

**EFFECTOS DE PRESIÓN, TEMPERATURA Y FRECUENCIA
DEL PLASMA SOBRE LA ESTRUCTURA DE BANDAS DE
UN CRISTAL FOTÓNICO 1D SEMICONDUCTOR**

LUZ ESTHER GONZÁLEZ REYES



**UNIVERSIDAD DEL VALLE
FACULTAD DE CIENCIAS NATURALES Y EXACTAS
PROGRAMA ACADÉMICO DE FÍSICA
SANTIAGO DE CALI**

2010

**EFFECTOS DE PRESIÓN, TEMPERATURA Y FRECUENCIA
DEL PLASMA SOBRE LA ESTRUCTURA DE BANDAS DE
UN CRISTAL FOTÓNICO 1D SEMICONDUCTOR**

LUZ ESTHER GONZÁLEZ REYES

**Trabajo de Grado presentado como requisito parcial para optar por
el título de Físico**

Director

Prof. NELSON PORRAS MONTENEGRO

UNIVERSIDAD DEL VALLE

FACULTAD DE CIENCIAS NATURALES Y EXACTAS

PROGRAMA ACADÉMICO DE FÍSICA

SANTIAGO DE CALI

2010

UNIVERSIDAD DEL VALLE
FACULTAD DE CIENCIAS NATURALES Y EXACTAS
PROGRAMA ACADÉMICO DE FÍSICA

LUZ ESTHER GONZÁLEZ REYES, 1987

**EFFECTOS DE PRESIÓN, TEMPERATURA Y FRECUENCIA
DEL PLASMA SOBRE LA ESTRUCTURA DE BANDAS DE
UN CRISTAL FOTÓNICO 1D SEMICONDUCTOR**

Temas y Palabras Claves

- Cristales Fotónicos
- Método de la matriz transferencia
- Estructura de Bandas
- Banda de energía prohibida

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1. Representación de un Cristal Fotónico en las tres dimensiones.....	10
Figura 2. Descripción del Cristal Fotónico 1D estudiado.....	14
Figura 3. Estructura de bandas fotónicas ω vs q , de una superred (período d) con igual capas alternadas de aire (con espesor a) y GaAs (espesor b e índice de refracción $n_2 = \sqrt{\epsilon_2} \approx 3.6$).....	25
Figura 4. Estructura de Bandas Fotónicas ω vs q , de una superred (período d) con iguales capas alternadas de aire y GaAs bajo la acción de presión y temperatura.....	26
Figura 5. Estructura de Bandas Fotónicas ω vs q , de una superred de iguales capas alternadas de aire y GaAs. Panel (a) es para $a = b = 1 \text{ mm}$. Panel (b) es para $a = 0.8 \text{ mm}$ y $b = 1.2 \text{ mm}$. Panel (c) es para $a = 0.5 \text{ mm}$ y $b = 1.5 \text{ mm}$. Todos los paneles fueron realizados con $T = 340K$ y $P = 40kbar$	27
Figura 6. Curvas de dispersión para $a/b=1$. Las líneas negra, roja, verde y azul corresponden a $a=12, 14, 16$ y 18 mm respectivamente. En cada caso, se observan las tres bandas que están alrededor y por encima del $\langle n \rangle = 0$ gap. La segunda gráfica presenta el zoom del $\langle n \rangle = 0$ gap exhibiendo su invarianza.....	28
Figura 7. Índice de refracción dependiente de la frecuencia de acuerdo a la permitividad dieléctrica modelada tipo Drude.....	29
Figura 8. Estructura de bandas fotónicas v vs q , con $v = \omega/2\pi$ de una superred compuesta de capas alternadas de aire y GaAs. Se presentan los resultados para diferentes valores de ω_p . Todos los paneles son para $a=b=1mm$	30
Figura 9. Comportamiento de la constante dieléctrica en el caso en que la frecuencia del plasma es variada con la presión.....	31
Figura 10. Estructura de bandas fotónicas v vs q , con $v = \omega/2\pi$ de una superred compuesta de capas alternadas de aire y GaAs con $a=b=1mm$. Se presentan los resultados de variar la ω_p con la presión, la línea negra es para $P=10kbar$ y la línea azul para $P=40kbar$. En el panel (b) se ha realizado el zoom del primer gráfico indicando con dos líneas rojas los valores de v donde el índice de refracción en promedio es nulo.....	31
Figura 11. Comportamiento del índice de refracción del Ta_2O_5 respecto a la longitud de onda. (Imagen tomada de la base de datos refractiveindex.info).....	33

Figura 12. Panel (a), muestra la estructura de bandas del cristal fotónico constituido por Ta₂O₅ y aire. Panel (b), muestra la PBS del PC constituido por GaAs y aire.....34

Figura 13. Panel (a), muestra la estructura de bandas del cristal fotónico constituido por Ta₂O₅ y aire, con el índice de refracción variando con la frecuencia. Panel (b), muestra la PBS del PC constituido por GaAs y aire también considerando la variación de la frecuencia.....35

Figura 14. Panel (a), muestra la PBS del PC constituido por GaAs y aire considerando la variación del índice de refracción con la frecuencia de acuerdo con la ecuación 70. Paneles (b) y (c) muestran la PBS del PC constituido por GaAs y aire considerando la variación de la constante dieléctrica con la frecuencia del plasma de acuerdo con la ecuación 64.....36

ÍNDICE

1. Acrónimos	6
2. Resumen.....	7
3. Introducción.....	8
4. Marco Teórico.....	10
5. Resultados del cristal fotónico 1D compuesto de capas alternadas de GaAs y aire.....	25
6. Resultados del cristal fotónico 1D compuesto de capas alternadas de Ta ₂ O ₅ y aire.....	33
7. Conclusiones.....	37
8. Referencias.....	38

1. ACRÓNIMOS

PC..... Cristal Fotónico (Photonic Crystals)

PBS..... Estructura de Bandas Fotónicas (Photonic Band Structure)

PBG..... Banda de Energía Prohibida (Photonic Band Gap)

2. RESUMEN

En este trabajo se deriva vía el formalismo de la matriz transferencia una ecuación trascendental para encontrar la estructura de bandas de dos cristales fotónicos 1D compuestos de capas alternadas de diferentes materiales, tales como GaAs y aire, Ta₂O₅ y aire. Se verificó la existencia de las bandas de energía prohibida y se mostró que éstas dependen de la relación entre el espesor de las capas de los materiales corroborando resultados previos. Adicionalmente, se investigaron los efectos de la presión y temperatura sobre la estructura de bandas, así como, los efectos de agregar n-dopantes en el GaAs considerando las variaciones en la frecuencia del plasma, causadas por la presión a través de la densidad de carga y la masa efectiva.

3. INTRODUCCIÓN

Después de que en 1987 Yablonovitch¹ y John² propusieron los cristales Fotónicos, muchos trabajos experimentales y teóricos han sido dedicados al estudio de las propiedades físicas de estos cristales, estructuras caracterizadas por la variación periódica del índice de refracción y la distribución espacial de la constante dieléctrica, tales estructuras definen rangos de frecuencia y direcciones en las cuales la propagación de la onda electromagnética es prohibida o permitida. Estas bandas de frecuencia en las cuales la propagación de la onda electromagnética no es permitida son llamadas *band gaps fotónicas*³. En esencia un cristal fotónico es una estructura periódica artificial que tiene la propiedad de controlar las propiedades de la luz, de la misma forma en que el Silicio y otros semiconductores controlan la corriente eléctrica. Esta estructura difracta a los fotones de la misma forma en que el cristal atómico difracta electrones; así es como nace por analogía el concepto de banda de energía prohibida para fotones, al igual que el concepto de estructura de bandas fotónicas⁴⁻⁶.

Con la idea de fabricar dispositivos que transmitan información de un lugar a otro a la mayor velocidad posible y con la menor pérdida de energía, se ha pensado en utilizar la luz en lugar de electrones como el portador de información, teniendo ésta la ventaja de viajar a mayor velocidad que un electrón en un metal, transportar mayor información por segundo y su ancho de banda en los materiales dieléctricos es mayor que en los metales. Es así, como los cristales fotónicos abren vías de investigación muy prometedoras para la manipulación de fotones en la industria de las telecomunicaciones y gran variedad de aplicaciones ópticas.

Una de estas vías es la sintonización de la banda de energía prohibida que abre una nueva perspectiva en la investigación científica y en las aplicaciones tecnológicas. Para sintonizar un cristal fotónico, la constante dieléctrica o la permeabilidad magnética de uno de los materiales constituyentes puede depender de parámetros externos, tales como la aplicación de un campo magnético⁷⁻¹⁰, eléctrico¹¹ o por efectos de presión y temperatura¹², etc., que pueden modificar las funciones respuesta de estos materiales.

Estas sintonizaciones en los cristales fotónicos también pueden obtenerse por la aplicación de una fuerza mecánica, presión o tensión, que modifican la estructura de estos sistemas y consecuentemente su respuesta óptica. Sin embargo, considerando las variaciones en las propiedades intrínsecas de los materiales constituyentes de los PCs, por ejemplo la

dependencia de la constante dieléctrica y permeabilidad magnética con la presión y temperatura, la sintonización puede lograrse sin modificar la estructura del PC.

Muchos trabajos se han dedicado a la comprensión del comportamiento de los campos electromagnéticos en un cristal fotónico 1D. La PBS como la densidad de estados fotónicos de una superred 1D compuesta de capas alternadas de aire y GaAs caracterizado por diferentes índices de refracción, que pueden tomar valores positivos o negativos, se han investigado teóricamente en el marco de las ecuaciones de Maxwell usando la técnica de la matriz transferencia¹³⁻¹⁴. Estos autores han encontrado la existencia de superredes fotónicas con band gap nulo, indicando la importancia de una superred fotónica 1D para muchas aplicaciones prácticas. Además de los resultados ya conocidos, estos autores han encontrado puntos de gap-nulos para valores proporcionales al espesor entre las capas. Además, se han podido caracterizar gaps no-Bragg que aparecen en regiones de frecuencia en las que el índice de refracción promedio es nulo. Sin embargo, hasta ahora, ellos no han realizado trabajos sobre el comportamiento de la estructura de bandas de un cristal fotónico 1D bajo la acción de presión hidrostática aplicada, temperatura y frecuencia del plasma. En este trabajo presentamos los efectos de estas magnitudes físicas en la respuesta óptica de estas estructuras.

4. MARCO TEÓRICO

4.1 Teoría Básica de los Cristales Fotónicos

Los cristales fotónicos son estructuras periódicas caracterizadas por la variación periódica del índice de refracción y la distribución espacial de la constante dieléctrica del material que las constituye en una, dos o tres dimensiones (1D, 2D, 3D) como se muestra en la figura 1.

Como se mencionó anteriormente, los cristales fotónicos son el análogo de los cristales atómicos vistos en la física del estado sólido, la diferencia es que en los PCs los electrones son reemplazados por ondas electromagnéticas. La tabla 1, presenta algunas analogías entre la mecánica cuántica que rige el comportamiento de los electrones en un semiconductor y el electromagnetismo que rige el comportamiento de los fotones en un PC.

