cuando introducimos desorden en el

espesor de las capas metálicas (con  $\gamma = 0.001\omega_p$ ), para los casos de desorden uniforme (figura 42-a) y desorden gaussiano (figura 42-b). Observamos que tanto con valores moderados como altos de desorden la longitud de localización “sigue” la estructura de bandas y el efecto del desorden es mínimo:  $l$  sólo disminuye ligeramente en las bandas permitidas, con las variaciones más notorias para el caso de desorden gaussiano.

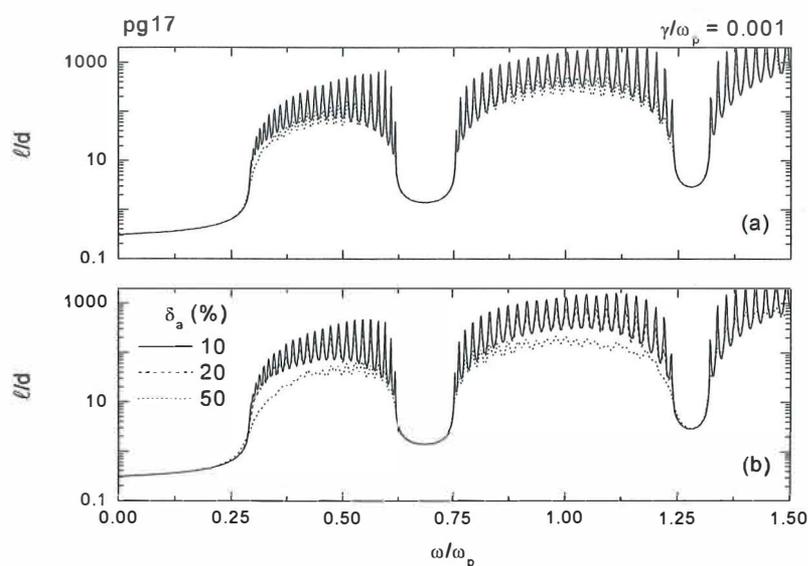


Figura 42. Longitud de localización cuando la longitud total  $L$  es variable y se introduce desorden en el espesor de las capas metálicas. a) desorden uniforme; b) desorden gaussiano. Aún para valores grandes de desorden la longitud de localización presenta una estructura semejante a la de bandas.

Si ahora mantenemos constante el espesor de las capas metálicas y variamos su separación notamos que la longitud de localización disminuye en la region correspondiente

a las bandas permitidas y aumenta ligeramente en las bandas prohibidas respecto del caso ordenado, siendo este efecto es más pronunciado con desorden gaussiano. Cuando el desorden es muy grande (p.e.  $\delta = 0.5$ ) la longitud de localización es aproximadamente igual en ambos casos, siendo muy pequeña en la región correspondiente a la primera banda prohibida, como se observa en la figura 43.

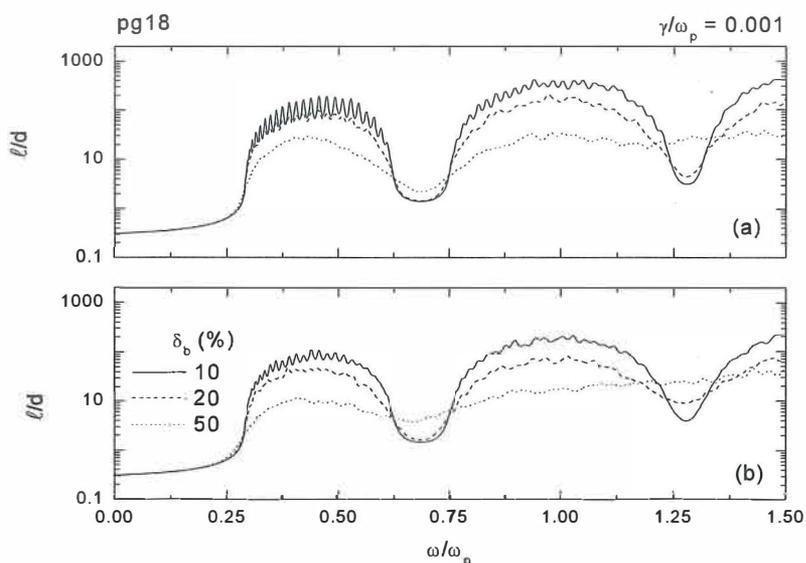


Figura 43. Longitud de localización  $l$  para distintos grados de desorden cuando varía el espaciamiento de las capas metálicas. a) desorden uniforme. b) desorden gaussiano.

