

# **Análisis del Diagrama de Bandas de Cuasi-cristales Fotónicos Compuestos por Estructuras Periódicas Independientes**

**Analysis of the Band diagram in Photonic Quasicrystals  
Composed by Independent Periodic Structures**

**Presentado por:**

Juan Felipe Calderon Vargas

**Dirigido por:**

Prof. Carlos Augusto Galindez Jamióy PhD.



**2025**

**Departamento de Física (3146)**

**Facultad de Ciencias Naturales y Exactas**

**Universidad del Valle**

## Resumen

Los sistemas cuasicristalinos formados por capas superpuestas de cristales fotónicos ofrecen propiedades ópticas únicas que pueden ser modificadas a través del giro o desplazamiento relativo de las láminas que los componen. En este trabajo se estudia el diagrama de bandas de estructuras bicapa, en el punto  $\Gamma$  de la primera zona de Brillouin, usando *Análisis Riguroso de ondas acopladas* (RCWA) y *espectroscopía resuelta en ángulo*. Estos métodos fueron validados numéricamente mediante la reproducción de fenómenos ópticos bien conocidos, como la ley de Snell y reflexión total interna, junto con el análisis de sistemas periódicos, como los espejos de Bragg y láminas de cristal fotónico bidimensionales, obteniendo una correlación promedio de 0.99 con predicciones teóricas. Los resultados demuestran que el espectro de transmitancia varía significativamente con el desplazamiento y el giro relativo entre las láminas, debido a la evolución de las resonancias guiadas en función de estos parámetros. Adicionalmente, se encuentra que un sistema bicapa de rejillas de difracción de dióxido de vanadio ( $\text{VO}_2$ ) permite modular la intensidad de un láser de dióxido de carbono ( $\text{CO}_2$ ) ajustando el desplazamiento relativo de las láminas. Además, el análisis de un sistema cuasicristalino particular, revela que el comportamiento lineal de una resonancia guiada, en función del giro relativo de las capas, podría utilizarse en la fabricación de filtros con frecuencia central variable. Estos hallazgos sientan las bases para la aplicación práctica de sistemas bilaminares y dan paso a futuras validaciones experimentales y desarrollos teóricos más profundos.

**Palabras clave:** Cristales fotónicos, Cuasicristales fotónicos, Resonancia guiada, RCWA, Espectroscopía resuelta en ángulo, Modulación óptica, Filtro óptico.

## Abstract

Quasicrystalline systems made by overlapping photonic crystal slabs exhibit unique optical properties that can be tuned by adjusting the relative displacement or twist between the layers. This work investigates the band diagram of bilayer structures, at the  $\Gamma$  point of first Brillouin zone, using *Rigorous Coupled-Wave Analysis* (RCWA) and *angle-resolved spectroscopy*. These methods were numerically validated by reproducing well-known optical phenomena, such as Snell's law and total internal reflection, along with the analysis of periodic systems, such as Bragg mirrors and two-dimensional photonic crystal slabs, achieving an average correlation of 0.99 with theoretical predictions. The results demonstrate that the transmittance spectrum is highly dependent on relative displacement and twist of the layers, due to the evolution of guided resonances as a function of these parameters. Additionally, it is found that a bilayer system of diffraction gratings composed of vanadium dioxide ( $\text{VO}_2$ ) can be used to modulate the intensity of a carbon dioxide ( $\text{CO}_2$ ) laser by adjusting the relative displacement between layers. Furthermore, the analysis of a particular quasicrystalline system, reveals that the linear behavior of a guided resonance as a function of the slabs' twist suggests its potential application in the design of tunable central-frequency filters. These findings pave the way for practical application of bilayer systems and lead to future experimental validations and deeper theoretical studies.

**Keywords:** Photonic crystal, Photonic quasicrystal, Guided resonance, RCWA, Angle-resolved spectroscopy, Optical modulation, Optical filter.

## Agradecimientos

Inicialmente, quisiera expresar mi más sincero agradecimiento al profesor Abdul Reyes de la Universidad Nacional, asociado del grupo de investigación de óptica cuántica de la Universidad del Valle, por su disposición para facilitar el acceso al clúster de cómputo que permitió llevar a cabo la vasta cantidad de cálculos numéricos necesarios para esta investigación. Sin su colaboración, la exploración de este problema habría estado enormemente limitada. También, quiero agradecerle a mi director, Carlos Galindez. Le agradezco su constante disposición, consejos y paciencia. El tiempo que dedicó a nuestras innumerables discusiones fue fundamental para el avance de este proyecto. Muchas gracias por la confianza, por creer en mis ideas y apoyar mi curiosidad compulsiva.

A esas personas que me he encontrado en el camino, a aquellos amigos que he descubierto. Aprecio profundamente las discusiones, reuniones, charlas y bromas que hemos compartido. Gracias por enseñarme un mundo más colorido.

A mi novia, muchas gracias por tanto apoyo. Este proceso no ha sido sencillo, pero puedo decir he tenido la mejor compañía. He crecido a tu lado y no puedo ignorar que se debe a tu influencia. Muchas gracias por siempre escucharme y permitirte disfrutar de mis absurdos. A mi hermana. Estoy seguro de que ella no es consciente de lo mucho que ha impactado mi vida. Su influencia, los consejos y la guía que compartió conmigo, ayudaron a forjar mi carácter y determinación. Me enseñó a siempre dar un poco más de mí, y no se equivocaba al decir que no me arrepentiría. Gracias, hermana.

Finalmente, a mi madre y a mi padre, los más importantes. Me quedo corto al intentar dar una descripción adecuada de lo que siento. Pues, entre muchas cosas, su apoyo nunca ha tenido condiciones y nunca han cuestionado mis intereses. Mamá, Papá, gracias por todo. Esto es para ustedes.



## Presentaciones y publicaciones

Durante el desarrollo de este trabajo de grado, se realizó la presentación del proyecto en dos ocasiones en eventos académicos:

- *Primer Encuentro Internacional de Investigación y Enseñanzas de las Ciencias Naturales y Exactas*. 16 y 17 de Noviembre de 2023. Póster: Análisis del comportamiento óptico de estructuras de Moiré compuestas por cristales fotónicos mediante RCWA.
- *XVIII Encuentro Nacional de Óptica y La Conferencia Andina y del Caribe en Óptica y sus Aplicaciones*. 12, 13 y 14 de Junio de 2024. Ponencia oral: Optical Characterization of Moiré Photonic Crystals Using the RCWA Method.

Los certificados de ambas participaciones se encuentran en el apéndice **B**.

Adicionalmente, tras la asistencia al segundo evento académico, parte de los resultados de este trabajo fueron publicados en un artículo de conferencia:

- J. F. Calderon and C. A. Galindez, "Optical Characterization of Moiré Photonic Crystals Using the RCWA Method," 2024 XVIII National Meeting on Optics and the IX Andean and Caribbean Conference on Optics and its Applications (ENO-CANCOA), Cartagena, Colombia, 2024, pp. 1-3, doi: 10.1109/ENO-CANCOA61307.2024.10751101.

# Contenido

---

|          |                                                            |           |
|----------|------------------------------------------------------------|-----------|
| <b>0</b> | <b>Introducción</b>                                        | <b>1</b>  |
| <b>1</b> | <b>Metodología</b>                                         | <b>4</b>  |
| 1.1      | Etapas 1 . . . . .                                         | 4         |
| 1.2      | Etapas 2 . . . . .                                         | 7         |
| 1.3      | Etapas 3 . . . . .                                         | 8         |
| <b>2</b> | <b>Cristales Fotónicos</b>                                 | <b>10</b> |
| 2.1      | Red recíproca y primera zona de Brillouin . . . . .        | 11        |
| 2.2      | Ecuación Maestra . . . . .                                 | 12        |
| 2.3      | Estructura de bandas . . . . .                             | 14        |
| <b>3</b> | <b>Láminas de Cristal Fotónico</b>                         | <b>16</b> |
| 3.1      | Modos guiados . . . . .                                    | 17        |
| 3.2      | Resonancias Guiadas o modos de fuga . . . . .              | 18        |
| 3.3      | Modos propios de una lámina dieléctrica uniforme . . . . . | 20        |
| 3.4      | Matriz de Dispersión . . . . .                             | 22        |
| <b>4</b> | <b>Sistema Bicapa de Láminas de Cristal Fotónico</b>       | <b>25</b> |
| 4.1      | Patrones de Moiré . . . . .                                | 26        |
| 4.2      | Red Recíproca y zona de Brillouin . . . . .                | 27        |
| <b>5</b> | <b>Métodos Numéricos</b>                                   | <b>32</b> |
| 5.1      | Aproximación por Supercelda . . . . .                      | 32        |
| 5.2      | Análisis Riguroso de Ondas Acopladas . . . . .             | 36        |
| <b>6</b> | <b>Resultados</b>                                          | <b>40</b> |
| 6.1      | Pruebas preliminares . . . . .                             | 40        |
| 6.1.1    | Refracción . . . . .                                       | 40        |
| 6.1.2    | Espejo de Bragg . . . . .                                  | 44        |
| 6.1.3    | Lámina de cristal fotónico Bidimensional . . . . .         | 47        |
| 6.2      | Pruebas de concepto . . . . .                              | 50        |
| 6.2.1    | Patrón de Moiré por Desplazamiento . . . . .               | 51        |
| 6.2.2    | Patrón de Moiré por Giro . . . . .                         | 53        |

|          |                                                              |           |
|----------|--------------------------------------------------------------|-----------|
| 6.3      | Dispositivo Óptico . . . . .                                 | 55        |
| <b>7</b> | <b>Conclusiones y perspectivas</b>                           | <b>63</b> |
| 7.1      | Conclusiones . . . . .                                       | 63        |
| 7.2      | Perspectivas . . . . .                                       | 64        |
| <b>A</b> | <b>Láminas uniformes</b>                                     | <b>66</b> |
| A.1      | Lámina dieléctrica uniforme suspendida en el vacío . . . . . | 66        |
| A.2      | Sistema bicapa de láminas uniformes . . . . .                | 68        |
| <b>B</b> | <b>Certificados de Participación</b>                         | <b>71</b> |
|          | <b>Referencias</b>                                           | <b>73</b> |