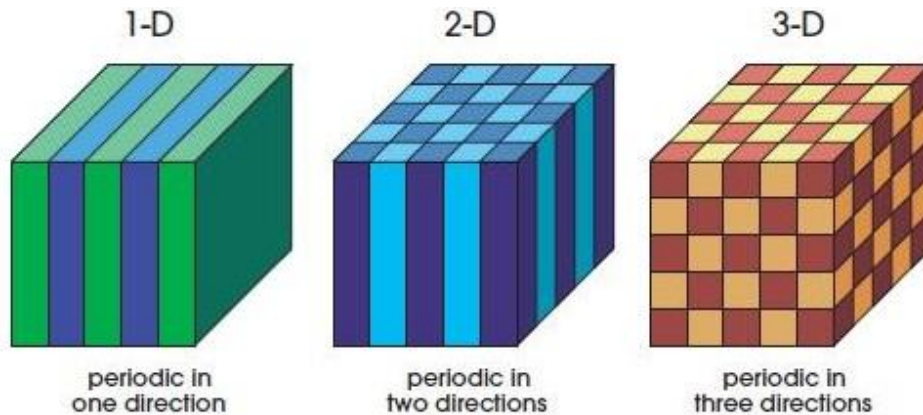


Figura 1. Representación de un cristal fotónico en las tres dimensiones.

Siempre que tratemos con una situación macroscópica como es el caso de la propagación de la luz a través de un cristal fotónico, debemos hacer uso de las ecuaciones de Maxwell³.

Podemos restringir dichas ecuaciones para el caso particular de una propagación a través de medios de constante dieléctrica variable, sin cargas ni corrientes. Se considera que la constante dieléctrica del medio se mide con relación a la del vacío, esta constante dieléctrica relativa es la encargada de llevar la periodicidad espacial en el cristal ($\epsilon_0\epsilon(\mathbf{r})$).

Tabla 1. Comparación entre la mecánica cuántica y electrodinámica.

	MECÁNICA CUÁNTICA	ELECTROMAGNETISMO
Función Principal con toda la información	Función de onda, $\Psi(\vec{r}, t)$	Campo Magnético, $\vec{H}(\vec{r}, t)$
Ecuación Maestra que determina los estados del sistema	La Ecuación de Schrödinger $\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) \right] \Psi_E(\vec{r}) = E \Psi_E(\vec{r})$	Ecuaciones de Maxwell $\nabla \times \frac{1}{\epsilon(\vec{r})} \nabla \times \vec{H}_\omega(\vec{r}) = \frac{\omega^2}{c^2} \vec{H}_\omega(\vec{r})$
Problema de valores propios	$\hat{H}\Psi = E\Psi$	$\hat{\Theta}\vec{H} = \left(\frac{\omega}{c} \right)^2 \vec{H}$
Operador Hermítico	$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r})$	$\hat{\Theta} = \nabla \times \frac{1}{\epsilon(\vec{r})} \nabla \times$
Periodicidad del Sistema	$V(\vec{r}) = V(\vec{r} + \vec{R})$	$\epsilon(\vec{r}) = \epsilon(\vec{r} + \vec{R})$
Teorema de Bloch	$\psi_{\vec{k}n}(\vec{r}) = u_{\vec{k}n}(\vec{r}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}$	$\vec{H}_{\vec{k}n}(\vec{r}) = \vec{u}_{\vec{k}n}(\vec{r}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}$
Localización de la Función Principal	La función de onda se concentra en regiones de bajo potencial.	El campo concentra su energía en regiones de alta constante dieléctrica.
Origen Físico de la PBS	Dispersión coherente de la onda electrónica al atravesar regiones con diferente potencial.	Dispersión coherente de los campos en las interfaces entre regiones de distinta constante dieléctrica.
Que se representa por la PBS	Las energías de los estados permitidos, $E_n(\vec{k})$	Las frecuencias de los modos armónicos permitidos, $\omega_n(\vec{k})$

Como las ecuaciones de Maxwell son lineales, podemos separar la dependencia temporal de la dependencia espacial. Asumiremos que los campos eléctrico y magnético varían en forma sinusoidal en función del tiempo. Las ecuaciones de Maxwell quedan:

$$\nabla \cdot \mathbf{H}(\mathbf{r}) = 0 \quad (1)$$

$$\nabla \cdot [\varepsilon(\mathbf{r})\mathbf{E}(\mathbf{r})] = 0 \quad (2)$$

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}) = -\frac{i}{\omega\mu_0} \nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}) \quad (3)$$

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \frac{i}{\omega\varepsilon_0\varepsilon(\mathbf{r})} \nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}) \quad (4)$$

Reemplazando (4) en (3) el resultado es una ecuación enteramente en $\mathbf{H}(\mathbf{r})$:

$$\nabla \times \left(\frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} \nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}) \right) = \left(\frac{\omega}{c} \right)^2 \mathbf{H}(\mathbf{r}) \quad (5)$$

donde $\Theta = \nabla \times \frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} \nabla \times$ corresponde al operador hermítico.

La ecuación (5) es conocida como la ecuación master, que junto con la ecuación de la divergencia (1), proporciona toda la información sobre $\mathbf{H}(\mathbf{r})$. El procedimiento para encontrar la PBS para un PC es resolver la ecuación master para encontrar los modos de $\mathbf{H}(\mathbf{r})$ y las frecuencias correspondientes sujetas a la condición de transversalidad (1). Dicho desarrollo se hace en términos de $\mathbf{H}(\mathbf{r})$ o de $\mathbf{E}(\mathbf{r})$, y se aplican luego las ecuaciones de Maxwell en su forma más sencilla para encontrar el campo faltante³.

La ecuación (5) puede tratarse como un problema de valores propios, dónde el término a la izquierda de $\mathbf{H}(\mathbf{r})$ es un operador cuyo valor propio es $\left(\frac{\omega}{c} \right)^2$. De esta forma los valores propios de la ecuación (5) son las frecuencias o modos del sistema.

La resolución del problema de funciones y valores propios (5) puede simplificarse considerablemente si el sistema es invariante a determinadas operaciones de traslación o rotación, es decir, si el sistema posee determinadas simetrías.

Los PCs están formados de una estructura dieléctrica periódica, lo que permite definir una simetría de traslación $\varepsilon(\mathbf{r}) = \varepsilon(\mathbf{r} + \mathbf{R})$. Donde el vector $\mathbf{R}$ es una combinación lineal de la constante definida como la periodicidad de la estructura dieléctrica en cada dirección del espacio. Por lo tanto, el sistema es invariante ante desplazamientos definidos por una distancia $\mathbf{R}$.

La simetría de traslación discreta que posee el sistema nos permite expresar las soluciones de la ecuación (5) como el producto de una onda plana modulada por una función periódica $\mathbf{u}_{n,k}(\mathbf{r})$, de periodo igual a la periodicidad del cristal fotónico. Este resultado, que permite expresar las funciones propias del sistema de este modo se conoce como *teorema de Bloch*. El subíndice n referencia a las diferentes bandas energéticas que son solución del problema de valores propios (los modos del sistema).

$$\mathbf{H}_{n,k}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \cdot \mathbf{u}_{n,k}(\mathbf{r}) . \quad (6)$$

Encontrar los valores propios, correspondientes a las funciones propias del estilo de la ecuación (5), da lugar a la relación de dispersión del sistema, en la que se especifican el rango de frecuencias permitidas para cada vector de onda $\mathbf{k}$. Las frecuencias propias del sistema presentan pues, una simetría en el espacio recíproco (espacio de Fourier) según la relación $\omega(\mathbf{k}) = \omega(\mathbf{K} + \mathbf{G})$ donde el vector $\mathbf{G}$ esta dado por,

$$\mathbf{G} = \mathbf{b}_1 P_1 + \mathbf{b}_2 P_2 + \mathbf{b}_3 P_3 \quad (7)$$

siendo $\mathbf{b}_1$, $\mathbf{b}_2$ y $\mathbf{b}_3$ los vectores unitarios del espacio recíproco. De las relaciones anteriores se extrapola que dos vectores de onda, $\mathbf{k}$ y $\mathbf{k} + 2\pi/\mathbf{a}$ generarán el mismo valor propio y por tanto, generarán soluciones redundantes. Por ello, el estudio de la relación de dispersión, para el estudio de las propiedades ópticas de estos materiales, se restringe a la zona de Brillouin, la cual engloba todas las posibles direcciones del espacio recíproco no redundantes.

Por otra parte, debido a la naturaleza Hermítica de la formulación de las ecuaciones de Maxwell en términos de los campos magnéticos (5). El problema se reduce a solucionar la ecuación de valores propios (5), la cual dará la dependencia de las frecuencias o energías de las ondas electromagnéticas en función del vector de onda.

En este trabajo se usará el método de la Matriz Transferencia que servirá para tener en cuenta la geometría periódica de la estructura y que proporcionará las soluciones mencionadas arriba.

4.2 ENERGÍA ELECTROMAGNÉTICA Y PRINCIPIO VARIACIONAL

Un modo tiende a concentrar su energía del campo eléctrico en regiones de alta constante dieléctrica. Este concepto es expresado a través del teorema variacional electromagnético, que es análogo al principio variacional en mecánica cuántica.

El valor propio más pequeño ω_0^2/c^2 , y por tanto el modo más bajo de frecuencia, corresponde al campo que minimiza el funcional:

$$u_f(\mathbf{H}) \triangleq \frac{(\mathbf{H}, \hat{\Theta} \mathbf{H})}{(\mathbf{H}, \mathbf{H})} \quad (8)$$

ω_0^2/c^2 es el mínimo de $u_f(\mathbf{H})$ sobre todos los patrones del campo concebible $\mathbf{H}$ (sujeto a la condición de transversalidad $\nabla \cdot \mathbf{H} = 0$).

Además de proporcionar una caracterización de los modos de $\hat{\Theta}$, el teorema variacional es también la fuente de las reglas acerca de los modos que se han mencionado anteriormente. Esto se ve más fácilmente cuando se escribe el funcional de energía en términos del campo eléctrico $\mathbf{E}$. Comenzando con un eigenmodo $\mathbf{H}$ que minimiza u_f , la expresión (8) se reescribe:

$$u_f(\mathbf{H}) = \frac{(\nabla \times \mathbf{E}, \nabla \times \mathbf{E})}{(\mathbf{E}, \varepsilon(\mathbf{r}) \mathbf{E})} = \frac{\int d^3 r |\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r})|^2}{\int d^3 r \varepsilon(\mathbf{r}) |\mathbf{E}(\mathbf{r})|^2} \quad (9)$$

De esta expresión, se puede ver que la manera de minimizar u_f es concentrar el campo eléctrico $\mathbf{E}$ en regiones de alta constante dieléctrica ε (maximizando así el denominador) y reducir al mínimo la cantidad de oscilaciones espaciales (minimizando así el numerador).

4.3 DESCRIPCIÓN DEL CRISTAL FOTÓNICO 1D ESTUDIADO

El cristal estudiado consta de una estructura periódica 1D compuesta por capas alternadas de diferentes materiales tales como aire y GaAs. (Fig. 2a) Se define el origen en el centro de la primer capa (con constante dieléctrica ε_1 y permeabilidad magnética μ_1) de espesor a con periodicidad $d = a+b$, donde b es el espesor de la capa del segundo material (con constante dieléctrica ε_2 y permeabilidad magnética μ_2) como se ilustra en la Fig. 2b; se considera al eje z como la dirección de crecimiento del cristal, así como la dirección de propagación.