De lo anterior vemos que el desorden en el espesor de las capas dieléctricas tiene mayor efecto sobre la longitud de localización que el desorden en las capas metálicas, aunque la estructura de la longitud de localización exhibe cambios pequeños con valores

moderados ( $<20\%$ ) del parámetro de desorden. Esta situación es contraria al caso de mantener la longitud  $L$  constante, donde un desorden pequeño introduce cambios significativos en dicha estructura.

## IV. Conclusiones

En este trabajo hemos presentado la estructura de bandas para una superred metal-dieléctrica, en donde la función dieléctrica del metal la obtenemos mediante el modelo de Drude. Al considerar absorción metálica, la estructura de bandas describe un vector de Bloch complejo con partes real e imaginaria distintas de cero en todo el intervalo de frecuencias, de manera que todas las soluciones se vuelven evanescentes, lo que significa que la estructura de bandas desaparece. De esta manera los resultados obtenidos solamente tienen significado físico en sistemas finitos. El efecto de la absorción metálica es posibilitar la propagación de luz a frecuencias comprendidas dentro de las bandas prohibidas del caso no absorbente, aunque al costo de verse fuertemente atenuadas. Sin embargo, aún es posible distinguir una estructura de bandas y relacionarla con los espectros de transmisión del sistema.

Otro aspecto abordado es la modificación de los espectros de transmisión al introducir variaciones aleatorias en los espesores de las capas que conforman el sistema unidimensional, pasando de un sistema periódico a un sistema desordenado. Para esto, consideramos dos tipos de sistemas: con longitud fija  $L$  y con longitud variable. Para el primer caso introducimos desorden: uniforme y gaussiano en dos combinaciones: desorden en la posición y en el espesor de las capas metálicas. Con desorden en la posición observamos un aumento de la transmisión en la banda prohibida para las dos clases de desorden. En cambio, cuando consideramos desorden en el espesor de las capas metálicas,

la transmisión disminuye, lo cual se debe al aumento del contenido metálico en la estructura.

Cuando la longitud es variable también consideramos desorden uniforme y gaussiano, ahora en tres combinaciones: desorden en el espesor de las capas metálicas, desorden en el espesor de las capas dieléctricas y desorden en los espesores de los dos tipos de capas. Encontramos que el desorden en el espesor de las capas metálicas tiene poco efecto sobre el espectro de transmisión, en tanto que el desorden en las capas dieléctricas provoca un aumento significativo de la transmisión en las bandas prohibidas, especialmente al considerar desorden gaussiano. Esto se observa también con variaciones simultáneas en las capas metálicas y dieléctricas. Es importante notar que en todos los casos, la estructura de bandas se mantiene para valores moderados de desorden.

En relación con la longitud de localización, en el caso de longitud fija tenemos que con desorden en la posición de las capas metálicas la longitud de localización aumenta en las bandas prohibidas y disminuye en las bandas permitidas, presentando una estructura similar a la de bandas. En el caso de desorden en la posición, esta estructura es apreciable para valores pequeños de desorden y se pierde para valores moderados ( $\delta \sim 25\%$ ). En cuanto a superredes con longitud variable, el desorden en el espesor de las capas metálicas afecta poco la longitud de localización, disminuyendo ligeramente en las bandas permitidas sin aumento apreciable en las bandas prohibidas. Con desorden en las capas dieléctricas es notorio el aumento de la longitud de localización en las bandas prohibidas y la disminución

en la bandas permitidas. De esta manera, los efectos más importantes se relacionan con el espaciamiento entre las capas metálicas, y no con cambios en su espesor.