# Índice de Figuras

---

|     |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   |    |
|-----|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| 1.1 | Diagrama de flujo del proyecto, centrado en el acercamiento numérico del problema. Se exponen las decisiones, en rombos color amarillo, y las actividades, en rectángulos color azul (el color celeste es para aquellas actividades que arrojan datos que deben ser analizados). El inicio y el final del procedimiento se presentan en las casillas color naranja y verde, respectivamente. Además, se muestran, explícitamente, las tres etapas del proyecto. También, se expone la posibilidad de abordar el problema con los enfoques experimental y analítico, con el objetivo de que el conjunto de que estas tres estrategias (numérica, analítica y experimental) se retroalimenten entre sí para construir un proyecto más robusto en el futuro. . . . . | 5  |
| 1.2 | Representación diagramática de dos sistemas bicapa compuestos por (a) el desplazamiento entre dos rejillas de difracción superpuestas de manera paralela y (b) dos láminas de cristal fotónico con red cuadrada giradas entre sí un ángulo $\alpha$ . . . . .                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     | 9  |
| 2.1 | Ejemplos de cristales fotónicos: (a) unidimensional, (b) bidimensional y (c) tridimensional, donde cada color representa un índice de refracción distinto. En cada ejemplo se muestran los vectores y el parámetro de red para cada estructura. . . . .                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                           | 11 |
| 2.2 | Representación diagramática de la construcción de la primera zona de Brillouin, área sombreada, para una red cuadrada y una red hexagonal. Los puntos azules representan la red recíproca y los puntos negros representan puntos de alta simetría en la primera zona de Brillouin. . . . .                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                        | 12 |
| 3.1 | Secciones de ejemplo de láminas de cristal fotónico: (a) con periodicidad unidimensional (comúnmente conocida como rejilla de difracción) y (b) con periodicidad bidimensional. Los colores representan un índice de refracción distinto al del medio circundante. En cada caso, se ilustran los vectores de red correspondientes. . . . .                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                        | 16 |
| 3.2 | Representación diagramática del cono de luz en la estructura de bandas. Esta superficie delimita dos regiones del espacio: la región de espectro discreto, ubicada por debajo del cono de luz, donde se encuentran los modos guiados, y la región de espectro continuo, localizada por encima del cono de luz, donde se encuentran los modos de fuga. . . . .                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     | 17 |

|     |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                              |    |
|-----|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| 3.3 | (a) Comparación del espectro de transmitancia de una lámina uniforme, con $n = 3.16$ y espesor $0.5a$ , calculado de manera analítica, y el espectro de transmitancia de una lámina de cristal fotónico de red cuadrada, con $n = 3.46$ , parámetro de red $a$ , espesor $0.5a$ y huecos circulares de diámetro $0.4a$ , calculado a través de <i>RCWA</i> . (b) Representación diagramática de una onda plana, con vector de onda $\mathbf{k}_{inc}$ , incidiendo sobre una lámina de cristal fotónico con ángulos $\theta$ y $\varphi$ . . . . .                                                                                                                                                                                                                                                                                                                           | 18 |
| 3.4 | (a) Medición temporal de la amplitud del campo eléctrico transmitido tras la incidencia normal de un pulso electromagnético sobre la lámina de cristal fotónico. Se resaltan las regiones de la respuesta rápida y la respuesta lenta. (b) Comparación entre el espectro de transmitancia de la lámina de cristal fotónico y la transformada de Fourier de las respuestas rápida y lenta. . . . .                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                            | 19 |
| 3.5 | (a) Estructura de bandas de una lámina de cristal fotónico con red cuadrada con índice de refracción 3.46, cuyo parámetro de red es $a$ , su espesor $0.5a$ y está compuesta por agujeros cilíndricos de radio $0.2a$ , calculada mediante una simulación de espectroscopia resuelta en ángulo usando <i>RCWA</i> . (b) Se observa cómo el cono de luz separa la estructura de bandas en dos regiones. Debido a que esta técnica de espectroscopia, así como el método <i>RCWA</i> , considera radiación externa incidente sobre la lámina, solo es posible observar la región superior al cono de luz. . . . .                                                                                                                                                                                                                                                              | 21 |
| 3.6 | (a) Comparación entre los modos propios de una lámina dieléctrica uniforme, con índice de refracción 3.16 y espesor $a$ , y una lámina de cristal fotónico, con índice de refracción 3.46, parámetro de red $a$ , espesor $a$ y huecos cilíndricos de radio $a/10$ . El cono de luz es representado a través de líneas de color gris. Las zonas resaltadas permiten ubicar rápidamente puntos de alta simetría donde el degeneramiento se levanta para los modos propios de la lámina de cristal fotónico. (b) Comparación de la aproximación de orden cero, a través de los modos propios de una lámina dieléctrica uniforme con índice de refracción 3.16 y espesor $0.5a$ , y la estructura de bandas de una lámina de cristal fotónico con índice de refracción 3.46, red cuadrada, parámetro de red $a$ , espesor $0.5a$ y huecos cilíndricos de radio $0.2a$ . . . . . | 22 |
| 3.7 | Diagrama de una lámina de cristal fotónico con ondas electromagnéticas planas incidentes, con amplitudes $a_u$ y $a_d$ , y ondas planas difractadas de primer orden, con amplitudes $b_u$ y $b_d$ . Las amplitudes $a_i$ y $b_i$ están relacionadas linealmente entre sí por la matriz $S$ . . . . .                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                         | 23 |
| 4.1 | Ejemplos de estructuras fotónicas cuasi-cristalinas. Basadas en (a) la teselación de Penrose [1], (b) un gradiente de los elementos de un cuasi-cristal dodecagonal [2], (c) la secuencia de Fibonacci [3], (d) un mosaico octagonal [4] y (e) un patrón de Moiré [5]. . . . .                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                               | 25 |
| 4.2 | Ejemplos de patrones de Moiré, estructuras formadas por la disposición desigual de dos redes cristalinas (a) desplazadas entre sí y (b) rotadas entre sí. (c) Ejemplo del tipo de sistema seleccionado como objetivo de estudio en este trabajo, está conformado por dos láminas de cristal fotónico solapadas y con un giro relativo entre ambas. . . . .                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   | 26 |
| 4.3 | Ejemplos de Patrones de Moiré formados por la superposición de dos redes cuadradas con un giro relativo entre sí de (a) $2.2^\circ$ , (b) $8^\circ$ y (c) $20^\circ$ . El recuadro negro en (b) representa la supercelda del patrón de Moiré. . . . .                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                        | 27 |

|     |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                              |    |
|-----|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| 4.4 | (a) Representación diagramática de un sistema compuesto por dos rejillas de difracción desplazadas entre sí, formando un patrón de Moiré, junto con (b) una representación simplificada de la red del sistema. . . . .                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                       | 28 |
| 4.5 | RL: Red Recíproca. BZ: Primera zona de Brillouin. Ejemplos de la red recíproca de un patrón de Moiré formado por dos redes cuadradas, con parámetro de red $a$ , giradas entre sí (a) $30^\circ$ (solo se han graficado algunos puntos de la red recíproca de Moiré), formando una estructura inconmensurada, y (b) $22.62^\circ$ , donde la estructura es conmensurada. En esta última es posible comparar los tamaños y direcciones de las primeras zonas de Brillouin involucradas. Para los ángulos de $30^\circ$ y $22.62^\circ$ las estructuras resultantes son no conmensurada y conmensurada, respectivamente. . . . .                                                                                                                                               | 29 |
| 5.1 | (a) Ejemplo de una lámina de cristal fotónico con red cuadrada y (b) esquema de un dominio computacional empleado para simular estructura (a) usando métodos como <i>FDTD</i> y <i>FEM</i> . . . . .                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                         | 33 |
| 5.2 | (a) Esquema del dominio computacional necesario para construir una simulación numérica convencional de un sistema cuasi-cristalino, compuesto por la superposición desigual de dos láminas de cristal fotónico, a partir de su supercelda y (b) diagrama de la red real de esta estructura, a un ángulo conmensurado, donde se destaca su supercelda. . . . .                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                | 34 |
| 5.3 | Comportamiento de la longitud de onda de Moiré, para la superposición de dos redes hexagonales, en función del giro $\alpha$ . El mínimo de la figura se alcanza en $90^\circ$ , donde $\lambda = \sqrt{2}/2 a$ . . . . .                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    | 35 |
| 6.1 | (a) Representación diagramática del mecanismo de refracción de la incidencia de una onda electromagnética sobre una interfaz de dos medios dieléctricos semi-infinitos junto con la distribución espacial, de la componente $\mathbf{x}$ , del campo eléctrico, calculada con <i>RCWA</i> simulando dos materiales con índices de refracción $n_1$ y $n_2$ . En la parte superior se observa la superposición de las ondas incidente y reflejada, mientras que en la parte inferior se observa la onda transmitida. (b) Comparación entre las predicciones analíticas y los resultados numéricos de <i>RCWA</i> del ángulo de transmisión $\theta_T$ en función del ángulo de incidencia $\theta_I$ y algunos valores del índice de refracción del segundo material. . . . . | 41 |
| 6.2 | Reflectancia y transmitancia de una onda electromagnética plana que incide sobre una interfaz de dos materiales con índice de refracción $n_1 = 1$ y (a) $n_2 = 1.5$ , con polarización $s$ , y (b) $n_2 = 2.5$ , con polarización $p$ . En esta última se puede apreciar el ángulo de Brewster $\theta_B$ , donde la transmitancia es total. En ambas gráficas se presentan las predicciones analíticas y los resultados numéricos, obtenidos con <i>RCWA</i> . (c) Comparación entre la predicción analítica del ángulo de Brewster y el cálculo numérico realizado con <i>RCWA</i> , para $n_1 = 1, 2, 4, 8$ y $n_2 \in (1, 12]$ . . . . .                                                                                                                                | 42 |