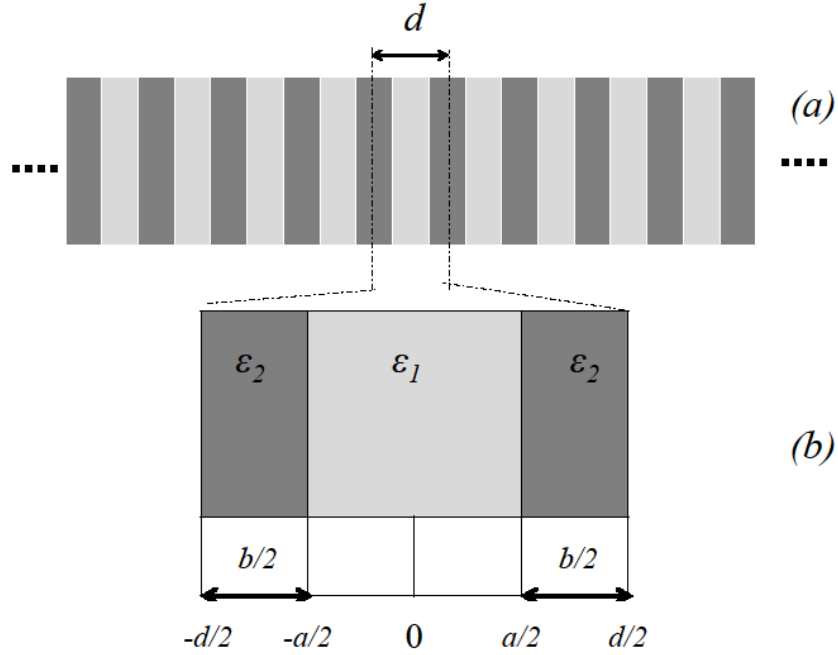


Figura 2. (a) Cristal fotónico 1D con periodicidad d , correspondiente al ancho de la celda unitaria. (b) Celda unitaria constituida de capas alternadas de aire con constante dieléctrica ϵ_1 y GaAs con constante dieléctrica ϵ_2 .

4.4 ECUACIÓN PARA EL CAMPO ELÉCTRICO

Las ecuaciones de Maxwell que describen el comportamiento del campo electromagnético en un medio lineal e isotrópico tienen la siguiente forma:

$$\nabla \cdot \vec{B} = 0 \quad (10a)$$

$$\nabla \times \vec{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \quad (10b)$$

$$\nabla \cdot \vec{D} = 0 \quad (10c)$$

$$\nabla \times \vec{H} = \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} \quad (10d)$$

Los vectores $\vec{D}$ y $\vec{H}$ se relacionan con los vectores $\vec{E}$ y $\vec{B}$ a través de las ecuaciones materiales

$$\vec{D} = \epsilon(\vec{r})\vec{E} \quad (11a)$$

$$\vec{B} = \mu(\vec{r})\vec{H} \quad (11b)$$

donde ϵ y μ son las constantes dieléctricas y la permeabilidad magnética de dicho medio.

Comencemos por escribir la ecuación de Maxwell que describe la propagación del campo eléctrico a través de un medio lineal e isotrópico.

Tomando el rotacional en (10b) tenemos:

$$\nabla \times \nabla \times \vec{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \nabla \times \vec{B}, \quad (12)$$

donde de (10d), (11a) y (11b) se tendrá que el $\nabla \times \vec{B}$ se puede escribir de la siguiente forma

$$\nabla \times \vec{B} = \frac{\mu\epsilon}{c} \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} + \frac{\nabla\mu}{\mu} \times \vec{B}. \quad (13)$$

Sustituyendo (13) en (12) se obtiene

$$\nabla \times \nabla \times \vec{E} + \frac{\mu\epsilon}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} - \frac{\nabla\mu}{\mu} \times (\nabla \times \vec{E}) = 0, \quad (14)$$

que luego de utilizar las propiedades

$$\nabla \times \nabla \times \vec{F} = \nabla(\nabla \cdot \vec{F}) - \nabla^2 \vec{F} \quad \text{y}$$

$$\nabla(\vec{F} \cdot \vec{G}) = (\vec{F} \cdot \nabla)\vec{G} + (\vec{G} \cdot \nabla)\vec{F} + \vec{F} \times (\nabla \times \vec{G}) + \vec{G} \times (\nabla \times \vec{F}),$$

se llega a la siguiente expresión

$$-\nabla^2 \vec{E} - \nabla \left[\frac{\nabla\mu\epsilon}{\mu\epsilon} \cdot \vec{E} \right] + (\vec{E} \cdot \nabla) \frac{\nabla\mu}{\mu} + \left[\frac{\nabla\mu}{\mu} \cdot \nabla \right] \vec{E} + \frac{\mu\epsilon}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} = 0, \quad (15)$$

donde finalmente, para un campo monocromático $\vec{E}(\vec{r}, t) = \vec{E}(\vec{r})e^{-i\omega t}$, la ecuación (15) toma la forma:

$$-\nabla^2 \vec{E} - \nabla \left[\frac{\nabla\mu\epsilon}{\mu\epsilon} \cdot \vec{E} \right] + (\vec{E} \cdot \nabla) \frac{\nabla\mu}{\mu} + \left[\frac{\nabla\mu}{\mu} \cdot \nabla \right] \vec{E} + \frac{\mu\epsilon}{c^2} \vec{E} = 0, \quad (16)$$

que corresponde a la ecuación general para el campo eléctrico que se propaga a través de un medio lineal e isotrópico.

Limitando ahora el cálculo para el caso del cristal fotónico 1D a lo largo de la dirección z, descrito por una constante dieléctrica periódica $\epsilon(z+d) = \epsilon(z)$ y una permeabilidad magnética periódica $\mu(z+d) = \mu(z)$, con el campo eléctrico polarizado linealmente de la forma $\vec{E}(z, t) = E(z)e^{-i\omega t} \hat{x}$ se tiene, partiendo de la ecuación (16) lo siguiente:

Para el primer término

$$\nabla^2 \vec{E} = \hat{e}_x \left[\frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] E(z) e^{-i\omega t} \quad (17)$$

para el segundo

$$\frac{\nabla \mu \varepsilon}{\mu \varepsilon} \cdot \vec{E} = \frac{1}{\mu \varepsilon} \left[\frac{\partial}{\partial x} (\mu \varepsilon) \right] E(z) e^{-i\omega t} = 0 \quad (18)$$

ya que μ y ε son funciones de z .

para el tercer término

$$(\vec{E} \cdot \nabla) \frac{\nabla \mu}{\mu} = E_x \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\nabla \mu}{\mu} \right) = 0 \quad (19)$$

y por último, para

$$\left[\frac{\nabla \mu}{\mu} \cdot \nabla \right] \vec{E} = \hat{e}_x \frac{e^{i\omega t}}{\mu} \left(\frac{\partial \mu}{\partial z} \right) \left(\frac{\partial E}{\partial z} \right) \quad (20)$$

Sustituyendo (20) y (17) en (16) se llega a

$$\frac{d}{dz} \left[\frac{1}{\mu} \frac{dE}{dz} \right] = -\varepsilon \left(\frac{\omega}{c} \right)^2 E. \quad (21)$$

Definiendo $n(z) = \sqrt{\varepsilon(z)}\sqrt{\mu(z)}$ y $Z(z) = \sqrt{\mu(z)}/\sqrt{\varepsilon(z)}$ tenemos

$$\frac{d}{dz} \left[\frac{1}{n(z)Z(z)} \frac{dE}{dz} \right] = -\frac{n(z)}{Z(z)} \frac{\omega^2}{c^2} E. \quad (22)$$

La ecuación (22) es la ecuación diferencial para el campo eléctrico asociada a este caso, donde $n(z)$ y $Z(z)$ son el índice de refracción y la impedancia respectivamente, para cada material.

La solución de la ecuación (22) para el campo eléctrico dentro de cada material, se obtiene tomando un punto arbitrario z_0 dentro de una de las capas. Se sabe que dentro de cada material $n(z) = cte$ y $Z(z) = cte.$, entonces la ecuación (22) se puede reescribir como:

$$\frac{d^2 E}{dz^2} + k^2 E(z) = 0, \quad (23)$$

donde $k = \frac{\omega}{c} |n|$ y cuya solución tiene la forma

$$E(z) = A \cos[k(z - z_0)] + B \sin[k(z - z_0)] \quad (24)$$

Utilizando las condiciones iniciales, $E(z)|_{z_0} = E(z_0)$ y $E'(z)|_{z_0} = \frac{dE}{dz} \Big|_{z_0}$

llegamos finalmente a la solución general para el campo eléctrico

$$E(z) = E(z_0) \cos[k(z - z_0)] + \frac{1}{k} \frac{dE}{dz} \Big|_{z_0} \sin[k(z - z_0)] \quad (25)$$

4.5 TÉCNICA DE LA MATRIZ TRANSFERENCIA

Para un PC compuesto de capas alternadas de dos diferentes materiales, la ecuación (22) debe ser resuelta asumiendo la continuidad del campo E y de la expresión $\frac{1}{n(z)Z(z)} \frac{dE}{dz}$, lo que significa que la función de dos componentes

$$\psi(z) = \begin{pmatrix} E(z) \\ \frac{1}{n(z)Z(z)} \frac{dE}{dz} \end{pmatrix}, \quad (26)$$

es continua a través del PC.

Definiendo

$$\begin{aligned} E(z_0) &= A \\ \frac{1}{n(z)Z(z)} \frac{dE}{dz} \Big|_{z_0} &= B \end{aligned} \quad (27)$$

la ecuación (25) se reescribe como

$$E(z) = A \cos[k(z - z_0)] + \frac{n(z)Z(z)}{k} B \sin[k(z - z_0)], \quad (28)$$

Nótese que

$$\psi(z_0) = \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}, \quad (29)$$

y de acuerdo con (26) se tiene

$$\psi(z) = \begin{pmatrix} \cos[k(z - z_0)] & \frac{n(z)Z(z)}{k} \sin[k(z - z_0)] \\ -\frac{k}{n(z)Z(z)} \sin[k(z - z_0)] & \cos[k(z - z_0)] \end{pmatrix} \psi(z_0), \quad (30)$$

de donde se define la matriz transferencia como

$$\mathbb{M}(z - z_0) = \begin{pmatrix} \cos[k(z - z_0)] & \frac{n(z)Z(z)}{k} \sin[k(z - z_0)] \\ -\frac{k}{n(z)Z(z)} \sin[k(z - z_0)] & \cos[k(z - z_0)] \end{pmatrix}, \quad (31)$$

entonces la condición (26) puede ser escrita convenientemente por medio de la matriz transferencia como:

$$\psi(z) = \mathbb{M}(z - z_0) \psi(z_0). \quad (32)$$

Nótese, que de esta expresión se ve claramente que si estoy en un punto z_0 cualquiera en una de las capas, por medio de la matriz $\mathbb{M}(z - z_0)$ puedo desplazarme y obtener como es el vector ψ en un punto z del PC.