## Referencias

- Ashcroft, N. W. y Mermin, N. D., 1976. *Solid State Physics*. Saunders College. USA. 848 pp.
- Blaaderen, A., 2003. *Colloidal molecules and beyond*. Science **301**(5632): 470-471 p.
- Bloemer, M. J. y Scalora, M., 1998. *Transmissive properties of Ag/MgF<sub>2</sub> photonic band gaps*. Appl. Phys. Lett. **72**(14): 1676-1678 p.
- Born, M. y Wolf, E., 1999. *Principles of optics*. Cambridge Univ. Press. U. K. 986 pp.
- Bruyant, A., Léronnel, G., Reece, P.J. y Gal, M., 2003. *All-silicon omnidirectional mirrors based in one-dimensional photonic crystals*. Appl. Phys. Lett. **82**(19): 3227-3229 p.
- Bulgakov, S. A. y Nieto-Vesperinas, M., 1997. *Frequency properties of random photonic lattices*. Waves in Random Media **7**(2): 183-192 p.
- Chigrin, D. N., Lavrinenko, A. V., Yarotsky, D. A. y Gaponenko, S. V., 1999. *Observation of total omnidirectional reflection from a one-dimensional dielectric lattice*. Appl. Phys. A **68**(1): 25-28 p.
- Chigrin, D. N. y Sotomayor Torres, C. M., 2000. *One-dimensional photonic structures under a new light*. En: Soukoulis, C. M.. (Editor). *Photonic crystals and light localization in the 21 st century*. NATO Science Series Vol. 253. The Netherlands. 173-180 p.
- Cornelius, C. M. y Dowling, P., 1999. *Modification of Planck radiation by photonic band-gap structures*. Phys. Rev. A **59**(6): 4736-4746 p.
- De Dood, M. J.A., Polman, A. y Fleming, J. G., 2003. *Modified spontaneous emission from erbium-doped photonic layer-by-layer crystal*. Phys. Rev. B **67**(11): 115106-1-5 p.

- Fan, S., Villeneuve, P. R., Joannopoulos, J. D. y Schubert, E. F., 1997. *High extraction efficiency of spontaneous emission from slabs of photonic crystals*. Phys. Rev. Lett. **78**(17): 3294-3297 p.
- Fink, Y. Winn, J. N., Fan, S., Chen, C., Michel, J., Joannopoulos, J. D. y Thomas, E. L., 1998. *A dielectric omnidirectional reflector*. Science **282**(5394): 1679-1682 p.
- Freilikher, V. D., Liansky, B. A., Yurkevich, I. V., Maradudin, A. A. y McGurn, A. R., 1995. *Enhanced transmission due to disorder*. Phys. Rev. E **51**(6): 6301-6304 p.
- Furman, Sh. A. y Tikhonravov, A. V., 1992. *Basics of optics of multilayer systems*. Editions Frontières. Cedex, France. 242 pp.
- Harris, S. E., 1997. *Electromagnetically induced transparency*. Phys. Today **50**(7): 36-42 p.
- Ho, K.M., Chan, C. T. y Soukoulis, C. M., 1990. *Existence of a photonic gap in periodic dielectric structures*. Phys. Rev. Lett. **65**(25): 3152-3155 p.
- Joannopoulos, J. D. Meade, R. D. y Winn, J. N., 1995. *Photonic Crystals: Molding the Flow of Light*. Princeton Press. Singapore. 137 pp.
- John, S., 1987. *Strong localization of photons in certain disordered dielectric superlattices*. Phys. Rev. Lett. **58**(23): 2486-2489 p.
- John, S. y Florescu, M., 2001. *Photonic bandgap materials: towards an all-optical micro-transistor*. J. Opt. A: Pure Appl. Opt. **3**(6): S103-S120 p.
- Kaliteevski, M. A., Manzanares Martínez, J., Cassagne, D. y Albert, J. P., 2002. *Disorder-induced modification of the transmission of light in a two-dimensional photonic crystal*. Phys. Rev. B **66**(11): 113101-1 – 113101-4 p.