- 6.3 (a) Ejemplo de la distribución (calculada con *RCWA*), de la componente en  $\mathbf{x}$ , del campo eléctrico donde una onda electromagnética plana incide, de manera oblicua, sobre la interfaz, de dos materiales con índices de refracción  $n_1$  y  $n_2$ , donde  $n_1 > n_2$ . Se aprecia la reflexión interna total de la luz, en la parte superior, y las ondas evanescente, en la parte inferior. (b) Reflectancia de una onda plana que incide sobre una interfaz de dos materiales con índice de refracción  $n_1 = 1.5$  y  $n_2 = 1$ , con polarización  $s$ . Se puede apreciar el ángulo crítico  $\theta_c$ , a partir del cual la reflectancia es total. Se comparan los resultados numéricos con la predicción analítica del problema. De esta última se presentaron los valores reales únicamente, pues, a partir del ángulo crítico, arroja valores complejos. (c) Comparación entre la predicción analítica del ángulo  $\theta_c$  y el cálculo numérico realizado con *RCWA*, para  $n_1 = 1, 2, 4, 8$  y  $n_2 \in (1, 10]$ . . . . . 43
- 6.4 (a) Diagrama de una onda electromagnética incidiendo, con ángulo  $\theta$ , sobre un espejo de Bragg compuesto por capas con índice de refracción  $n_1$  y  $n_2$  con espesores  $d_1$  y  $d_2$ , respectivamente. (b) transmitancia de un espejo de Bragg, con  $n_1 = 3.6$ ,  $n_2 = 1$  y  $d_1 = d_2 = a = 1$ , en función de la frecuencia  $\omega$ , para tres cantidades distintas de componentes de Fourier. Las tres curvas son exactamente iguales, por esa razón no se evidencian diferencias entre sí. . . . . 44
- 6.5 Comportamiento de la amplitud del campo eléctrico cuando una onda electromagnética plana, con frecuencia (a)  $0.2\omega a/2\pi c$  y (b)  $0.14\omega a/2\pi c$ , incide a  $\theta = 0$  sobre un espejo de Bragg con 11 capas con espesor  $a$ , e índices de refracción  $n_1 = 3.6$  y  $n_2 = 1$ . La frecuencia de la onda plana en (a) pertenece a una brecha fotónica, mientras que, la frecuencia de la onda plana en (b), no. . . . . 45
- 6.6 (a) Calculo de la amplitud del campo magnético a través de un espejo de Bragg, con 168 capas y  $n_1 = 3.6$ ,  $n_2 = 1$ ,  $d_1 = 0.8a$  y  $d_2 = 0.2a$ , en función de la coordenada  $z$  y la frecuencia de la onda electromagnética plana incidente, con  $\theta = 0$ . Cálculos realizados con *RCWA*. se observar cómo, en las brechas fotónicas, el campo electromagnético logra penetrar superficialmente,  $z = 0$ , el espejo de Bragg hasta desvanecerse. Y (b) transformada de Fourier, a lo largo de la coordenada espacial  $z$ , de estos resultados. En los máximos de esta gráfica se obtiene la estructura de bandas de este cristal fotónico unidimensional. . . . . 46
- 6.7 (a) Estructura de bandas de una lámina de cristal fotónico con índice de refracción 3.46 con red cuadrada, obtenida utilizando el método de espectroscopía resuelta en ángulo en *RCWA* y (b) resultados de la transmitancia en el punto  $\Gamma$  para diferentes cantidades de términos de Fourier  $N_g$ . Se puede apreciar que la resonancia de Fano, después de  $0.35 c/a$ , es la más difícil de describir con pocos términos de Fourier. . . . . 48
- 6.8 Reconstrucción de la permitividad eléctrica de la celda unitaria de una lámina de cristal fotónico para distintas cantidades de términos de Fourier ( $N_g$ ). El perfil de la permitividad eléctrica, calculado sobre la línea punteada, se presenta superpuesto a los mapas de calor. . . . . 49
- 6.9 Comparación directa del cálculo de la estructura de bandas de un cristal fotónico con red cuadrada utilizando *GME*, puntos, y *espectroscopía resuelta en ángulo* con *RCWA*, mapa de calor. . . . . 50

- 6.10 Representación diagramática y tridimensional de dos sistemas compuestos por la superposición de dos rejillas de difracción idénticas que forman un patrón de Moiré a través de (a) el desplazamiento  $\phi$  y (b) el ángulo de giro  $\alpha$ . Las rejillas de difracción tienen un factor de llenado de 0.5 y en la estructura bilaminar se encuentran separadas entre sí por una distancia  $D$ . En ambos diagramas se señala la supercelda del sistema. . . . . 51
- 6.11 Espectros de transmitancia en función del desplazamiento  $\phi$  para un sistema bilaminar de rejillas de difracción, con una permitividad eléctrica de 9.8, superpuestas entre sí. Cada rejilla cuenta con un parámetro de red  $a$ , espesor  $1/4 a$  y están separadas entre sí  $1/800 a$ . Las figuras (a) y (b) presentan los resultados para una incidencia normal de la luz a la estructura, mientras que las figuras (c) y (d), presentan los resultados para una incidencia con  $\theta = 30^\circ$ . La primer y segunda fila se corresponden con los resultados para polarización  $s$  y  $p$ , respectivamente. . . . . 52
- 6.12 Espectro de transmitancia, calculado con (a)  $RCWA$  a través de la supercelda del sistema y (b)  $RCWA4D$ , para un sistema bicapa de rejillas de difracción con parámetro de red  $a$ , espesor  $a/4$  y permitividad eléctrica de 9.8, superpuestas a una distancia  $a/800$  y giradas entre sí un ángulo  $\alpha$ . . . . . 53
- 6.13 Comparación entre el espectro de transmitancia de un sistema de dos láminas uniformes con permitividad eléctrica de 8.3 (ver el anexo A para más información) y el espectro de transmitancia, obtenido a través del enfoque de supercelda en  $RCWA$  con 37 términos de Fourier, para dos rejillas de difracción superpuestas y giradas entre sí un ángulo  $\alpha = [0^\circ, 21^\circ]$ , con permitividad eléctrica de 9.8. Las láminas de ambos sistemas tienen un espesor de  $a/4$  y una intercapa de  $8a/100$ . 54
- 6.14 Índices de refracción y coeficientes de extinción para (a) Arsenuro de Galio y (b) Dióxido de Vanadio. Extraídos de [6] y [7], respectivamente. . . . . 55
- 6.15 Espectro de transmitancia, para polarizaciones (a, c)  $s$  y (b, d)  $p$ , de dos rejillas de difracción superpuestas de manera paralela, con parámetro de red  $a = 16 \mu m$ , espesor  $a/4$  e intercapa  $8a/100$ , desfasadas entre sí una distancia  $\phi = [0, a/2]$ . Las barras de ambas rejillas de difracción se consideran compuestas por  $VO_2$  en su fase dieléctrica, primera fila, y su fase metálica, segunda fila. . . . . 57
- 6.16 Extracción del espectro de transmitancia, para la polarización  $s$ , de la estructura compuesta por dos rejillas de difracción a una longitud de onda  $16 \mu m$  en función del desfase  $\phi$ . Se observa una curva bien comportada cuyo mínimo de transmitancia se corresponde con el 24.3% de la transmitancia máxima a esta longitud de onda. . . . . 57
- 6.17 (a) Extracción de espectros de transmitancias , para la polarización  $s$ , de la estructura compuesta por dos rejillas de difracción entre  $9.6 \mu m$  y  $15 \mu m$  para distintos valores de desfase  $\phi$ . Se observa que el ancho del espectro, tomado a partir de la altura media del pico más prominente, de las longitudes de onda transmitidas a través de la estructura disminuye en función de  $\phi$ . Este comportamiento se encuentra representado en (b), donde se obtiene un comportamiento lineal cuyo coeficiente de correlación es de 0.99. . . . . 58



|                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                |    |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| 6.18 (a) Diagrama de un sistema bicapa de láminas de cristal fotónico con red cuadrada, cuya superposición forma una red cuasicristalina al girar ambas láminas entre sí. (b) Transmitancia de una estructura bicapa compuesta por dos láminas de cristal fotónico con índice de refracción 3.5 y red cuadrada, giradas entre sí un ángulo $\alpha$ y separadas $8/100 a$ . Ambas láminas son idénticas con espesor $1/2 a$ y agujeros cilíndricos con radio $1/5 a$ , donde $a$ es el parámetro de red. . . . .                                                               | 59 |
| 6.19 (a) Comparación entre el espectro de transmitancia de un sistema bicapa de láminas de cristal fotónico, con índice de refracción de 3.50, giradas entre sí $17.47^\circ$ y un sistema equivalente de láminas uniformes con índice de refracción de 3.39. (b) Espectro de transmitancia (figura 6.18) tras la convolución con un kernel de realce vertical, se destacan las resonancias guiadas, pues este filtrado se deshace del fondo de transmisión. Se resalta una resonancia guiada cuya frecuencia aparenta una dependencia lineal con el ángulo $\alpha$ . . . . . | 60 |
| 6.20 (a) Curvas de transmitancia en función de la frecuencia para distintos ángulos $\alpha$ . se destaca una resonancia de Fano dependiente de $\alpha$ entre $0.340 c/a$ y $0.365 c/a$ , ver la figura 6.19(b). Y (b) la transformada de Fourier de la respuesta lenta para cada espectro de transmitancia. Las resonancias de Fano adquieren una forma lorentziana. . . . .                                                                                                                                                                                                 | 61 |
| 6.21 Comportamiento del máximo de las curvas de lorentz, señaladas en la figura 6.20(b) en función de $\alpha$ . Las barras de error representan el ancho a altura media de los picos encontrados. Se observa un comportamiento lineal con un coeficiente de correlación de 0.99. . . . .                                                                                                                                                                                                                                                                                      | 62 |
| A.1 Diagrama de una capa homogénea, con índice de refracción $n_1$ y espesor $d$ , suspendida entre dos medios semi-infinitos con índice de refracción $n_0$ . . . . .                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                         | 67 |
| A.2 Diagrama de un sistema bicapa de láminas homogéneas suspendidas en un medio con índice de refracción $n_0$ . Las láminas tienen un índice de refracción $n_1$ y $n_2$ , con espesores $d_1$ y $d_2$ , respectivamente, y están separadas por una distancia $D$ . Las amplitudes de las ondas planas que inciden hacia la estructura son $A_0$ y $B_s$ , y la amplitud de las ondas planas que salen de la estructura son $A_s$ y $B_0$ . . . . .                                                                                                                           | 68 |
| B.1 Certificado de participación del <i>Primer Encuentro Internacional de Investigación y Enseñanzas de las Ciencias Naturales y Exactas</i> . . . . .                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                         | 71 |
| B.2 Certificado de participación del <i>XVIII Encuentro Nacional de Óptica y La Conferencia Andina y del Caribe en Óptica y sus Aplicaciones</i> . . . . .                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     | 72 |

# Índice de Tablas

---

|     |                                                                                                                                                                |    |
|-----|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| 1.1 | Tabla de especificaciones del clúster utilizado para realizar los cálculos numéricos.                                                                          | 7  |
| 1.2 | Tabla de especificaciones de la estación de trabajo <i>Dell Precision 5820 Tower</i> , utilizada de manera temporal durante el proyecto. . . . .               | 7  |
| 6.1 | Tabla de frecuencias, anchos de banda y factor de calidad de la resonancia guiada seleccionada para cada valor de $\alpha$ expuesto en la figura 6.21. . . . . | 61 |

# 0. Introducción

---

A partir del siglo pasado, el desarrollo conceptual y práctico en la propagación de los electrones ha representado un avance tecnológico radical. La electrónica moderna, por ejemplo, se basa en la implementación de semiconductores [8, 9]: materiales que cuentan con propiedades únicas que permiten la manipulación voluntaria de la corriente eléctrica y, por lo tanto, el desarrollo de dispositivos como diodos, transistores y circuitos integrados que han impactado notoriamente múltiples aspectos de la vida cotidiana, la industria y la investigación científica. A lo largo de los años, estos artefactos han disminuido su tamaño, aumentado su velocidad de funcionamiento y mejorado su eficiencia eléctrica [10]. Sin embargo, limitaciones como el calentamiento, la velocidad limitada y la latencia, debidas a la resistencia eléctrica en los circuitos electrónicos, han convertido a la luz en una alternativa llamativa para la computación y las telecomunicaciones [11, 12]. De hecho, en la actualidad, desarrollos tecnológicos en fotónica (fibras ópticas, circuitos integrados, etc) están revolucionando estos sectores [13]. Por ejemplo, las redes de fibra óptica han superado notoriamente al cableado eléctrico en la transmisión de datos [14] y la fotónica ha ejercido una gran influencia en la fabricación de sensores dispositivos médicos [15, 16].