De acuerdo con la figura 2b, tomando $z_0 = 0$ y $z = a/2$, en el medio 1 se tiene

$$\psi\left(\frac{a}{2}\right) = \mathbb{M}_1\left(\frac{a}{2}\right)\psi(0), \quad (33)$$

con

$$\mathbb{M}_1\left(\frac{a}{2}\right) = \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{k_1 a}{2}\right) & \frac{n_1 Z_1}{k_1} \sin\left(\frac{k_1 a}{2}\right) \\ -\frac{k_1}{n_1 Z_1} \sin\left(\frac{k_1 a}{2}\right) & \cos\left(\frac{k_1 a}{2}\right) \end{pmatrix}. \quad (34)$$

Para el medio 2 tomando $z_0 = a/2$ y $z = a + b/2$, se obtiene

$$\psi\left(\frac{a+b}{2}\right) = \mathbb{M}_2\left(\frac{b}{2}\right)\psi\left(\frac{a}{2}\right), \quad (35)$$

siendo

$$\psi\left(\frac{a+b}{2}\right) = \mathbb{M}_2\left(\frac{b}{2}\right)\mathbb{M}_1\left(\frac{a}{2}\right)\psi(0) = \mathbb{M}_T(a, b)\psi(0) \quad (36)$$

y

$$\mathbb{M}_2\left(\frac{b}{2}\right) = \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{k_2 b}{2}\right) & \frac{n_2 Z_2}{k_2} \sin\left(\frac{k_2 b}{2}\right) \\ -\frac{k_2}{n_2 Z_2} \sin\left(\frac{k_2 b}{2}\right) & \cos\left(\frac{k_2 b}{2}\right) \end{pmatrix}, \quad (37)$$

donde $\mathbb{M}_T(a, b)$ es la matriz transferencia que me conecta el medio 1 (de espesor a) con el medio 2 (de espesor b), conservando la continuidad de la función ψ y que se encuentra dada por:

$$\mathbb{M}_T(a, b) = \begin{pmatrix} P & Q \\ R & S \end{pmatrix}, \quad (38)$$

con

$$P = \cos\left(\frac{k_2 b}{2}\right) \cos\left(\frac{k_1 a}{2}\right) - \frac{n_2 Z_2}{n_1 Z_1} \frac{k_1}{k_2} \sin\left(\frac{k_2 b}{2}\right) \sin\left(\frac{k_1 a}{2}\right), \quad (39)$$

$$Q = \frac{n_1 Z_1}{k_1} \sin\left(\frac{k_1 a}{2}\right) \cos\left(\frac{k_2 b}{2}\right) + \frac{n_2 Z_2}{k_2} \sin\left(\frac{k_2 b}{2}\right) \cos\left(\frac{k_1 a}{2}\right), \quad (40)$$

$$R = -\frac{k_2}{n_2 Z_2} \sin\left(\frac{k_2 b}{2}\right) \cos\left(\frac{k_1 a}{2}\right) - \frac{k_1}{n_1 Z_1} \sin\left(\frac{k_1 a}{2}\right) \cos\left(\frac{k_2 b}{2}\right), \quad (41)$$

$$S = \cos\left(\frac{k_2 b}{2}\right) \cos\left(\frac{k_1 a}{2}\right) - \frac{n_1 Z_1}{n_2 Z_2} \frac{k_2}{k_1} \sin\left(\frac{k_1 a}{2}\right) \sin\left(\frac{k_2 b}{2}\right), \quad (42)$$

donde $k_1 = \frac{\omega}{c} |n_1|$ y $k_2 = \frac{\omega}{c} |n_2|$,

y

$$\det|\mathbb{M}_T| = PS - QR = 1. \quad (43)$$

Similarmente, para $z = -\frac{a+b}{2}$ y $z_0 = -\frac{a}{2}$ se obtiene

$$\psi\left(-\frac{a+b}{2}\right) = \mathbb{M}_2\left(-\frac{b}{2}\right) \psi\left(-\frac{a}{2}\right) = \mathbb{M}_2\left(-\frac{b}{2}\right) \mathbb{M}_1\left(-\frac{a}{2}\right) \psi(0), \quad (44)$$

y consecuentemente

$$\psi\left(-\frac{a+b}{2}\right) = \mathbb{M}_T(-a, -b) \psi(0) = \begin{pmatrix} P & -Q \\ -R & S \end{pmatrix} \psi(0), \quad (45)$$

Como el PC es una estructura periódica, permite definir simetrías de traslación en la cual el sistema es invariante, lo que permite hacer uso de la condición de Bloch

$$\psi(z + d) = e^{iqd} \psi(z), \quad (46)$$

donde $d = a + b$ es el período y q es elegido en la primera zona de Brillouin (BZ) de la superred fotónica, $-\frac{\pi}{d} \leq q \leq \frac{\pi}{d}$.

Haciendo $\lambda = e^{iqd}$ y $z = -\frac{a+b}{2} = -\frac{d}{2}$ se obtiene

$$\psi\left(\frac{d}{2}\right) = \lambda \psi\left(-\frac{d}{2}\right), \quad (47)$$

Y equivalentemente

$$\begin{pmatrix} P & Q \\ R & S \end{pmatrix} \psi_0 = \lambda \begin{pmatrix} P & -Q \\ -R & S \end{pmatrix} \psi_0 \quad (48)$$

La ecuación (48) tiene solución si:

$$\det \begin{vmatrix} P(1 - \lambda) & Q(1 + \lambda) \\ R(1 + \lambda) & S(1 - \lambda) \end{vmatrix} = 0, \quad (49)$$

es decir si

$$(PS - QR)(1 + \lambda^2) = 2\lambda(PS + QR). \quad (50)$$

Como $PS - QR = 1$

se tendrá que

$$\frac{1}{2} [\lambda + \lambda^{-1}] = PS + QR, \quad (51)$$

con lo cual se llega finalmente a

$$\text{Cos}(qd) = PS + QR, \quad (52)$$

obteniéndose finalmente las dos relaciones equivalentes

$$\text{Sen}^2\left(\frac{qd}{2}\right) = -QR, \quad (53)$$

$$\text{Cos}^2\left(\frac{qd}{2}\right) = PS. \quad (54)$$

Las soluciones de estas dos ecuaciones tienen como resultado la relación de dispersión $\omega = \omega(q)$ o estructura de bandas del PC.

4.6 ECUACIÓN PARA EL CAMPO ELÉCTRICO EN EL CASO EN QUE n_2 ES IMAGINARIO PURO.

En este caso se supone $\mathbf{E}(\mathbf{z})$ de la forma:

$$E(z) = A \text{Cosh}[k(z - z_0)] + \frac{n(z)Z(z)}{k} B \text{Senh}[k(z - z_0)], \quad (55)$$

y se realizan en forma análoga todos los cálculos desarrollados en la sección anterior, teniendo en cuenta que cuando la capa n_2 toma el valor de un imaginario puro,

$$k_2 = \frac{\omega}{c} \sqrt{n_i^2}, \text{ donde } n_i = \text{Im}[n_2].$$

Las componentes de la matriz son en este caso

$$P = \text{Cosh}\left(\frac{k_2 b}{2}\right) \text{Cos}\left(\frac{k_1 a}{2}\right) - \frac{n_2 Z_2}{n_1 Z_1} \frac{k_1}{k_2} \text{Senh}\left(\frac{k_2 b}{2}\right) \text{Sen}\left(\frac{k_1 a}{2}\right), \quad (56)$$

$$Q = \frac{n_1 Z_1}{k_1} \text{Sen}\left(\frac{k_1 a}{2}\right) \text{Cosh}\left(\frac{k_2 b}{2}\right) + \frac{n_2 Z_2}{k_2} \text{Senh}\left(\frac{k_2 b}{2}\right) \text{Cos}\left(\frac{k_1 a}{2}\right), \quad (57)$$

$$R = \frac{k_2}{n_2 Z_2} \text{Senh}\left(\frac{k_2 b}{2}\right) \text{Cos}\left(\frac{k_1 a}{2}\right) - \frac{k_1}{n_1 Z_1} \text{Sen}\left(\frac{k_1 a}{2}\right) \text{Cosh}\left(\frac{k_2 b}{2}\right), \quad (58)$$

$$S = \text{Cosh}\left(\frac{k_2 b}{2}\right) \text{Cos}\left(\frac{k_1 a}{2}\right) + \frac{n_1 Z_1}{n_2 Z_2} \frac{k_2}{k_1} \text{Senh}\left(\frac{k_2 b}{2}\right) \text{Sen}\left(\frac{k_1 a}{2}\right). \quad (59)$$

4.7 EFECTOS DE LA TEMPERATURA Y LA PRESIÓN HIDROSTÁTICA SOBRE LA ESTRUCTURA DE BANDAS

Del estudio realizado por Samara¹⁵ y Elabsy¹⁶ donde se describe el comportamiento de la constante dieléctrica y el espesor de la capa de GaAs con presión y temperatura, se obtuvieron las siguientes ecuaciones.

Para el espesor de la capa de GaAs se tiene

$$b(P) = b_0[1 - (S_{11} + 2S_{12})P] \quad (60)$$

donde $b(P)$ es el espesor de la capa de GaAs en función de la presión, $S_{11} = 1.16 \times 10^{-3} \text{ kbar}^{-1}$ y $S_{12} = -3.7 \times 10^{-4} \text{ kbar}^{-1}$ son las constantes elásticas del GaAs y b_0 es el espesor original de la capa.

La expresión que describe este comportamiento de la constante dieléctrica con presión y temperatura es

$$\varepsilon_2(P, T) = \left(\varepsilon_0 + A e^{T/T_0} \right) e^{-\alpha P} \quad (61)$$

donde $\varepsilon_0 = 12.446$, $A = 0.21125$, $T_0 = 240.7 \text{ K}$ y $\alpha = 0.00173 \text{ kbar}^{-1}$.

De otro lado, al agregar n-dopantes en el GaAs, se espera que se modifique la respuesta del sistema y se comporte como un plasma, entendiendo como tal un sistema donde los portadores de carga q y masa m son libres. Para la frecuencia de la onda que se propaga en el plasma se tiene la siguiente relación de dispersión

$$\omega^2 = \omega_p^2 + v^2 k^2 \quad (62)$$

donde

$$\omega_p = \sqrt{\frac{n e^2}{\varepsilon_2(P, T) \varepsilon_0 m^*}} \quad (63)$$

es una frecuencia determinada por los parámetros característicos del plasma (masa efectiva y densidad de portadores de carga), razón por la cual se denomina frecuencia del plasma.

Para el GaAs se ha usado la constante dieléctrica dependiente de la frecuencia dada por¹⁷

$$\varepsilon'_2(P, T, \omega) = \varepsilon_2(P, T) \left(1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \right) \quad (64)$$

De la relación de dispersión (64), se tiene que si $\omega > \omega_p$, $\varepsilon(\omega) > 0$.