- Kern, W. y Schuegraf, K. K., 1988. *Deposition technologies and applications: introduction and overview*. En: Schuegraf, K. K. (Editor). *Handbook of thin-film deposition processes and techniques*. Noyes Publications. New Jersey. 1-25 p.
- Kondilis, A. y Tzanetakis, P., 1992. *Numerical calculations on optical localization in multilayer structures with random-thickness layers*. Phys. Rev. B **46**(23): 15426-15431 p.
- Krokhin, A. A. y Halevi, P., 1996. *Influence of weak dissipation on the photonic band structure of periodic composites*. Phys. Rev. B **53**(3): 1205-1214 p.
- Lidorikis, E., Sigalas, M. M., Economou, E. N. y Soukoulis, C. M., 2000. *Gap deformation and classical wave localization in disordered two-dimensional photonic-band-gap materials*. Phys. Rev. B **61**(20): 13458-13464 p.
- Macleod, H. A., 1986. *Thin-Film Optical Filters*. Macmillan. New York. 519 pp.
- McGurn, A. R., Christensen, K. T., Mueller, F. M. y Maradudin, A. A., 1993. *Anderson localization in one-dimensional randomly disordered optical systems that are periodic on average*. Phys. Rev. B. **47**(20): 13120-13125 p.
- McGurn, A. R. y Maradudin, A.A, 1993. *Photonic band structure of two- and three-dimensional periodic metal or semiconductor arrays*. Phys. Rev. B **48**(23): 17576-17579 p.
- McKelvey, John., 1982. *Solid State and Semiconductor Physics*. Robert E. Krieger Publishing Company. Florida. 512 pp.
- Meier, M., Dodabalapur, A., Rogers, J. A., Slusher, R. E., Mekis, A., Timko, A., Murray, C.A., Ruel, R. y Nalamasu, O., 1999. *Emission characteristics of two-dimensional*

- organic photonic crystal lasers fabricated by replica molding*. J. Appl. Phys **86**(7): 3502-3507 p.
- Mekis, A., Chen, J.C., Kurland, I., Fan, S., Villeneuve, P. R. y Joannopoulos, J. D., 1996. *High transmission through sharp bends in photonic crystal waveguides*. Phys. Rev. Lett. **77**(18): 3787-3790 p.
- Mishra, S. y Satpathy, S., 2003. *One-dimensional photonic crystal: the Kronig-Penney model*. Phys. Rev. B. **68**(4): 45121-1 - 451212-9 p.
- Moroz, A., Tip, A. y Combes, J. M., 2001. *Absorption in periodic layered structures*. Synt. Met. **116**(1-3): 481-484 p.
- Nelson, R. L. y Haus, J. W., 2003. *One-dimensional photonic crystals in reflection geometry for optical applications*. Appl. Phys. Lett. **83**(6): 1089-1091 p.
- Polman, A. y Wiltzius, A., 2001. *Materials science aspects of photonic crystals*. MRS Bulletin, **26**(8): 608-610 p.
- Press, W. H., Flannery, B. P., Teukolsky, S. A. y Vetterling, W. T., 1990. *Numerical Recipes (FORTRAN version)*. Cambridge University Press. New York. 702 pp.
- Ramos-Mendieta, F. y Halevi, P., 1997. *Electromagnetic surface modes of a dielectric superlattice: the supercell method*. J. Opt. Soc. Am. B **14**(2): 370-381 p.
- Ross, S. M., 1990. *A Course in Simulation*. Macmillan. New York. 202 pp.
- Scalora, M., Bloemer, M. J., Pethel, A. S., Dowling, J. P., Bowden, C. M. y Manka, A. S., 1998. *Transparent metallo-dielectric, one-dimensional, photonic band-gap structures*. J. Appl. Phys. **83**(5): 2377-2383 p.
- Sheng, P., White, B., Zhang, Z. Q. y Papanicolau, G., 1990. *Wave localization and multiple scattering in randomly-layered media*. En: Sheng, P. (Editor), *Scattering and*