Muchas de estas tecnologías, basadas en la transmisión de la luz, están influenciadas por los cristales fotónicos [17, 18]: materiales macroscópicos cuyo índice de refracción es periódico en una, dos o tres direcciones, lo cual origina múltiples interacciones constructivas y destructivas de las ondas electromagnéticas que inciden sobre estos y da lugar a fenómenos como las brechas fotónicas [19, 20], confinamiento de la luz [21–23], *BICs* [24, 25] y transmisión ultralenta de la luz [26–28]. Estos fenómenos permiten una manipulación directa en la propagación de la luz, lo cual convierte a los cristales fotónicos en un análogo directo de los semiconductores, para ondas electromagnéticas, y en piezas clave de la fotónica, siendo aplicados en la fabricación de sensores [29], multiplexores y demultiplexores de fibra óptica [30, 31] y celdas solares [32–34]. Es importante resaltar que, actualmente, el concepto de cristal fotónico ha sido reemplazado por el de lámina de cristal fotónico. Esto se debe a que, en la teoría, los cristales fotónicos son concebidos como estructuras cristalinas infinitas, mientras que las láminas de cristal fotónico se modelan infinitas a lo largo del plano donde presentan la red cristalina y finitas en la dirección perpendicular. Los beneficios de investigar este último tipo de estructura son inmediatos, pues la fabricación de un elemento congruente con un cristal fotónico requiere que sus dimensiones macroscópicas sean mucho más grandes que el periodo de la red cristalina,

generando una alta complejidad en su elaboración. Las láminas de cristal fotónico, por el contrario, resultan más sencillas de fabricar y mantienen varias propiedades de los cristales fotónicos al tiempo que presentan nuevos fenómenos [35]. Por ejemplo, algunos modos propios del campo electromagnético que surgen en las láminas de cristal fotónico pueden acoplarse a radiación exterior y se evidencian en la transmitancia del sistema como resonancias de Fano. A estos modos propios se les conoce como resonancias guiadas, o modos de fuga, y fueron aprovechados a lo largo de este proyecto para obtener el diagrama de bandas de las estructuras de interés a través de un método conocido como *Espectroscopía resuelta en ángulo* (en inglés *Angle resolved spectroscopy* o *ARS*) [36–42].

En este contexto, el presente trabajo aborda una de las limitaciones más evidentes de las láminas de cristales fotónicos. Una vez han sido diseñadas y construidas, no es posible cambiar sus propiedades geométricas y dispersivas y, por lo tanto, sus propiedades ópticas son fijas. Es decir, sólo es posible cambiar la manera en que la luz interactúa con una lámina cristal fotónico cambiando su longitud de onda y el ángulo de incidencia [43, 44]. En este sentido, surge la siguiente pregunta: ¿Existen estructuras con propiedades similares a los cristales fotónicos que cuenten con más grados de libertad en la manipulación de la luz? La respuesta inmediata es sí, este tipo de manipulación puede realizarse perturbando el índice de refracción del cristal fotónico [45–47] o en sistemas compuestos por dos láminas, donde la separación entre ambas capas se convierte en un nuevo parámetro que puede ser configurable a voluntad tras la construcción de las estructuras cristalinas [48]. Ahora bien, si la superposición entre ambas láminas resulta de manera desigual, por ejemplo, a través de un giro [5, 49] o un desplazamiento [48, 50], se obtiene lo que se conoce como un patrón de Moiré, una estructura cuasi-cristalina que continúa manteniendo grandes similitudes con los cristales fotónicos e incluye nuevos grados de libertad. Cada valor que tome dicho giro o desplazamiento genera una red diferente, cuya periodicidad es aparente e inexacta, con propiedades ópticas distintas que dan lugar a variados fenómenos ajustables a través de estos nuevos parámetros. Por ejemplo, en los últimos años se ha observado la manipulación directa de resonancias guiadas [44, 51], lo cual ha permitido diseñar estructuras que permiten la generación de vórtices [52], bandas planas [53] y el redireccionamiento de luz [54] a través de estos nuevos grados de libertad.

El objetivo principal de este trabajo es obtener el diagrama de bandas, en el punto  $\Gamma$  (incidencia normal de la luz sobre el sistema) de la primera zona de Brillouin, de estas estructuras cuasi-cristalinas y observar el comportamiento de las resonancias guiadas en función del giro o el desplazamiento. Para esto, se utiliza un método numérico conocido como *Análisis Riguroso de Ondas Acopladas* (en inglés *Rigorous coupled wave analysis* o *RCWA*) [55], que en conjunto con la espectroscopía resuelta en ángulo, permite observar las resonancias guiadas de estos sistemas. *RCWA* es un método orientado a la solución de las ecuaciones de Maxwell a través de una expansión en términos de Fourier de los elementos involucrados en un sistema cristalino (campos eléctrico y magnético e índice de refracción). Esto implica que no puede ser aplicado directamente a estructuras cuasi-cristalinas debido a que no presentan una periodicidad real. Entonces, es necesario aplicar una modificación en *RCWA* que implica la adición de nuevos términos en la expansión de Fourier del método [49]. La aplicación de esta técnica resulta conveniente, pues una alternativa implica aplicar un enfoque periódico conocido como aproximación por supercelda. Sin embargo, las estructuras cuasi-cristalinas presentan una periodicidad aparente, por lo tanto, no es posible plantear una región del sistema que se repita de manera exacta a lo largo del espacio, como sucede con la celda unitaria de un cristal fotónico. No obstante, al observar los patrones de Moiré que se forman en estas estructuras cuasi-cristalinas es posible identificar una región espacial, mucho más grande que las celdas

unitarias de las láminas que conforman el sistema, que aparenta repetirse con un periodo aún mayor. A esta región se le conoce como supercelda y aunque no se repite de manera exacta, es posible realizar una aproximación periódica del sistema a partir de esta. Este enfoque resulta poco conveniente pues, tal como será descrito en los capítulos 4 y 5, implican un coste computacional notoriamente alto y, a excepción de unos ángulos conocidos como conmensurados, no es posible garantizar que la aproximación sea correcta.

Este documento, al igual que la metodología seguida durante el trabajo, está organizado de manera que se incrementa progresivamente la complejidad de los sistemas en estudio hasta llegar a las estructuras bicapa de interés. Esto se hace buscando que este documento funcione como una herramienta y guía para estudiantes que incursionen en este tema. Inicialmente, en el primer capítulo se presentará un diagrama y una descripción general de la metodología seguida durante este trabajo, donde se divide el procedimiento en tres etapas: la etapa de preparación, la etapa de pruebas y la etapa de ejecución. A continuación, en el segundo y tercer capítulo, se exploran las propiedades generales de los cristales fotónicos y las láminas de cristal fotónico, respectivamente, abordando la teoría necesaria para comprender la aparición de los modos propios de estos sistemas y cómo la radiación electromagnética externa logra acoplarse y generar resonancias en las estructuras. Seguidamente, en el cuarto capítulo, los sistemas bilaminas cuasi-cristalinos serán introducidos desde una perspectiva geométrica, desde la cual se motivará el uso de métodos numéricos, tratados en el quinto capítulo, para encontrar sus propiedades ópticas. Los resultados serán presentados en el sexto capítulo y, finalmente, en el capítulo 7 se expondrán las conclusiones del trabajo, junto con algunos apuntes y perspectivas para futuros proyectos.

# 1. Metodología

---

Los objetivos específicos planteados para este proyecto son:

1. Determinar las herramientas teóricas y computacionales que se usarán para el modelamiento de los cristales fotónicos cuasi-periódicos.
2. Obtener las estructuras de bandas de los cuasi-cristales.
3. Determinar si los cuasi-cristales estudiados podrían ser empleados en la fabricación de dispositivos ópticos con parámetros variables.

A fin de alcanzarlos, se diseñó la metodología representada en la figura 1.1. Si bien el proceso de investigación para este trabajo de grado no fue completamente lineal, este diagrama de flujo representa correctamente los pasos seguidos a lo largo del proyecto, los cuales fueron agrupados en tres etapas. De esta manera, en este capítulo, se describirá el procedimiento, y las decisiones generales, que permitieron el análisis numérico de estos sistemas cuasi-cristalinos y, posteriormente, la propuesta de algunas estructuras para su aplicación en dispositivos ópticos.

## 1.1. Etapa 1

Esta primera etapa fue de preparación y responde al primer objetivo específico. Aquí, se realizó la investigación de antecedentes. Esto permitió seleccionar el tipo de estructura y las propiedades ópticas que se deseaban analizar. La decisión final fue motivada por las cualidades del sistema bicapa expuestas en el capítulo 4.

Seguidamente, teniendo en cuenta que el enfoque de la investigación sería computacional, se evaluaron múltiples métodos numéricos. Entre ellos se destacan los siguientes:

- Método de diferencias finitas en el dominio temporal (*FDTD*).
- Método de elementos finitos (*FEM*).
- Análisis riguroso de ondas acopladas (*RCWA*).

Los primeros dos métodos son caracterizados por su versatilidad. Su construcción les permite simular las propiedades electromagnéticas de casi cualquier sistema (capítulo 5). Esta cualidad los convierte en métodos notablemente costosos en términos de los recursos computacionales necesarios para los objetivos de este trabajo [49].