Del estudio realizado por A. Raymond¹⁸, P. Pfeffer¹⁹ y Monroe²⁰ donde se describe el comportamiento de la masa efectiva m_n^Γ como una función de la densidad de carga y la presión para el GaAs se tiene la siguiente expresión

$$m_n^\Gamma = 0.067 \left[\frac{1+7.4 \times 10^{-3} P \text{ kbar}^{-1}}{1-3.9 \times 10^{-15} n^{2/3} \text{ cm}^{-2}} \right] \quad (65)$$

La variación de la densidad de portadores con la presión, se obtiene derivando n (número de portadores N por unidad de volumen V) respecto al volumen y haciendo uso de la ecuación (60) como sigue

$$n = \frac{N}{V} \quad (66)$$

al derivar se obtiene

$$\int_{n_0}^{n_f} \frac{dn}{n} = - \frac{1}{z_0} \int_{z_0}^{z_f} dz, \quad (67)$$

como se considera una de las dimensiones de la capa del GaAs de espesor b y las otras dos dimensiones tendiendo a infinito, se tienen en cuenta sólo los cambios longitudinales en el espesor b de la capa; de modo que z_f se refiere al espesor de la capa de GaAs en función de la presión como sigue

$$n_f = n_0 e^{\frac{b(P)}{b_0}} \quad (68)$$

La expresión anterior expresa la concentración o densidad de carga en términos de la concentración inicial n_0 , $b(P)$ que es el espesor de la capa de GaAs en función de la presión y b_0 el espesor inicial de la capa de GaAs.

5. RESULTADOS DEL CRISTAL FOTÓNICO 1D COMPUESTO DE CAPAS ALTERNADAS DE GaAs y aire.

La estructura de bandas de un cristal fotónico 1D de período d es mostrada en la figura 3 para dos valores diferentes de los espesores de las capas, ilustrando la presencia de gaps en la estructura de bandas. Estas gráficas concuerdan con los resultados obtenidos por S. B. Cavalcanti *et al*¹³.

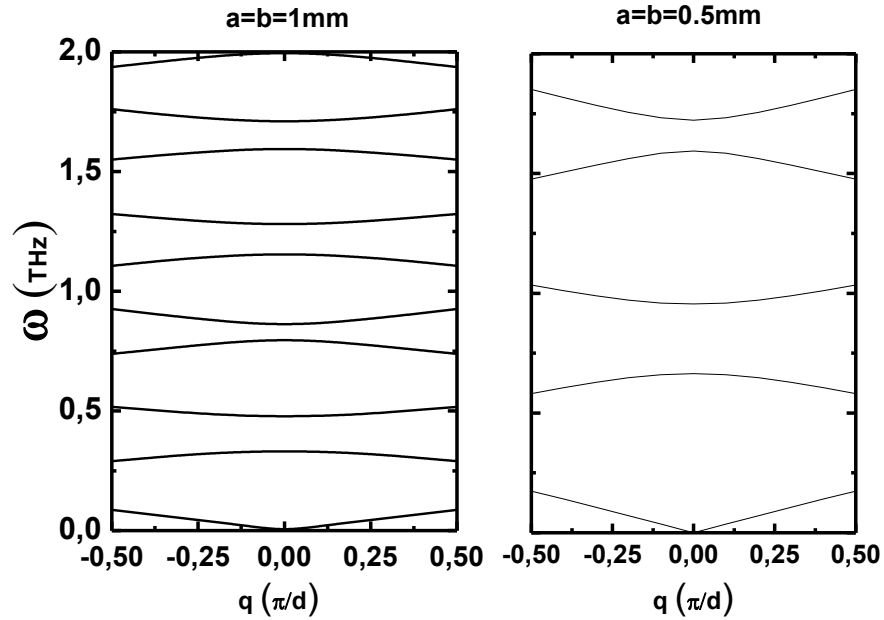


Figura 3. Estructura de bandas fotónicas ω vs q , de una superred (período d) con igual capas alternadas de aire (con espesor a) y GaAs (espesor b e índice de refracción $n_2 = \sqrt{\epsilon_2} \approx 3.6$).

Como se dijo anteriormente, para analizar los efectos de la presión y la temperatura sobre la PBS, se hizo uso de las ecuaciones presentadas por Elabsy y Samara, para la constante dieléctrica y el espesor de la capa en función de P y de T como se estableció en las ecuaciones (60) y (61).

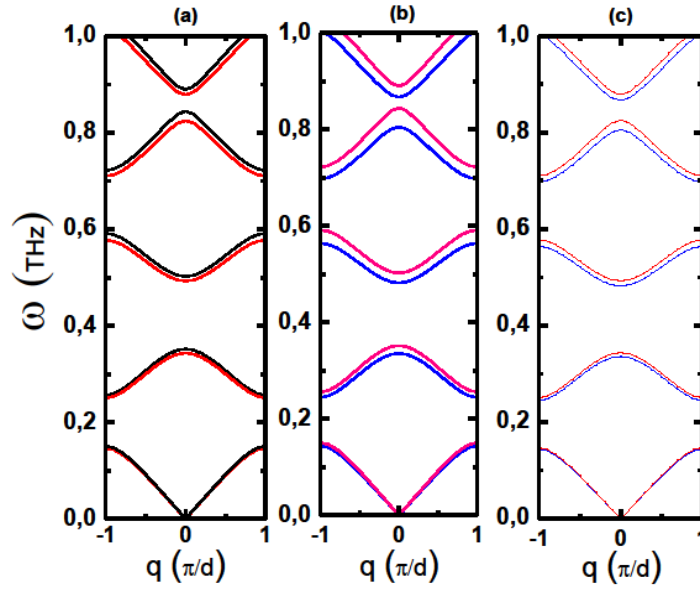


Figura 4. Estructura de bandas fotónica ω vs q , de una superred (período d) con iguales capas alternadas de aire (con espesor $a=1\text{mm}$) y GaAs (espesor $b=1\text{mm}$). Panel (a) es para $P=40\text{kbar}$ con $T=0$ (línea negra) y con $T=340\text{K}$ (línea roja), ambas curvas prácticamente coinciden. Panel (b) es para $T=0$ con $P=0$ (línea azul) y con $P=40\text{kbar}$ (línea purpura). Panel (c) es para $T=0$ con $P=0$ (línea azul) y para $T=340\text{K}$ con $P=40\text{kbar}$ (línea roja).

En la figura 4 se presentan en tres paneles los efectos de temperatura y presión hidrostática aplicada en una estructura 1D periódica hecha de capas alternadas de aire y GaAs, los valores utilizados fueron escogidos de acuerdo con las referencias 15 y 16. El panel (a) es dedicado a mostrar los efectos de la temperatura para un valor dado de la presión hidrostática ($P = 40\text{kbar}$). El panel (b) es para contrastar los efectos de la presión hidrostática aplicada para un valor dado de la temperatura ($T = 0$). El panel (c) es para contrastar los efectos combinados de temperatura y presión hidrostática aplicada. Es notorio en el panel (a) que el efecto de la temperatura sobre la PBS da como resultado un corrimiento a menores frecuencias, ésta dependencia es despreciable ya que ambas curvas prácticamente coinciden. Un efecto contrario se observa en el panel (b), donde la PBS se desplaza a regiones de mayores frecuencias a medida que se aumenta la presión. La variación resultante ocurre en el panel (c) donde se observa claramente que el efecto de la presión sobre la constante dieléctrica es mayor que el de la temperatura, debido al desplazamiento que sufre la PBS a mayores frecuencias.

Tabla 2. Valores de la constante dieléctrica obtenidos a partir de la ecuación 61 para los valores de P y T usados en la Fig. 4.

Temperatura (K)	Presión (kbar)	$\epsilon(P, T)$
0	0	12.66
0	40	11.81
340	0	13.31
340	40	12.42

De estos valores se observa claramente que el efecto de la presión hidrostática es mayor que el de la temperatura sobre la constante dieléctrica. Como era de esperarse una disminución en la constante dieléctrica por aumento en la presión trae consigo un desplazamiento a mayores frecuencias de la PBS, resultado que está de acuerdo con el principio variacional³.

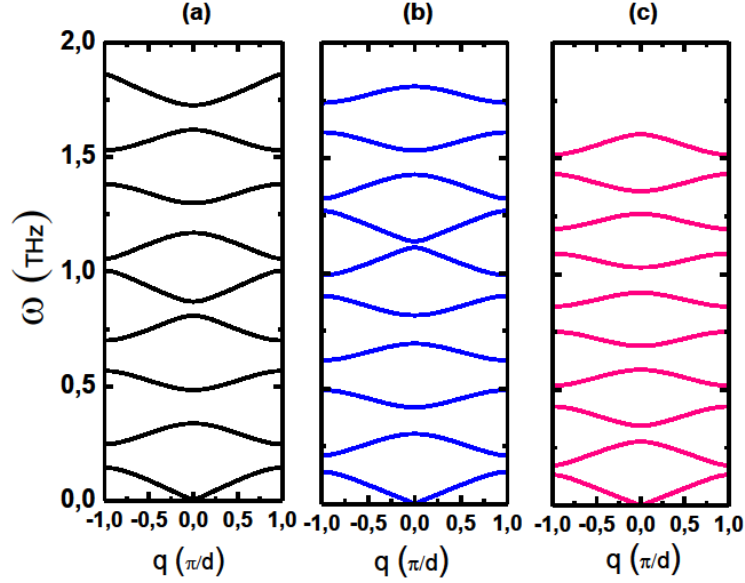


Figura 5. Estructura de bandas fotónica ω vs q , de una superred de capas alternadas de aire y GaAs. Panel (a) es para $a=b=1\text{mm}$; Panel (b) es para $a=0.8\text{mm}$ y $b=1.2\text{mm}$, y Panel (c) es para $a=0.5\text{mm}$ y $b=1.5\text{mm}$. Todos los paneles fueron realizados con $T=340\text{K}$ y $P=40\text{kbar}$.

En la figura 5 se presentan las modificaciones introducidas en la PBS, cuando son usados diferentes espesores a y b para las capas. Se ve claramente que, para capas de aire ($a=0.5\text{mm}$) más estrechas que el espesor de las de GaAs ($b=1.5\text{mm}$), las correspondientes curvas de dispersión ω vs q se hacen más planas y los band gaps en el borde de la zona de Brillouin son diferentes en comparación al caso de igual espesor de las capas, también se observa un desplazamiento a menores energías de la PBS.

En este caso fue ampliado el espesor de la capa de mayor constante dieléctrica y disminuido el de menor constante, manteniéndose constante el período del cristal para realizar la comparación.

Al ampliar el espesor del material con mayor constante dieléctrica, según el principio variacional el campo eléctrico tenderá a concentrarse en esta región minimizando así la energía, resultado con el que concuerda la figura 5 y que cumple completamente con este principio.

En el trabajo presentado por S. B. Cavalcanti *et al.*¹³, los autores han encontrado que para valores particulares de la razón $\frac{b}{a}$ entre los espesores de las capas no solo ocurre un aplanamiento de las bandas, sino también que se presenta el efecto de toque de banda (band-touching effect) en el centro de la BZ, también llamado gap nulo. Este toque de

banda ocurre cuando se cumple la relación $\frac{b}{a} = \frac{n_1 N_2}{n_2 N_1}$, donde b y a son los espesores de las capas, n_1 y n_2 son los respectivos índices de refracción y N_1 y N_2 son enteros que se asocian con el primer o segundo punto de gap nulo. Esta relación se cumple cuando $b = 1.4mm$ y $a = 5mm$.