- localization of classical waves in random media*, World Scientific. Singapore. 563-619 p.
- Sigalas, M. M., Soukoulis, C. M., Chan, C.T. y Ho, K.M., 1994. *Electromagnetic propagation through dispersive and absorptive photonic-band-gap materials*. Phys. Rev. B. **49**(16): 11080-11087 p.
- Sigalas, M., M., Chan, C. T., Ho, K. M. y Soukoulis, C. M., 1995. *Metallic photonic band-gap materials*. Phys. Rev. B **52**(16): 11744-11751 p.
- Sigalas, M. M., Soukoulis, C. M., Chan, C. T. y Turner, D., 1996. *Localization of electromagnetic waves in two-dimensional disordered systems*. Phys. Rev. B. **53**(13): 8340-8348 p.
- Sigalas, M. M., Soukoulis, C. M., Chan, C. T., Biswas, R. y Ho, K. M., 1999. *Effect of disorder on photonic band gaps*. Phys. Rev. B **59**(20): 12767-12770 p.
- Smith, D. R., Dalichaouch, R., Kroll, N., Schultz, S., McCall, S. L. y Platzman, P. M., 1993. *Photonic band structure and defects in one and two dimensions*. J. Opt. Soc. Am. B **10**(2): 314-321 p.
- Sözüer, H. y Dowling, J., 1994. *Photonic band calculations for woodpile structures*. J. Mod. Opt. **41**(2): 231-239 p.
- Stefanou, N., Karathanos, V. y Modinos, A., 1992. *Scattering of electromagnetic waves by periodic structures*. J. Phys.: Condens. Matter **4**(36): 7389-7400 p.
- Tip, A., Moroz, A. y Combes, J.M., 2000. *Band structure of absorptive photonic crystals*. J. Phys. A: Math. Gen. **33**(35): 6223-6252 p.
- Van der Lem, H., Tip, A. y Moroz, A., 2003. *Band structure of absorptive two-dimensional photonic crystals*. J. Opt. Soc. Am. B **20**(6): 1334-1341 p.

- Villeneuve, P. y Piché, M., 1992. *Photonic band gaps in two-dimensional square and hexagonal lattices*. Phys. Rev. B **46**(8): 4969-4972 p.
- Vlasov, Y. A., Kaliteevski, M. A. y Nikolaev, V. V., 1999. *Different regimes of light localization in a disordered photonic crystal*. Phys. Rev. B **60**(3): 1555-1562 p.
- Wiersma, D. S., Bartolini, P., Lagendijk, A. y Righini, R., 1997. *Localization of light in a disordered medium*. Nature **390**(6661): 671-673 p.
- Wooten, F., 1972. *Optical properties of solids*. Academic Press. New York. 260 pp.
- Yablonovitch, E., 1987. *Inhibited spontaneous emission in solid-state physics and electronics*. Phys. Rev. Lett. **58**(20): 2059-2062 p.
- Yablonovitch, E., Gmitter, T. J. y Leung, K. M., 1991. *Photonic band structure: the face-centered-cubic case employing nonspherical atoms*. Phys. Rev. Lett. **67**(17): 2295-2298 p.
- Yablonovitch, E., Gmitter, T. J., Meade, R. D., Rappe, A. M., Brommer, K. D. y Joannopoulos, J. D., 1991. *Donor and acceptor modes in photonic band structure*. Phys. Rev. Lett. **67**(24): 3380-3383 p.
- Yeh, P., 1988. *Optical waves in layered media*. Wiley. New York. 405 pp.
- Zhang, D., Hu, W., Zhang, Y., Li, Z., Cheng, B. y Yang, G., 1994. *Experimental verification of light localization for disordered multilayers in the visible-infrared spectrum*. Phys. Rev. B **50**(14): 9810-9814 p.