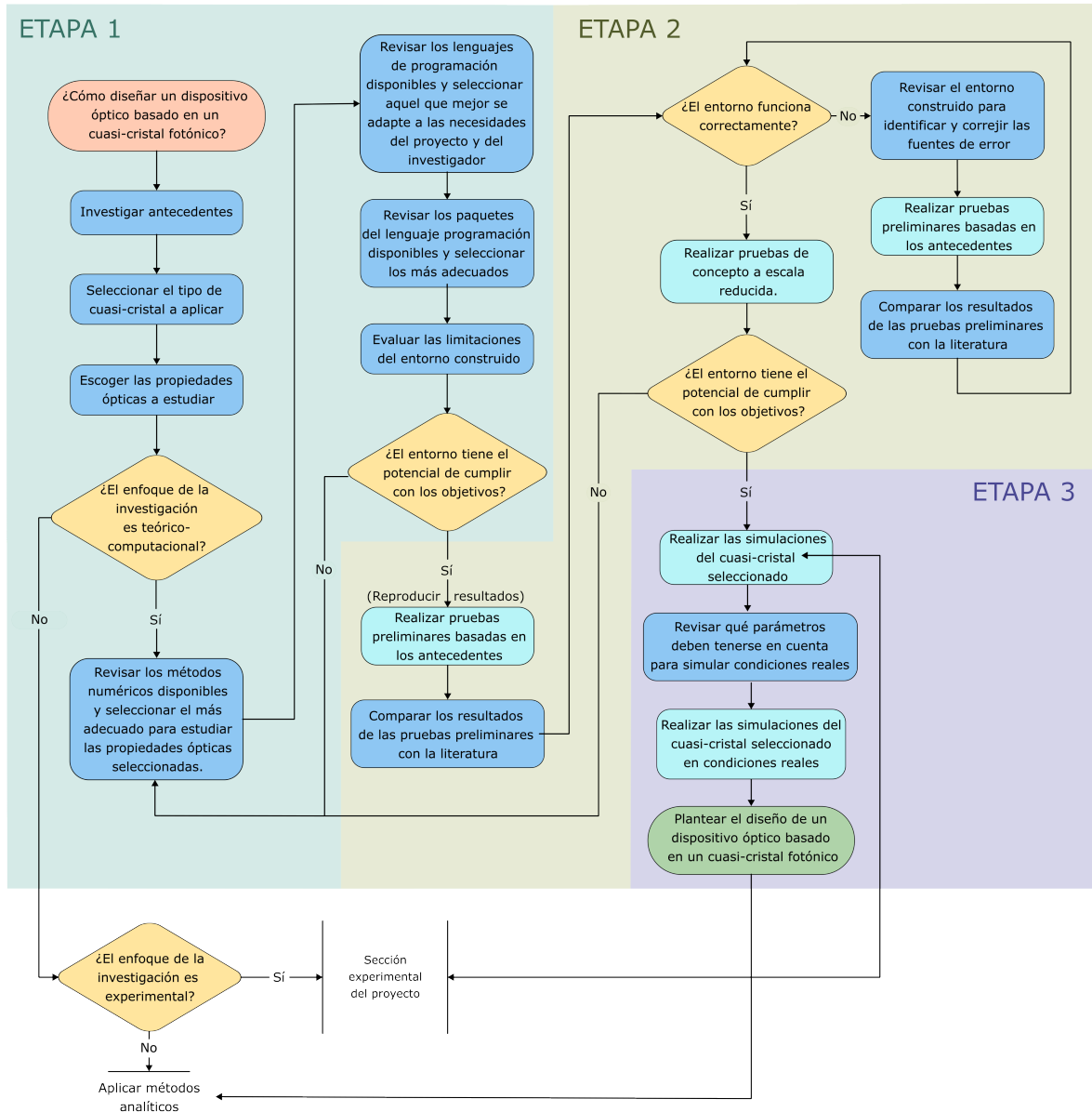


Figura 1.1: Diagrama de flujo del proyecto, centrado en el acercamiento numérico del problema. Se exponen las decisiones, en rombos color amarillo, y las actividades, en rectángulos color azul (el color celeste es para aquellas actividades que arrojan datos que deben ser analizados). El inicio y el final del procedimiento se presentan en las casillas color naranja y verde, respectivamente. Además, se muestran, explícitamente, las tres etapas del proyecto. También, se expone la posibilidad de abordar el problema con los enfoques experimental y analítico, con el objetivo de que el conjunto de que estas tres estrategias (numérica, analítica y experimental) se retroalimenten entre sí para construir un proyecto más robusto en el futuro.

Por otra parte, *RCWA* es un método numérico ideado para estudiar el comportamiento del campo electromagnético en estructuras cristalinas por capas. Estar focalizado en este tipo de estructuras, que son el objetivo de estudio de este trabajo, lo convierte en una opción más eficiente en comparación con las alternativas. Además, los estudios más significativos y recientes en esta área de investigación han aplicado este método [44, 49–51]. Por estas razones, *RCWA* fue seleccionado para este trabajo.

*Python* fue considerado como el lenguaje de programación idóneo. Debido a su sintaxis amigable y a la presencia de paquetes reconocidos por la comunidad científica en la aplicación de *RCWA*, como *S<sup>4</sup>* e *Inkstone* [55, 72]; *S<sup>4</sup>* es una librería altamente conocida en esta área. A la fecha, su artículo de publicación ha sido citado más de 300 veces. Por lo tanto, fue la primera opción. Sin embargo, hay características de la librería, necesarias para este proyecto, que no son presentadas en la documentación. Esto no sería un problema si el código fuente fuese de rápida lectura, pues una revisión ligera sería suficiente para entender su funcionamiento. No obstante, el código fuente de *S<sup>4</sup>* demandaba una gran cantidad de tiempo para lograr este cometido. Por lo tanto, se decidió utilizar *Inkstone*, una librería más reciente desarrollada por el mismo grupo de investigación que *S<sup>4</sup>* y escrita, en su totalidad, en *Python*. Esto permitiría realizar las modificaciones necesarias al método numérico para estudiar los sistemas bicapa sin mayores complicaciones (capítulo 5). Aunque, esto no fue necesario. La revisión de antecedentes fue constante durante el desarrollo de este trabajo, y permitió implementar rápidamente el paquete *RCWA4D*, el cual fue publicado durante el año 2024 [79]. Este contiene las modificaciones descritas en el capítulo 5, necesarias para que *RCWA* logre simular estructuras fotónicas compuestas por dos capas superpuestas y rotadas entre sí. Una vez el entorno de simulación fue diseñado, se decidió utilizar *MATLAB* para realizar el análisis de los resultados.

En este punto, las limitaciones del entorno construido (método numérico, lenguaje de programación y paquetes) fueron claras. Principalmente, el método numérico no permite conocer los modos guiados de la estructura (capítulo 5). Entonces, los resultados obtenidos siempre estarán ubicados por encima del cono de luz (capítulo 3). Además, como *RCWA* está basado en la transformada de Fourier, se espera que los resultados sean dependientes de la cantidad de componentes de Fourier seleccionadas.

Finalmente, *Inkstone* y *RCWA4D* utilizan librerías como *NumPy* [109] y *SciPy* [110] para llevar a cabo los cálculos requeridos por el método. Estas dos librerías utilizan *OpenBlas* [111] para realizar cálculos básicos de álgebra lineal aprovechando múltiples procesadores. Esta paralelización, en conjunto con *Mpi4Py* [112], permitieron dividir las tareas computacionales en subgrupos bien distribuidos a lo largo de los nodos de la máquina, lo contribuyó a sacar provecho del clúster que se tenía a disposición. Las especificaciones de este se encuentran listadas en la tabla 1.1.

Es importante mencionar que, inicialmente, algunos de los cálculos también fueron realizados en una estación de trabajo (sus especificaciones se encuentran en la tabla 1.2). Sin embargo, dada la carga computacional de las simulaciones realizadas, fue necesario emplear el clúster mencionado anteriormente.



| Característica                   | Especificación                                                                                                                        |
|----------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Sistema operativo                | Rocks Cluster Distribution                                                                                                            |
| Nodos totales                    | 7                                                                                                                                     |
| Modelo de Procesadores           | 3× Intel® Xeon® CPU E5-2630 v4 @ 2.20GHz<br>2× Intel® Xeon® CPU E5-2680 0 @ 2.70GHz<br>2× Intel® Xeon® CPU E5-2630L v2 @ 2.40GHz      |
| Distribución de CPUs             | 3 nodos con 20 CPUs físicos (40 hilos c/u)<br>2 nodos con 16 CPUs físicos (32 hilos c/u)<br>2 nodos con 6 CPUs físicos (12 hilos c/u) |
| Total de CPUs físicos            | 104                                                                                                                                   |
| Total de hilos disponibles       | 208                                                                                                                                   |
| Arquitectura                     | x86_64                                                                                                                                |
| Hyper-Threading                  | Activado                                                                                                                              |
| RAM por nodo                     | 62 GB                                                                                                                                 |
| SWAP por nodo                    | 63 GB                                                                                                                                 |
| Almacenamiento por nodo          | 2.7 TB HDD                                                                                                                            |
| Almacenamiento en nodo principal | 4× 10.4 TB HDD                                                                                                                        |
| Gestor de trabajos               | Sun Grid Engine (SGE) 8.1.9                                                                                                           |

Tabla 1.1: Tabla de especificaciones del clúster utilizado para realizar los cálculos numéricos.

| Característica             | Especificación                |
|----------------------------|-------------------------------|
| Sistema Operativo          | Ubuntu 24.04.2 LTS            |
| Modelo del procesador      | Intel® Xeon® W-2295 @ 3.00GHz |
| Total de CPUs físicos      | 18                            |
| Total de hilos disponibles | 36                            |
| Arquitectura               | x86_64                        |
| Hyper-Threading            | Activado                      |
| RAM disponible             | 62.5 GB                       |
| Almacenamiento             | 250 GB SSD                    |

Tabla 1.2: Tabla de especificaciones de la estación de trabajo *Dell Precision 5820 Tower*, utilizada de manera temporal durante el proyecto.

## 1.2. Etapa 2

Con el objetivo de identificar errores, nuevas limitaciones y fuentes de error, se diseñó esta etapa para someter a ensayo el entorno construido anteriormente.

Primero, como ejercicio académico y evaluación del entorno, se hicieron pruebas de fenómenos físicos bien conocidos en la refracción de la luz, como la ley de reflexión, la ley de Snell, reflexión interna total y el ángulo de Brewster. Durante estas pruebas, el desempeño del entorno fue medido de manera cuantitativa utilizando el coeficiente de correlación de Pearson entre los resultados numéricos y los resultados analíticos expuestos en [56].

Seguido de esto, se realizaron pruebas con sistemas periódicos. Inicialmente, se simuló un espejo de Bragg. Se obtuvieron espectros de transmitancia y la estructura de bandas, y se compararon cualitativamente con trabajos anteriores [17, 75] (en este punto se exploró la posibilidad de encontrar el diagrama de bandas a partir de la transformada de Fourier de la amplitud del campo eléctrico, ver el capítulo 5). De manera análoga, se analizó una lámina de cristal fotónico bidimensional y se compararon los resultados de su espectro de transmitancia y estructura de bandas con la literatura de manera cualitativa [36, 42]. En este caso se aplicó el método de espectroscopía resuelta en ángulo (capítulo 3) para obtener el diagrama de bandas y los resultados también fueron contrastados con un método numérico conocido como *Expansión de modos guiados* [77]. Este punto también fue fundamental para comprender cómo depende la convergencia de *RCWA* de la cantidad de parámetros de Fourier utilizados en la simulación. Para esto, se compararon los resultados del espectro de transmitancia para números distintos de parámetros de Fourier. También se realizó la reconstrucción espacial del índice de refracción del sistema a partir de las componentes de Fourier involucradas en la simulación; la precisión y exactitud del índice de refracción reconstruido con el índice de refracción ideal fue el criterio utilizado a lo largo del trabajo para seleccionar la cantidad de componentes de Fourier de la simulación. Además, en aquellos casos donde el criterio arrojó un número de componentes de Fourier que condujo a tiempos de computación relativamente cortos para la disponibilidad de la máquina utilizada, se seleccionó una cantidad de componentes de Fourier mayor, buscando una redundancia numérica.