A continuación, estudiamos el caso de una superred fotónica con capas alternadas de dos diferentes materiales con n_1 positivo e independiente de la frecuencia (nuevamente, el material de la capa 1 es aire con $n_1=1$), y para el material de la capa 2, el índice de refracción se toma dependiente de la frecuencia $n_2(\omega)$ lo que implica que puede tomar un valor negativo, positivo e imaginario puro dependiendo del rango de frecuencia que se trabaje. La respuesta del medio es esencialmente descrito por la permitividad dieléctrica de la capa 2 dependiente de la frecuencia (ω) modelada tipo Drude y descrita por la ecuación (64).

Para este propósito antes de realizar algún cálculo numérico, se testó nuestro programa para reproducir los resultados del trabajo presentado por S. B. Cavalcanti *et al*¹⁴, donde se realiza un estudio de un cristal fotónico 1D compuesto de dos capas caracterizadas por dos índices de refracción n_1 y n_2 que pueden tomar valores positivos o negativos. Estos autores encontraron puntos de gap nulo para valores proporcionales del espesor de cada capa y caracterizaron gaps tipo no-Bragg que se presentan en regiones de frecuencia donde el índice de refracción promedio es nulo, tal como se muestra en la Fig. 6, en perfecto acuerdo con los resultados de las figuras 2 y 3 en la referencia 14.

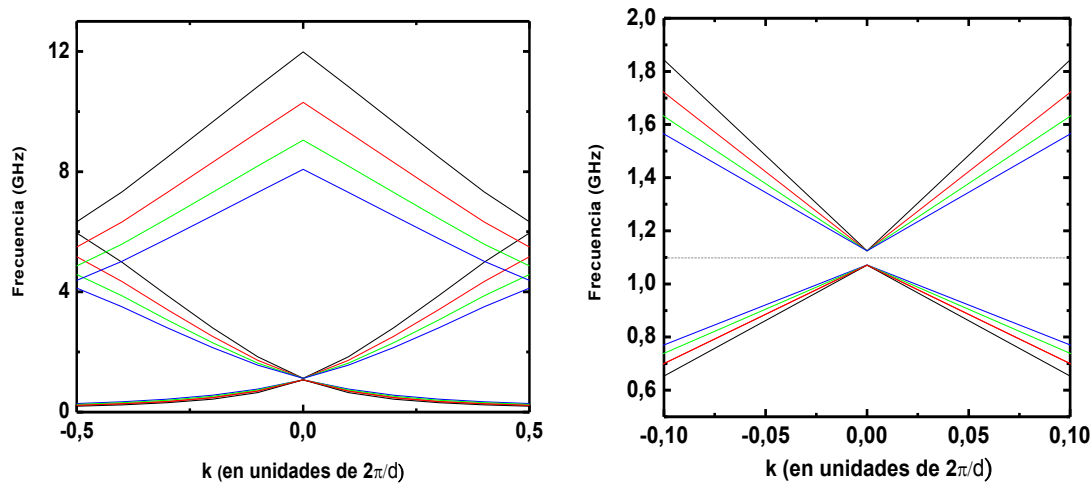


Figura 6. Curvas de dispersión para $a/b=1$. Las líneas negra, roja, verde y azul corresponden a $a=12, 14, 16$ y 18 mm respectivamente. En cada caso, se observan las tres bandas que están alrededor y por encima del $\langle n \rangle = 0$ gap. La segunda gráfica presenta el zoom del $\langle n \rangle = 0$ gap exhibiendo su invarianza.

En la figura 7 se presenta el índice de refracción n_2 en función de la frecuencia, con $\mu_2 = 1$ y $\varepsilon_2(\omega)$ descrito por la ecuación (64), ilustrando los dos posibles valores que puede tomar n_2 , que son imaginario puro en el caso en que ε y μ tienen signos opuestos y el caso usual

en el que el índice de refracción es positivo para ϵ y μ ambos positivos. El punto donde el índice de refracción se anula, corresponde al punto donde la frecuencia del plasma (ω_p) y la frecuencia (ω) coinciden.

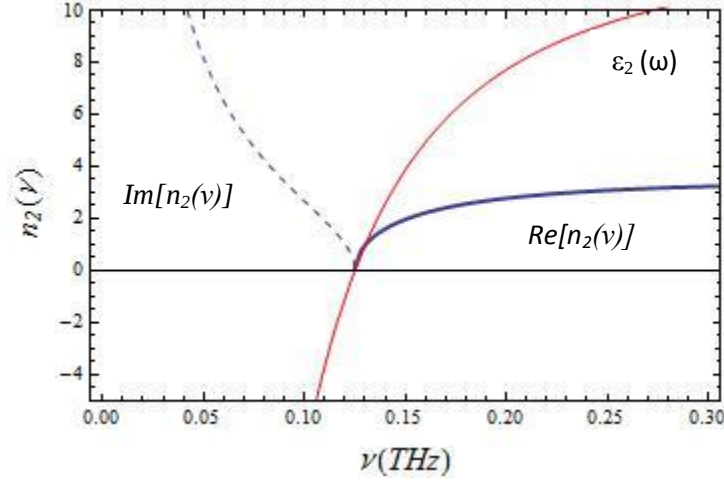


Figura 7. Índice de refracción dependiente de la frecuencia de acuerdo a la permitividad dieléctrica modelada tipo Drude.

En el caso de capas alternadas de índices de refracción positivo e imaginario puro (n_1 y n_2 respectivamente), se hizo uso de las ecuaciones presentadas en la sección (4.6) del marco teórico. En la figura 8 se presentan los resultados obtenidos en la respuesta óptica del PC debido a los efectos de n-dopantes en el GaAs, en el caso en que la frecuencia es menor a la frecuencia del plasma (n_2 imaginario puro) y mayor (n_2 real positivo). Los valores usados para la frecuencia del plasma fueron 0.5, 0.785, 0.942, 1.1, 1.3 y 1.5 THz que corresponden a un rango de concentraciones entre $10^{19} m^{-3}$ y $10^{20} m^{-3}$, escogidos de acuerdo con las referencias 10 y 12.

Se observa que para valores de ω muy cercanos a la frecuencia del plasma el gap tiende a cerrarse. La línea azul indica los valores de $\nu_0 = \omega_0/2\pi$ que corresponden a aquellos valores de la frecuencia del plasma nombrados anteriormente. Obsérvese que ésta es la región donde el índice de refracción promedio es nulo.

La figura 8, muestra bandas fotónicas por encima y por debajo del valor de frecuencia ν_0 . Nótese que para las bandas que se encuentran por encima de la frecuencia del plasma donde el índice de refracción es real aparecen gaps usuales de Bragg y para valores de frecuencia menores a la frecuencia del plasma, no se presenta regularidad en la PBS. De otro lado, se observa como era de esperarse el corrimiento de la PBS hacia frecuencias más altas causado por la disminución de la constante dieléctrica debido al aumento de la concentración de portadores.

Para considerar los efectos de la presión sobre la frecuencia del plasma, se usaron las ecuaciones 65 y 68 que describen el comportamiento de la masa efectiva y la densidad de los portadores de carga respecto a la presión. En nuestros cálculos, se tomó la densidad de

los portadores de carga inicial $n_0 = 1.64231 \times 10^{20} m^{-3}$ que corresponde a la frecuencia del plasma $\omega_p = 0.785 THz$. Al aumentar la presión se encuentra que la frecuencia del plasma disminuye, obteniéndose 0.7748 y 0.7284 THz para $P = 10kbar$ y $P = 40kbar$, respectivamente.

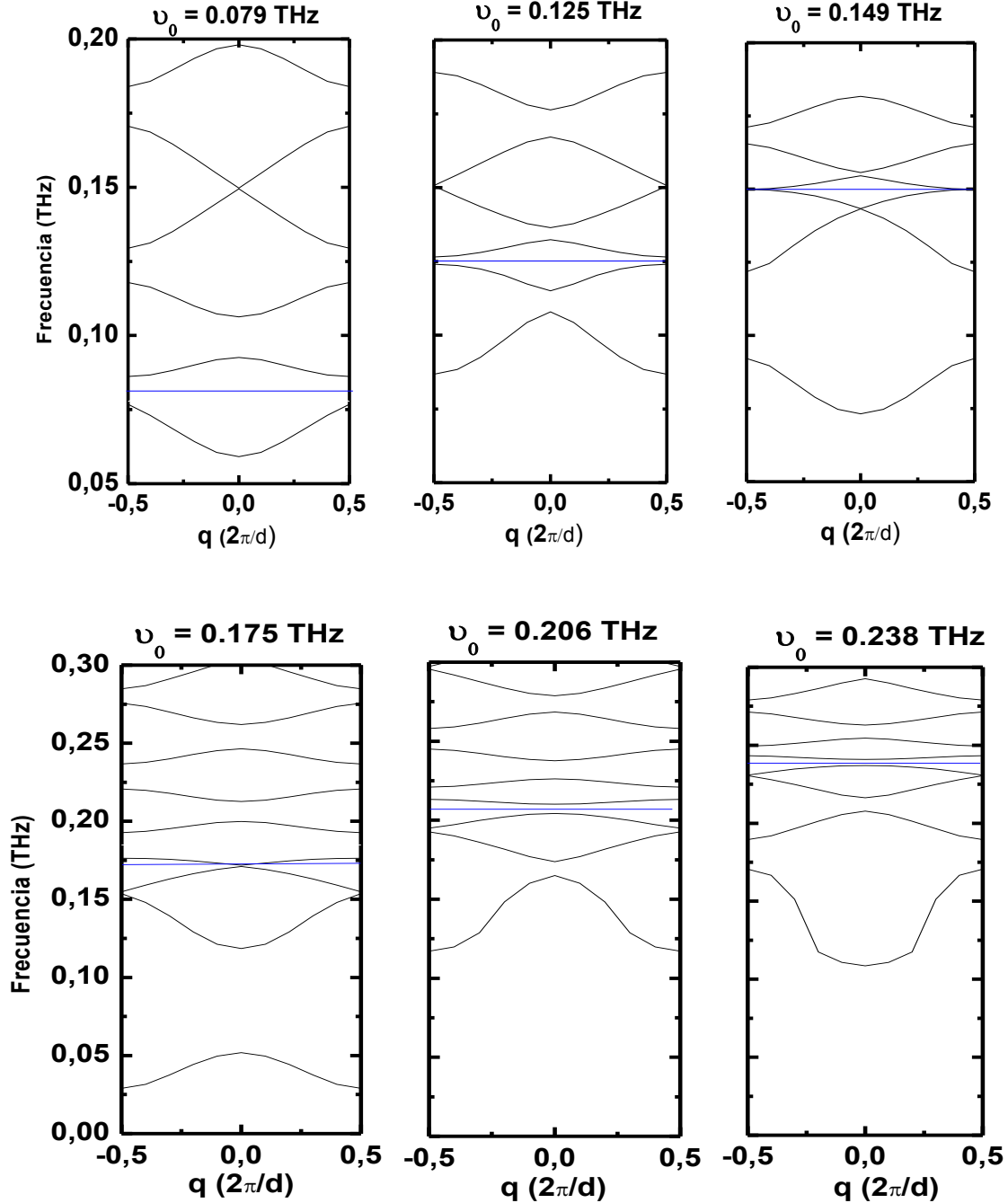


Figura 8. Estructura de bandas fotónicas ν vs q , con $\nu = \omega/2\pi$ de una superred compuesta de capas alternadas de aire y GaAs. Se presentan los resultados para diferentes valores de ω_p . Todos los paneles son para $a=b=1mm$.

En la Fig. 9 se muestra el comportamiento de la constante dieléctrica $\epsilon_2(P, T, \omega)$ en función de la frecuencia del plasma, la cual a su vez es modificada por la presión de acuerdo con la expresión 64.

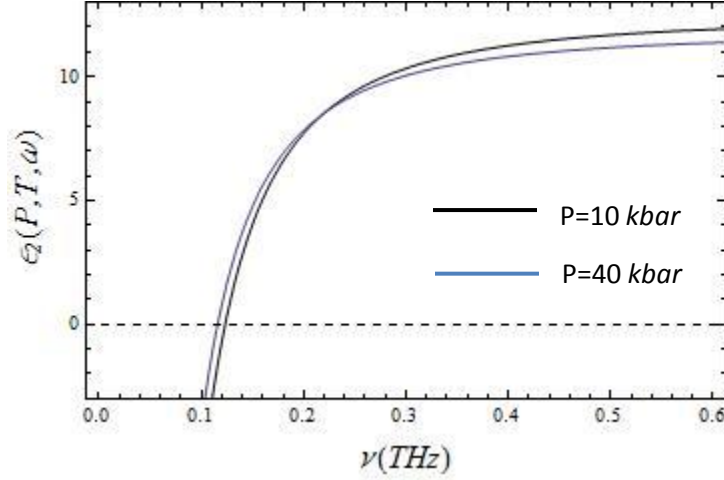


Figura 9. Comportamiento de la constante dieléctrica en el caso en que la frecuencia del plasma es variada con la presión.

Obsérvese, que para valores de frecuencia $\nu = 0.1233 \text{ THz}$ y $\nu = 0.1159 \text{ THz}$, la constante dieléctrica se hace cero, es decir, en ésta región el índice de refracción promedio es nulo. Para un valor de frecuencia $\nu = 0.22 \text{ THz}$, la constante dieléctrica para $P = 10 \text{ kbar}$ y $P = 40 \text{ kbar}$ es la misma; y para valores mayores, la constante dieléctrica a $P = 10 \text{ kbar}$ es mayor a $P = 40 \text{ kbar}$.

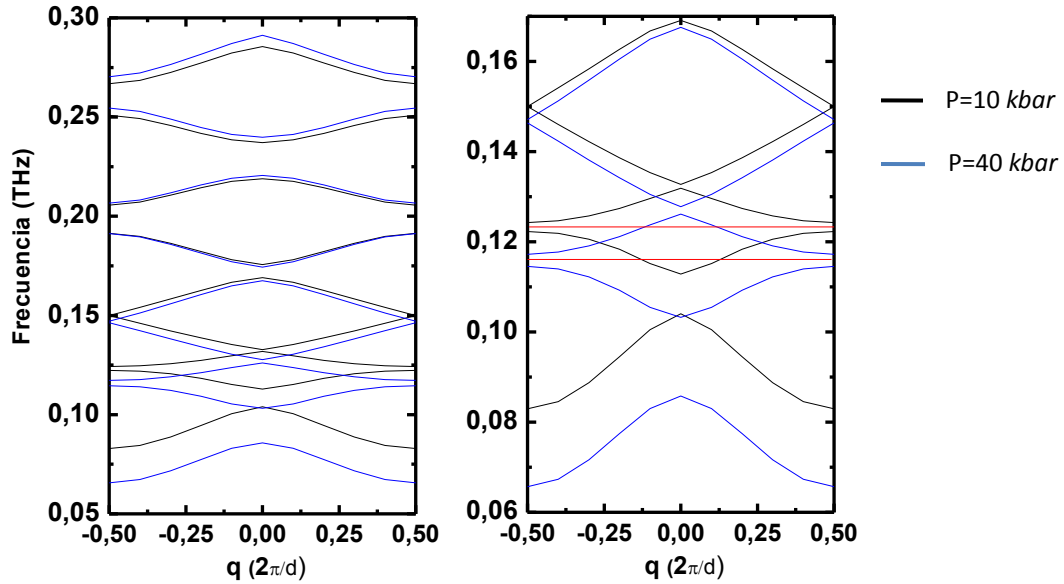


Figura 10. Estructura de bandas fotónicas ν vs q , con $\nu = \omega/2\pi$ de una superred compuesta de capas alternadas de aire y GaAs con $a=b=1\text{mm}$. Se presentan los resultados de variar la ω_p con la presión, la línea negra es para $P=10\text{kbar}$ y la línea azul para $P=40\text{kbar}$. En el panel (b) se ha realizado el zoom del primer gráfico indicando con dos líneas rojas los valores de ν donde el índice de refracción en promedio es nulo.

Como es de esperarse, éste comportamiento es reflejado en la PBS como se muestra en la Fig. 10. En la región donde el índice de refracción en promedio es nulo, $\nu = 0.1233 \text{ THz}$ y $\nu = 0.1159 \text{ THz}$ el gap tiende a cerrarse, comportamiento que también fue observado en la Fig. 8. En un valor de frecuencia $\nu = 0.22 \text{ THz}$ las bandas de energía prácticamente coinciden, región donde la constante dieléctrica para ambos valores de presión es la misma. Finalmente, para valores mayores a ésta frecuencia, donde las constantes dieléctricas se invierten, las bandas de energía a $P = 10 \text{ kbar}$ pasan a estar por encima de aquellas cuando $P = 40 \text{ kbar}$, observándose en ambos casos que la PBS se corre a frecuencias más bajas donde la constante dieléctrica es mayor por efectos de la presión aplicada.

6. RESULTADOS DEL CRISTAL FOTÓNICO 1D COMPUESTO DE CAPAS ALTERNADAS DE Ta_2O_5 y aire.

El Coltan es un mineral que es empleado para el desarrollo de dispositivos usados en alta tecnología. Procede de la abreviatura de columbita y tantalita, de donde se extraen principalmente el pentóxido de Tántalo (Ta_2O_5) y el pentóxido de Niobio (Nb_2O_5) utilizados en aparatos electrónicos, centrales atómicas, misiles, fibra óptica, entre otros. El pentóxido de Tántalo Ta_2O_5 es conocido como un material óptico que tiene un alto índice de refracción ($n > 2$), una excelente transparencia, estabilidad térmica y química²¹⁻²³.

Nuestro interés, es estudiar el cristal fotónico compuesto de capas alternadas de Ta_2O_5 y aire, y observar el comportamiento de la PBS en materiales de alta constante dieléctrica cuyo índice de refracción varía con la frecuencia.

Para realizar este estudio, se recurrió a la base de datos **refractiveindex.info**, la cual me proporciona información de cómo cambia el índice de refracción de este material con la longitud de onda, tal como se muestra en la figura 11.

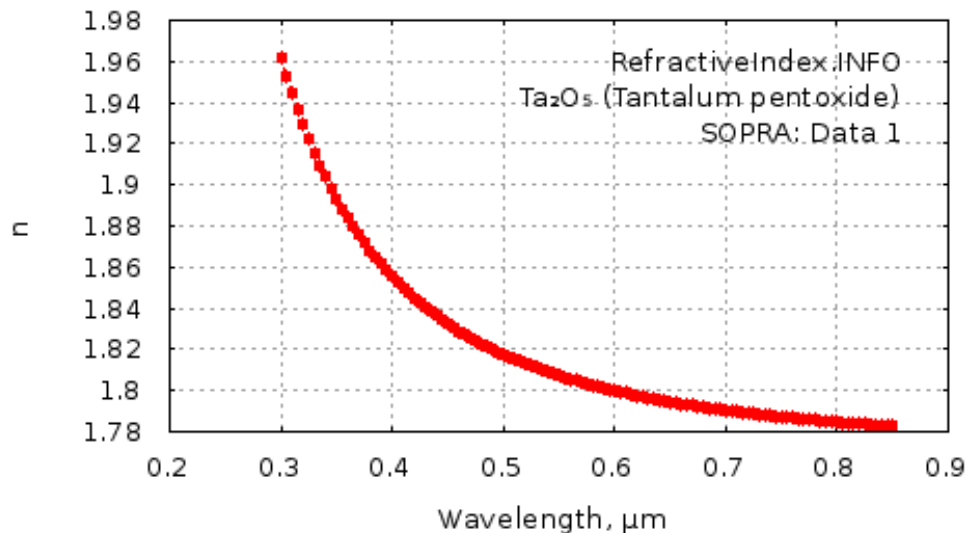


Figura 11. Comportamiento del índice de refracción del Ta_2O_5 respecto a la longitud de onda. (Imagen tomada de la base de datos refractiveindex.info).

Este gráfico describe el comportamiento del índice de refracción en un intervalo de longitud de onda entre 300 nm y 850 nm respectivamente. Se puede observar que a bajas longitudes de onda, es decir, a altas frecuencias el índice de refracción de este material es elevado.

Mediante la ecuación de Sellmeier^{24, 25}, utilizada para determinar la dispersión de la luz en un medio refractivo, se encuentra que la dependencia del índice de refracción con la longitud de onda esta dada por:

$$n^2(\lambda) = \frac{\lambda^2 + 0.4762658 \lambda^2 - 0.0109136}{0.4762658 \lambda^2 - 0.0109136} \quad (69)$$

A partir de esta ecuación expresada en términos de la frecuencia ω , presentamos la estructura de bandas de un cristal fotónico 1D formado por Ta_2O_5 y aire.

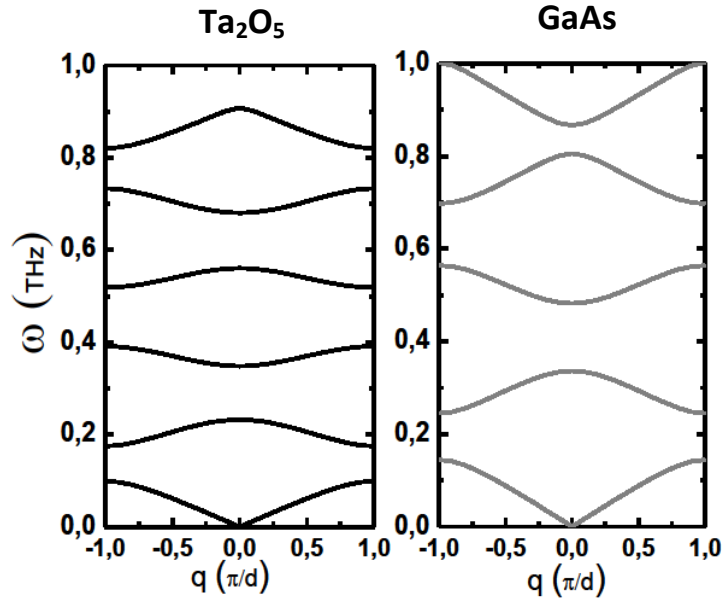


Figura 12. Panel (a), muestra la estructura de bandas del PC constituido por Ta_2O_5 y aire. Panel (b), muestra la PBS del PC constituido por GaAs y aire. Ambas curvas son para $a=b=1\text{mm}$.