Tras finalizar las pruebas necesarias para evaluar el correcto desempeño del entorno, era posible continuar con la simulación de los sistemas cuasi-cristalinos. Sin embargo, resultó razonable realizar un paso intermedio: el objetivo es analizar el comportamiento óptico de estructuras bicapa cuya red recíproca es no conmensurada debido a la superposición desigual de las láminas de cristal fotónico involucradas. Por lo tanto, se plantearon pruebas de concepto a una escala reducida; simulaciones de sistemas compuestos por dos capas de láminas de cristal fotónico cuya red recíproca sí es conmensurada. Para esto, se simuló la superposición de dos rejillas de difracción idénticas, aplicándoles desplazamientos y giros relativos entre sí. Estas simulaciones comprendieron el cómputo de los espectros de transmitancia para observar las resonancias de Fano de los sistemas. Al finalizar esta sección de la etapa, se realizó un primer acercamiento a las estructuras cuasicristalinas, compuestas por un giro relativo entre láminas de cristal fotónico bidimensional superpuestas, a través del cálculo del espectro de transmitancia en el punto  $\Gamma$  de la primera zona de Brillouin y en función del giro entre ambas capas. Cabe resaltar que, gracias a que la ecuación maestra es escalable espacialmente (capítulo 2), estas simulaciones fueron realizadas considerando longitudes de onda normalizadas.

### 1.3. Etapa 3

Esta fue la etapa final del proyecto, donde se aplicó lo aprendido anteriormente para analizar los sistemas bilaminares propuestos. La figura 1.2 describe correctamente los dos sistemas seleccionados. El primer sistema está constituido por el desplazamiento relativo entre dos rejillas de difracción. Y, de manera análoga, el segundo sistema está construido a partir del giro relativo entre dos láminas de cristal fotónico compuestas por agujeros cilíndricos en una red cuadrada. Para ambos sistemas se calcularon los espectros de transmitancia en función del parámetro  $\alpha$  a varias frecuencias en el punto  $\Gamma$  de la primera zona de Brillouin.

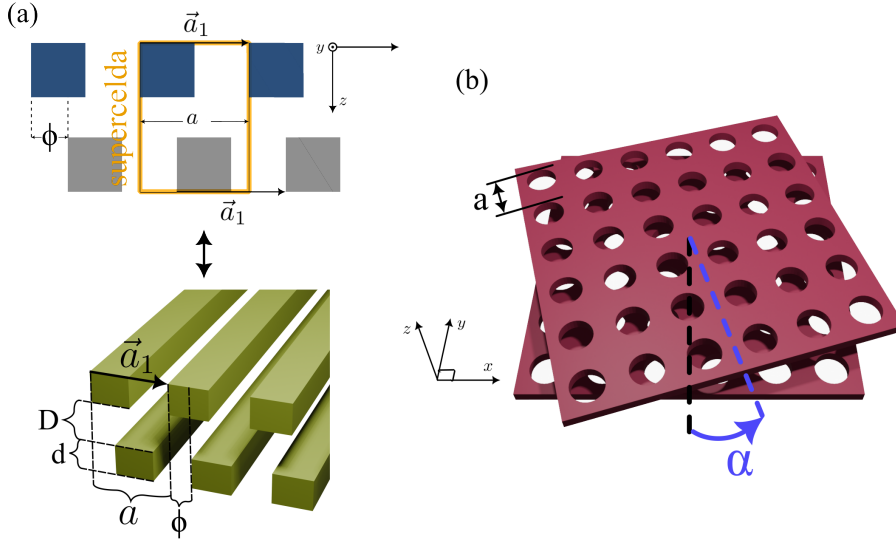


Figura 1.2: Representación diagramática de dos sistemas bicapa compuestos por (a) el desplazamiento entre dos rejillas de difracción superpuestas de manera paralela y (b) dos láminas de cristal fotónico con red cuadrada giradas entre sí un ángulo  $\alpha$ .

Este trabajo contempla la posibilidad de retroalimentarse con una exploración experimental de estos sistemas cuasi-cristalinos. Por lo tanto, el siguiente paso fue considerar los factores de manufacturabilidad y levantar algunas limitaciones del modelo que eran permitidas por *RCWA*. Por ejemplo, hasta ahora se consideraron índices de refracción fijos y de valor real. Sin embargo, en la realidad, los índices de refracción son dependientes de la frecuencia de la luz y en algunos casos, en materiales que presentan absorción de la luz, toman valores complejos, cuya parte imaginaria se conoce como el coeficiente de extinción  $k$  [113]. Esto implica que los resultados obtenidos no pueden ser escalables a cualquier longitud de onda, es decir, se debe tener en cuenta la región del espectro electromagnético en la que son válidos. Tomando en cuenta estas nuevas consideraciones se procedió con las simulaciones. Al igual que en el paso anterior, para ambos sistemas se calcularon los espectros de transmitancia en función del parámetro  $\alpha$ , para varias frecuencias.

Cabe resaltar que, si bien, materiales como el silicio (Si), el dióxido de titanio ( $\text{TiO}_2$ ), el dióxido de silicio ( $\text{SiO}_2$ ) y el arsenuro de galio (GaAs) podrían ser candidatos experimentales (pues son dieléctricos y han sido ampliamente utilizados en la fabricación de cristales fotónicos), a la fecha, el proyecto de investigación experimental se encuentra en una etapa temprana. Por lo que los materiales aquí simulados no se corresponderán, necesariamente, con los materiales que serán utilizados en el futuro. Sin embargo, está claro que se emplearán materiales dieléctricos. Por lo tanto, los archivos de simulación, desarrollados en este trabajo, podrán ser empleados sin cambios mayores a la modificación del índice de refracción, la escala espacial y el rango de frecuencias del material.

Finalmente, con estos resultados se procedió a seleccionar los comportamientos más interesantes, y las estructuras que los presentan, para proponer dos dispositivos ópticos basados en estos sistemas bicapa.

## 2. Cristales Fotónicos

---

El primer paso para analizar el comportamiento de la luz en una estructura de Moiré, como las descritas anteriormente, es comprender cómo se propagan los campos eléctrico y magnético a través de un cristal fotónico. Por lo tanto, a lo largo de este capítulo se expondrán las propiedades generales de los cristales fotónicos, abordando una ecuación, derivada de las ecuaciones de Maxwell, que describe estos sistemas y de la cual se extraen los conceptos de modos propios y estructura de bandas. Adicionalmente, se realiza una pequeña revisión de la red recíproca y la primera zona de Brillouin, conceptos necesarios para abordar este problema.

Desde una perspectiva geométrica, los cristales fotónicos son medios que se extienden por todo el espacio y presentan un índice de refracción  $n$  ordenado y periódico, el cual puede caracterizarse, espacialmente, mediante la siguiente ecuación [17]:

$$n(\mathbf{r}) = n(\mathbf{r} + \mathbf{R}). \quad (2.1)$$

En general, el índice de refracción de los cristales fotónicos cambia de manera discreta en el espacio. Por lo tanto, para evitar redundancias, el vector  $\mathbf{R}$  es descrito a través de una superposición de la forma

$$\mathbf{R} = n\mathbf{a}_1 + m\mathbf{a}_2 + l\mathbf{a}_3 \quad n, m, l \in \mathbb{Z}, \quad \mathbf{R} \in \mathbb{R}^3, \quad (2.2)$$

donde  $\mathbf{a}_i$  son los vectores de red del cristal fotónico. La cantidad de vectores de red necesarios para describir la geometría de un cristal fotónico, varía dependiendo de la cantidad de direcciones en las que el índice de refracción es periódico. Por ejemplo, si el índice de refracción de un cristal fotónico es periódico en una única dirección, será necesario un único vector de red y se dice que el cristal fotónico es unidimensional. Por lo tanto, los cristales fotónicos pueden ser clasificados como unidimensionales, bidimensionales y tridimensionales (Figura 2.1).

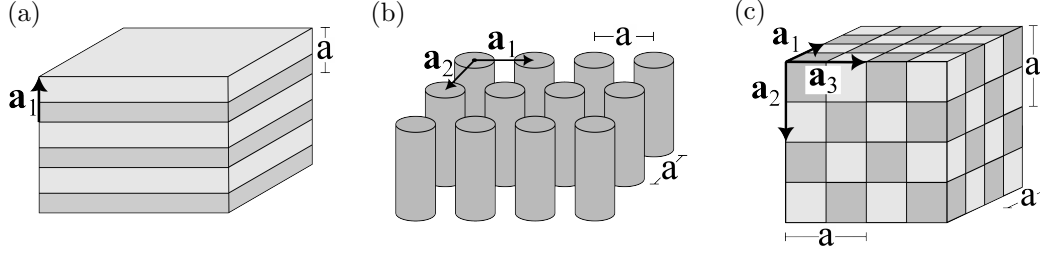


Figura 2.1: Ejemplos de cristales fotónicos: (a) unidimensional, (b) bidimensional y (c) tridimensional, donde cada color representa un índice de refracción distinto. En cada ejemplo se muestran los vectores y el parámetro de red para cada estructura.

### 2.1. Red recíproca y primera zona de Brillouin

Antes de continuar con el acercamiento teórico de los cristales fotónicos, resulta conveniente revisar un par de conceptos realmente útiles para este objetivo. Las estructuras cristalinas pueden ser descritas a través de una función periódica que cumple  $f(\mathbf{r}) = f(\mathbf{r} + \mathbf{R})$ . Generalmente, el vector  $\mathbf{R}$  suele tener la forma 2.2 y describe un conjunto de puntos que es conocido como la red real de la estructura cristalina [8]. En este sentido, la red recíproca, cuyos elementos son de gran utilidad para describir fenómenos físicos, es la representación en el espacio de Fourier de la red real y, de manera análoga, también es descrita a través de la superposición entera de vectores  $\mathbf{b}_i$

$$\mathbf{G} = n'\mathbf{b}_1 + m'\mathbf{b}_2 + l'\mathbf{b}_3 \quad n', m', l' \in \mathbb{Z}, \quad (2.3)$$

conocidos como los vectores recíprocos. Estos pueden ser calculados a través de los vectores de red:

$$\mathbf{b}_i = 2\pi \frac{\mathbf{a}_j \times \mathbf{a}_k}{\mathbf{a}_i \cdot (\mathbf{a}_j \times \mathbf{a}_k)}, \quad \epsilon_{ijk} = 1, \quad (2.4)$$

donde  $\epsilon_{ijk}$  representa al símbolo de *Levi-Civita* y cumplen  $\mathbf{G} \cdot \mathbf{R} = 2\pi N$ , para  $N \in \mathbb{Z}$ . Una de las grandes ventajas de tomar en consideración la red recíproca es que, al calcular la transformada de Fourier de una función periódica, solo se necesitan tomar los términos que involucran los vectores de onda  $\mathbf{G}$  [17].