En la figura 12 se presenta la PBS de una superred de período d con iguales capas alternadas de aire (con espesor a) y Ta_2O_5 (de espesor b y constante dieléctrica $\varepsilon = 27$); al comparar esta PBS con la del GaAs (panel b) se observa un aplanamiento de las bandas y un desplazamiento a menores energías. Es de esperarse este comportamiento debido a que el campo tiende a concentrarse en regiones de alta constante dieléctrica minimizando así la energía.

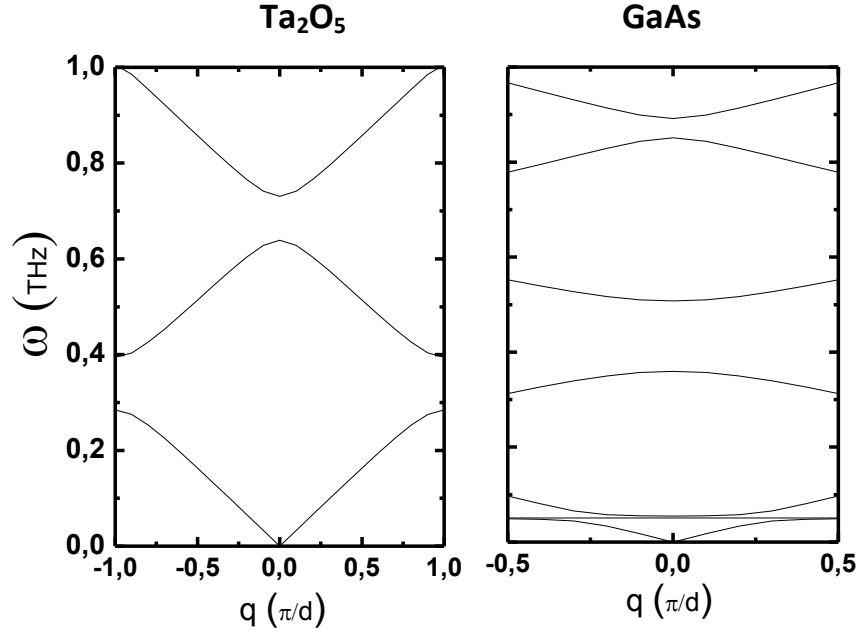


Figura 13. Panel (a), muestra la estructura de bandas del PC constituido por Ta_2O_5 y aire, con el índice de refracción variando con la frecuencia.. Panel (b), muestra la PBS del PC constituido por GaAs y aire también considerando la variación del índice de refracción con la frecuencia.

Finalmente, en la Fig. 13 para comparar cómo cambia la PBS cuando el índice de refracción varía con la frecuencia, la PBS del Ta_2O_5 sufre un desplazamiento a mayores frecuencias disminuyendo la cantidad de bandas y aumentando el rango de frecuencia en el cual la propagación de la onda es permitida. Esta figura se contrasta también con el caso en que el índice de refracción del GaAs varía con la frecuencia de acuerdo con la expresión 70 tomada de la página [refractiveindex.info](#)

$$n^2 = C_1 + \frac{C_2 \lambda^2}{\lambda^2 - C_3} + \frac{C_4 \lambda^2}{\lambda^2 - C_5}, \quad (70)$$

donde $C_1=3.5$, $C_2=7.4969$, $C_3=0.4082$, $C_4=1.9347$ y $C_5=37.17$.

Se observa en esta figura que para el GaAs aparece un gap nulo en $\omega=0.055THz$ aproximadamente, ya que a esta frecuencia la constante dieléctrica es nula.

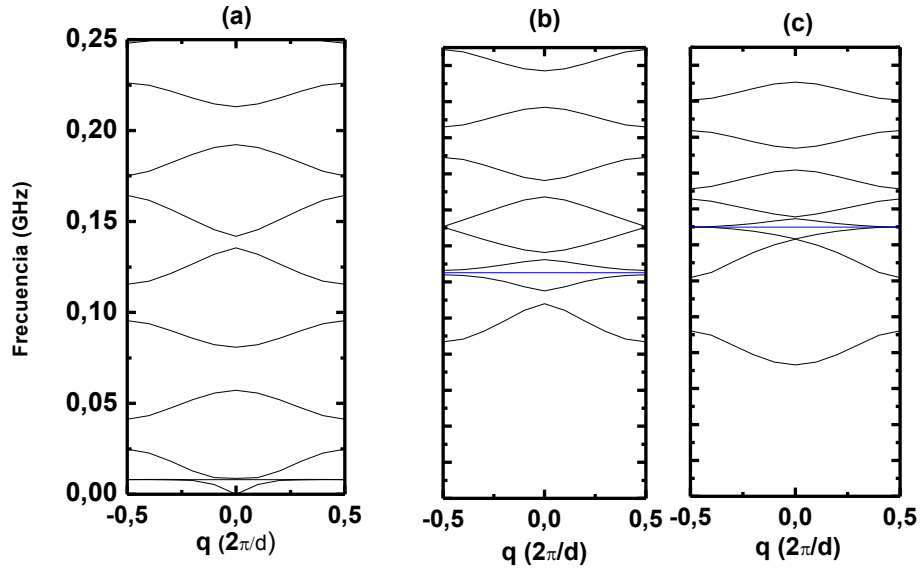


Figura 14. Panel (a), muestra la PBS del PC constituido por GaAs y aire considerando la variación del índice de refracción con la frecuencia de acuerdo con la ecuación 70. Paneles (b) y (c) muestran la PBS del PC constituido por GaAs y aire considerando la variación de la constante dieléctrica con la frecuencia del plasma de acuerdo con la ecuación 64.

Comparando con la Fig. 8 donde se realiza un estudio del efecto de agregar n-dopantes en el GaAs, tomando la constante dieléctrica modelada tipo Drude de acuerdo a la ecuación 64 y contrastando con los resultados obtenidos usando la ecuación 70 (ver Fig. 14), se observa el mismo comportamiento de la PBS y nuevamente cómo en la región donde el índice de refracción promedio es nulo el gap tiende a cerrarse. Este resultado indica que la constante dieléctrica expresada en la forma de la ecuación 70 debe presentar efectos de dopaje aunque en un nivel más bajo que en el caso de la Fig. 8.

7. CONCLUSIONES

- Utilizando la técnica de la matriz transferencia, se ha estudiado analíticamente la estructura de bandas de un cristal fotónico 1D constituido por una superred con dos capas alternadas de aire y GaAs, de espesores a y b respectivamente.
- Se ha corroborado la existencia de band gaps fotónicos como se esperaba. En adición a esto, se ha demostrado que escogiendo adecuadamente las medidas de los espesores de las capas que constituyen la superred, la estructura de bandas fotónicas se desplaza a valores de mayor o menor energía.
- Se encontró que la dependencia de la Estructura de Bandas con la temperatura es despreciable y que los cambios son debidos principalmente a la presión hidrostática que causa una variación en la constante dieléctrica del GaAs.
- Se encontró que la estructura de bandas se desplaza a mayores energías a medida que se incrementa la cantidad de dopantes en el GaAs, es decir, a medida que se aumenta la frecuencia del plasma.
- Se realizó un estudio de la superred compuesta de GaAs y aire, pero tomando ahora la constante dieléctrica del GaAs dependiente de la frecuencia y modelada tipo Drude con un índice de refracción que puede tomar valores positivo o imaginario puro, observándose que en regiones de frecuencia en donde el índice de refracción promedio es nulo, el gap tiende a cerrarse.
- Se observó que en regiones donde el índice de refracción es imaginario puro, es decir, para valores de frecuencia menores a la frecuencia del plasma, no se presenta la regularidad en la PBS como en el caso de frecuencias mayores.
- Se estudió el PC formado por Ta_2O_5 (con $\epsilon=27$) y aire, observandose un desplazamiento de la PBS a menores frecuencias en comparación con el cristal constituido por GaAs y aire, cumpliéndose el hecho de que el campo se concentra en regiones de alta constante dieléctrica, minimizando así su energía.
- Se comprobó que el PC hecho de capas alternadas GaAs y aire presenta una respuesta óptica que obedece a una relación de dispersión para la constante dieléctrica ajustada al modelo de Drude.

8. REFERENCIAS

- [1] E. Yablonovitch, Phys. Rev. Lett. **58**, 2059 (1987).
- [2] S. John, Phys. Rev. Lett. **58**, 2486 (1987).
- [3] J. D. Joannopoulos *et al.*, *Photonic Crystals: Molding the Flow of Light* (Princeton University Press, Princeton, 1995).
- [4] H. Kosaka *et al.*, Phys. Rev. B **58**, R10096 (1998).
- [5] I. V. Konoplev *et al.*, J. Appl. Phys. **97**, 073101 (2005).
- [6] I. V. Konoplev *et al.*, Appl. Phys. Lett. **87**, 121104 (2005).
- [7] C. A. Duque, N. Porras-Montenegro, S. B. Cavalcanti, and L. E. Oliveira, J. Appl. Phys. **105**, 034303 (2009).
- [8] P. S. Pershan, J. Appl. Phys. **38**, 1482 (1967).
- [9] C. R. Pidgeon, in *Handbook on Semiconductors*, edited by M. Balkanski (North-Holland, Amsterdam, 1980) vol. 2, p. 223.
- [10] C. Xu, X. Hu, Y. Li, X. Liu, R. Fu, and J. Zi, Phys. Rev. B **68**, 193201 (2003).
- [11] K. Busch and S. John, Phys. Rev. Lett. **83**, 967 (1999).
- [12] N. Porras-Montenegro, C. A. Duque, Physica E **42**, 1865-1869 (2010).
- [13] S. B. Cavalcanti, M. de Dios-Leyva, E. Reyes-Gómez, and L. E. Oliveira, Phys. Rev. B **74**, 153102 (2006).
- [14] S. B. Cavalcanti, M. de Dios-Leyva, E. Reyes-Gómez, and L. E. Oliveira, Phys. Rev. E **75**, 026607 (2007).
- [15] G. A. Samara, Phys. Rev. B **27**, 3494 (1983).
- [16] A. M. Elabsy, Physica Scripta **48**, 376 (1993).
- [17] N. Ashcroft and D. Mermin, Solid State Physics, 5th ed. (Wiley, New York, 1976).
- [18] A. Raymond, J. L. Robert, C. Bernard, J. Phys. C. **12**, 2289 (1979).
- [19] P. Pefeffer, W. Zawadzki, Phys. Rev. B **41**, 1561 (1990).
- [20] Don. Monroe, Appl. Phys. Lett. (USA) **59**, 2293 (1991).
- [21] R. R. Willey, Thin Solid Films **398**, 1 (2001).
- [22] Seouk-Hoon Woo, Chang Kwon Hwangbo, Young Bae Son, Il Choon Moon, Geon Mo Kang and Kwang-Su Lee, J. Korean Phys. Soc. **46**, 187 (2005).
- [23] J. Li *et al.*, Phys. Rev. Lett. **90**, 083901 (2003).
- [24] A. Thelen, *Design of Optical Interference Coatings*, McGraw-Hill (1989).
- [25] N. Kaiser, *Optical Interference Coatings*, Springer, Berlin (2003).