Por otra parte, los fenómenos físicos en sistemas cristalinos suelen ser caracterizados a través de un vector de onda que identifica la oscilación en el medio. Curiosamente, alrededor de cada punto  $\mathbf{G}$  es posible definir una porción del espacio recíproco, conocida como la primera zona de Brillouin, que contiene la información suficiente para describir la propagación de ondas en medios periódicos [8, 17]. En la figura 2.2, se presenta la construcción de esta región para una red cuadrada y una red hexagonal: tras identificar un punto de la red recíproca  $\Gamma$  (usualmente se selecciona el origen de coordenadas), se trazan bisectores perpendiculares en cada segmento de recta que une dicho punto y sus primeros vecinos (aquellos puntos de  $\mathbf{G}$  más cercanos a  $\Gamma$ ), de esta manera, el área o volumen delimitado por los bisectores se conoce como la primera zona de Brillouin. En la figura 2.2, también se puede observar que existen ciertos puntos que

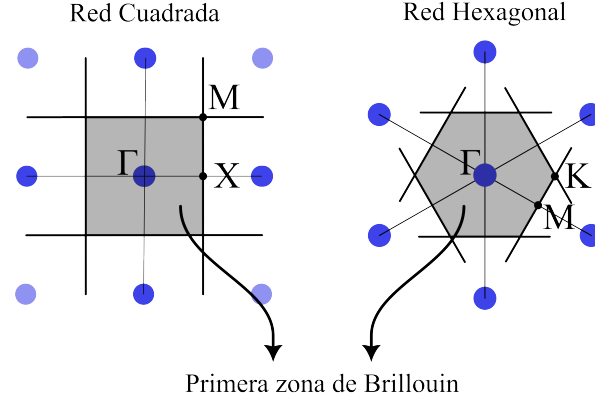


Figura 2.2: Representación diagramática de la construcción de la primera zona de Brillouin, área sombreada, para una red cuadrada y una red hexagonal. Los puntos azules representan la red recíproca y los puntos negros representan puntos de alta simetría en la primera zona de Brillouin.

reciben un nombre propio, los puntos negros; esto se debe a que son puntos de alta simetría que resultan cruciales para comprender los fenómenos físicos en sistemas cristalinos [8].

## 2.2. Ecuación Maestra

El objetivo de esta sección es describir el problema de los cristales fotónicos a través de un problema de valores y vectores propios. Para esto es necesario partir de las ecuaciones de Maxwell que describen comportamiento de los campos eléctrico  $\mathbf{E}$  y magnético  $\mathbf{H}$  en materiales [56]:

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{D} &= \rho, & \nabla \times \mathbf{E} + \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} &= 0, \\ \nabla \cdot \mathbf{B} &= 0, & \nabla \times \mathbf{H} - \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} &= \mathbf{J}, \end{aligned} \tag{2.5}$$

donde  $\mathbf{D}$  y  $\mathbf{B}$  son los campos de densidad de flujo eléctrico y magnético, respectivamente. También es necesario realizar algunas consideraciones. Primero, el tipo de materiales involucrados en el problema tienen una respuesta óptica lineal, por lo tanto [17]

$$\mathbf{D} = \epsilon_0 \epsilon(r) \mathbf{E}, \tag{2.6}$$

$$\mathbf{B} = \mu_0 \mu(r) \mathbf{H}, \tag{2.7}$$

donde  $\epsilon_0$  y  $\mu_0$  son la permitividad eléctrica y la permeabilidad magnética del vacío, respectivamente, y  $\epsilon(\mathbf{r})$  y  $\mu(\mathbf{r})$  son la permitividad eléctrica relativa y la permeabilidad magnética relativa del material. Segundo, se toma  $\mu(\mathbf{r}) = 1$  pues es una aproximación comúnmente empleada en dieléctricos [56]. Y tercero, se asume la ausencia de cargas (fuentes y sumideros

del campo eléctrico) y de corrientes (inductores de campo magnético). De esta manera, las ecuaciones de Maxwell toman la forma:

$$\begin{aligned}\nabla \cdot \epsilon(r)\mathbf{E} &= 0, & \nabla \times \mathbf{E} + \mu_0 \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} &= 0, \\ \nabla \cdot \mathbf{H} &= 0, & \nabla \times \mathbf{H} - \epsilon_0 \epsilon(r) \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} &= 0.\end{aligned}\tag{2.8}$$

A continuación, se escriben  $\mathbf{E}$  y  $\mathbf{H}$  en términos de una función con variables separadas. Para esto, se plantea una expansión de ambos campos en un conjunto de modos armónicos explícitamente dependientes de la frecuencia temporal  $\omega$ . Estos modos toman la siguiente forma:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = e^{-i\omega t} \mathbf{E}(\mathbf{r}), \tag{2.9}$$

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}, t) = e^{-i\omega t} \mathbf{H}(\mathbf{r}). \tag{2.10}$$

Cabe resaltar que el uso de la exponencial compleja es por conveniencia matemática. Al reemplazar estos resultados en 2.8, se obtiene

$$\nabla \cdot \epsilon(r)\mathbf{E}(\mathbf{r}) = 0, \tag{2.11}$$

$$\nabla \cdot \mathbf{H}(\mathbf{r}) = 0 \tag{2.12}$$

$$\nabla \times \mathbf{E} - i\omega\mu_0\mathbf{H}(\mathbf{r}) = 0, \tag{2.13}$$

$$\nabla \times \mathbf{H} + i\omega\epsilon_0\epsilon(r)\mathbf{E}(\mathbf{r}) = 0. \tag{2.14}$$

De esta forma, al dividir 2.14 por  $\epsilon(\mathbf{r})$ , calcular el rotacional y reemplazar 2.13, se obtiene la ecuación maestra:

$$\nabla \times \frac{1}{\epsilon(\mathbf{r})} \nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}) = \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \mathbf{H}(\mathbf{r}), \tag{2.15}$$

donde  $c$  es la velocidad de la luz en el vacío. Las características más importantes de esta ecuación son que es una ecuación diferencial lineal desacoplada de  $\mathbf{E}(\mathbf{r})$  y sintetiza el problema de los cristales fotónicos en un problema de valores y vectores propios del operador diferencial

$$\hat{\Theta} = \nabla \times \frac{1}{\epsilon(\mathbf{r})} \nabla \times, \tag{2.16}$$

pues permite identificar que los modos  $\mathbf{H}(\mathbf{r})$  permitidos en el sistema son aquellos que, al ser operados por  $\hat{\Theta}$ , resultan en sí mismos multiplicados por un escalar. Además, 2.15 no depende de la escala espacial seleccionada. Es decir, la ecuación maestra sigue siendo válida si se reemplaza  $r \rightarrow r/a$  y  $\omega \rightarrow \omega a/c$  [17]. Por lo tanto, las soluciones que serán obtenidas más adelante podrán ser aplicadas a cualquier escala realizando una selección correcta de  $a$ . Por

otra parte, antes de continuar con las consecuencias de este resultado, es importante mencionar que las ecuaciones 2.11 y 2.12 implican la ausencia de fuentes y sumideros de campo eléctrico y magnético. Es decir, los campos eléctricos y magnéticos se propagan a través de los cristales fotónicos en forma de ondas electromagnéticas transversales. Además, una vez identificados los modos  $\mathbf{H}(\mathbf{r})$  que resuelven la ecuación 2.15, es posible calcular los modos de campo eléctrico correspondientes mediante:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \frac{i}{\omega \epsilon_0 \epsilon(\mathbf{r})} \nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}). \quad (2.17)$$

### 2.3. Estructura de bandas

La propagación de las ondas electromagnéticas en cristales fotónicos tiene múltiples similitudes con la propagación de los electrones en semiconductores [17]. Esto se debe a varias razones:

- El operador  $\hat{\Theta}$  es hermítico [17], al igual que el operador hamiltoniano  $\hat{H}$  que describe los semiconductores [8]. Por lo tanto, sus valores propios son reales.
- Al igual que los vectores propios de  $\hat{H}$ , los vectores propios de  $\hat{\Theta}$  son ortonormales entre sí, si se define el producto interno  $(\cdot, \cdot)$  de dos funciones vectoriales  $\mathbf{F}, \mathbf{G} : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$  como [17]:

$$(\mathbf{F}, \mathbf{G}) = \int d^3\mathbf{r} \mathbf{F}^*(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{G}(\mathbf{r}), \quad (2.18)$$

donde  $\mathbf{F}^*$  es el complejo conjugado de  $\mathbf{F}$ . Además, para todo  $\mathbf{F}'$  con  $(\mathbf{F}', \mathbf{F}') \neq 1$ , es posible encontrar un modo equivalente  $\mathbf{F}$  que cumple  $(\mathbf{F}, \mathbf{F}) = 1$  a través de

$$\mathbf{F} = \frac{\mathbf{F}'}{\sqrt{(\mathbf{F}', \mathbf{F}')}}. \quad (2.19)$$

Debido a que el operador  $\hat{\Theta}$  es lineal, se garantiza que  $\mathbf{F}'$  y  $\mathbf{F}$  son modos equivalentes entre sí, ya que únicamente difieren en un escalar.

- Anteriormente se describió la periodicidad del índice de refracción a través de  $n(\mathbf{r}) = n(\mathbf{r} + \mathbf{R})$ . Al considerar  $\mu(\mathbf{r}) = 1$ , se obtiene  $\epsilon(\mathbf{r}) = \epsilon(\mathbf{r} + \mathbf{R})$ . Dado que la permitividad eléctrica está directamente involucrada en el operador  $\hat{\Theta}$ , este operador también es periódico en el espacio. Esto constituye un análogo claro con la teoría cuántica de semiconductores.

Por lo tanto, resulta razonable aplicar las herramientas utilizadas en la física del estado sólido para resolver la ecuación 2.15. En particular, aplicar el teorema de Bloch [8] resulta de gran utilidad para interpretar y encontrar las soluciones de la ecuación maestra. En este contexto, el teorema de Bloch sostiene que los modos propios del operador  $\Theta$  toman la siguiente forma [57]:

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}) = \mathbf{H}_{\mathbf{k}n}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \mathbf{u}_{\mathbf{k}n}(\mathbf{r}), \quad (2.20)$$

donde  $\mathbf{k}$  es el vector de onda de la oscilación y  $\mathbf{u}_{\mathbf{k}n}(\mathbf{r})$  cumple  $\mathbf{u}_{\mathbf{k}n}(\mathbf{r}) = \mathbf{u}_{\mathbf{k}n}(\mathbf{r} + \mathbf{R})$ . Es decir,  $\mathbf{u}_{\mathbf{k}n}(\mathbf{r})$  contiene la misma periodicidad del índice de refracción. De hecho, los modos 2.20 también son periódicos en los vectores de onda, pues los valores  $\mathbf{k}$  y  $\mathbf{k} + \mathbf{G}$ , donde  $\mathbf{G}$  es un



punto de la red recíproca, son equivalentes [17]. Por lo tanto, para conocer todas las soluciones a este problema solo es necesario investigar una porción del espacio recíproco: la primera zona de Brillouin.

Continuando con el desarrollo, al reemplazar 2.20 en 2.15, se obtiene:

$$\hat{\Theta}_{\mathbf{k}} \mathbf{u}_{\mathbf{k}n}(\mathbf{r}) = \left( \frac{\omega_n(\mathbf{k})}{c} \right)^2 \mathbf{u}_{\mathbf{k}n}(\mathbf{r}). \quad (2.21)$$

Esto simplifica un poco más el problema, pues se reduce el conjunto de soluciones a un conjunto de funciones vectoriales que deben cumplir con la condición de periodicidad del cristal. Por otro lado, dado que el operador  $\hat{\Theta}_{\mathbf{k}} = (\nabla + i\mathbf{k}) \times \frac{1}{\epsilon(\mathbf{r})} (\nabla + i\mathbf{k}) \times$  depende explícitamente de  $\mathbf{k}$ , existen múltiples valores propios para cada valor del vector de onda, los cuales serán distinguidos con la letra  $n$ . Estos valores propios del operador  $\hat{\Theta}_{\mathbf{k}}$  definen un conjunto de funciones  $\omega_n(\mathbf{k})$ ; este conjunto es llamado la estructura de bandas, o diagrama de bandas, del cristal fotónico y, en general, puede ser un espectro de frecuencias discreto o continuo. En este caso, dada la periodicidad de  $\mathbf{u}_{\mathbf{k}}$ , los modos  $\mathbf{H}(\mathbf{r})$  están acotados espacialmente (2.20). Por lo tanto, el espectro de valores propios  $\omega_n(\mathbf{k})$  conforman un conjunto discreto. Sin embargo, esto no siempre será válido. En el capítulo 3 se presentará un acercamiento un poco más realista a los cristales fotónicos, que permitirá conectar estas ideas y conceptos con las estructuras de Moiré descritas en la introducción de este trabajo. Además, se mostrará que su espectro de frecuencias es continuo en una región de la estructura de bandas.

De la estructura de bandas se puede extraer información relevante para predecir las propiedades ópticas de los cristales fotónicos. Por ejemplo, la velocidad de grupo de las ondas electromagnéticas, definida como  $\mathbf{v}_g = \nabla_{\mathbf{k}} \omega_n(\mathbf{k})$  [57], desempeña un rol importante en la respuesta óptica de estos materiales. Esta puede ser aprovechada para intensificar fenómenos ópticos, como la emisión estimulada, confinamiento de luz, propagación de luz ultra-lenta, etc [18, 58–62]. Por otra parte, puede existir un conjunto de ondas electromagnéticas con frecuencias  $\omega_g$  que no se propaguen a través del cristal. Esto ocurre debido a que ningún valor propio  $\omega_n$  toma los valores  $\omega_g$  para ningún  $\mathbf{k}$ . En consecuencia, no existe un modo  $\mathbf{H}$  con fase temporal  $e^{-i\omega_g t}$  que sea solución de la ecuación maestra. Por lo tanto, estas frecuencias no pueden propagarse a través del cristal fotónico. Esta propiedad tiene aplicaciones muy interesantes, como la fabricación de espejos con alto índice de reflectancia o guías de onda [63, 64].

Finalmente, un corolario del teorema de Bloch enuncia que el vector de onda  $\mathbf{k}$  es una cantidad conservada debido a que cumple

$$\mathbf{k}_f = \mathbf{k}_i + \mathbf{G}, \quad (2.22)$$

donde  $\mathbf{k}_i$  representa el vector de onda inicial y  $\mathbf{k}_f$  el vector de onda de las ondas planas generadas por el proceso de dispersión, respectivamente.  $\mathbf{G}$  es un vector de la red recíproca del cristal fotónico [57]. Se dice que el vector de onda se conserva, ya que la adición de un vector de la red recíproca no produce ningún cambio en el modo propio ni en su dirección de propagación. Esto es una consecuencia directa del plegamiento del espacio recíproco, donde toda la física del sistema se encuentra contenida en una región conocida como la primera zona de Brillouin.

### 3. Láminas de Cristal Fotónico

---

Si bien el acercamiento anterior proporciona información valiosa sobre los fenómenos que ocurren dentro de un cristal fotónico y ha sido ampliamente utilizado en múltiples estudios, no representa una aproximación completamente fiel a la realidad. Experimentalmente, no es posible obtener cristales fotónicos infinitamente grandes, y resulta muy difícil fabricar cristales fotónicos cuyo parámetro de red sea despreciable con respecto a todas sus dimensiones macroscópicas, lo cual sería consistente con la teoría. Por lo tanto, en este capítulo se presentarán las ideas y conceptos fundamentales para el estudio de láminas de cristal fotónico, ver la figura 3.1, que son estructuras con espesor finito y periódicas en una o dos direcciones sobre un plano suspendidas en un medio, usualmente aire. Esto es particularmente conveniente para este trabajo, ya que las estructuras Moiré que serán estudiadas más adelante estarán formadas por dos láminas de cristal fotónico superpuestas.

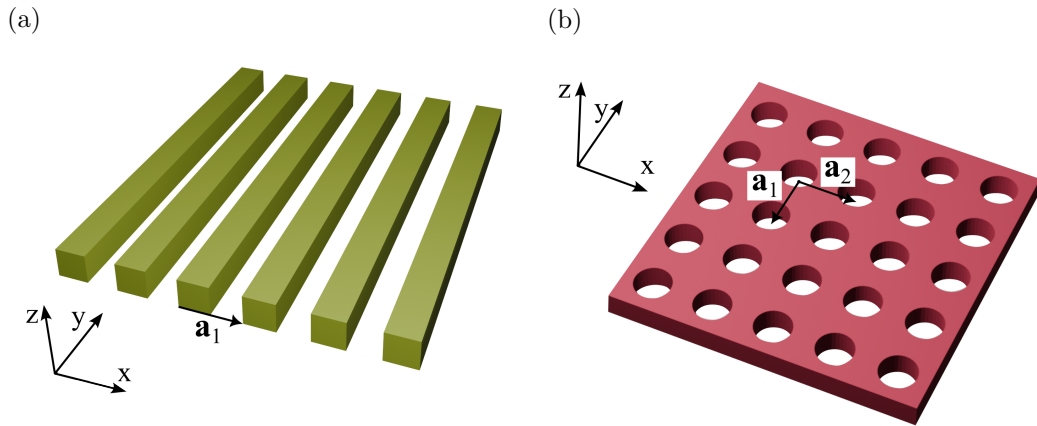


Figura 3.1: Secciones de ejemplo de láminas de cristal fotónico: (a) con periodicidad unidimensional (comúnmente conocida como rejilla de difracción) y (b) con periodicidad bidimensional. Los colores representan un índice de refracción distinto al del medio circundante. En cada caso, se ilustran los vectores de red correspondientes.

El hecho de que estas estructuras sean infinitas en el plano ( $xy$ ) y finitas en la dirección perpendicular ( $z$ ) provoca que la luz presente dos tipos de propagación dentro de la lámina de cristal fotónico.

El primer tipo sucede cuando luz, cuyo vector de onda tiene una componente  $k_z \neq 0$ , incide sobre la parte superior (o inferior) y, a través de un mecanismo que se expondrá más adelante, se acopla a la estructura en forma de una resonancia. El segundo tipo de propagación sucede cuando el vector de onda de la onda electromagnética no con componente vertical ( $k_z = 0$ ) y es confinada dentro de la estructura. En este contexto, los modos propios de las láminas de cristal fotónico, aquellos que resuelven 2.15, son clasificados en dos tipos [57]:

1. *Modos de fuga*, o resonancias guiadas, que pueden acoplarse a radiación externa.
2. *Modos guiados*, que están confinados dentro de la estructura.

### 3.1. Modos guiados

Los modos guiados y los modos de fuga son fácilmente diferenciables en la estructura de bandas, esto se debe a que presentan una frontera conocida como el cono de luz, definido por  $\omega = c||\mathbf{k}_{||}||$ , donde  $\mathbf{k}_{||} = k_x\mathbf{x} + k_y\mathbf{y}$  [17]. Aquellos modos que se encuentran por debajo del cono de luz ( $\omega_g < c||\mathbf{k}_{||}||$ ) se corresponden con los modos guiados (Fig. 3.2).

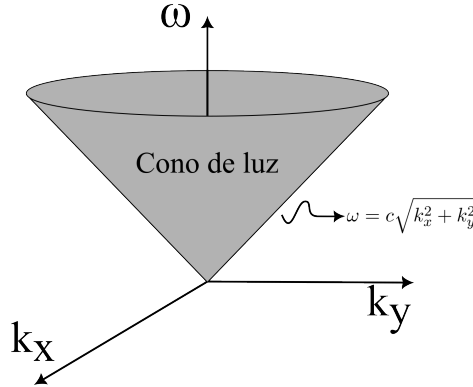


Figura 3.2: Representación diagramática del cono de luz en la estructura de bandas. Esta superficie delimita dos regiones del espacio: la región de espectro discreto, ubicada por debajo del cono de luz, donde se encuentran los modos guiados, y la región de espectro continuo, localizada por encima del cono de luz, donde se encuentran los modos de fuga.

Los modos guiados se extienden infinitamente a lo largo del plano de la lámina y decaen exponencialmente en la dirección vertical, fuera de esta [35]. Estos modos encuentran un índice de refracción efectivo mayor dentro de la lámina, por lo que el confinamiento de los campos se debe a un fenómeno semejante a la reflexión total interna [65]. Esta propiedad permite que sean aprovechados en múltiples aplicaciones relacionadas con la fabricación de interruptores ópticos, compuertas lógicas, guías de onda, biosensores, entre otros [66–71].

No es necesario entrar en detalles sobre la naturaleza de los modos guiados, pues en los capítulos siguientes se analizarán los efectos y fenómenos que surgen cuando la radiación exterior interactúa con la estructura. Debido a su naturaleza, estos modos no pueden acoplarse a la radiación exterior [17, 35, 36, 57] y, por lo tanto, no son relevantes para este trabajo. Por

el contrario, los modos de fuga, sí lo son, y serán fundamentales a partir de este punto.

### 3.2. Resonancias Guiadas o modos de fuga

Cuando un modo guiado alcanza el borde del cono de luz, se convierte en un modo de fuga, o resonancia guiada y cumple  $\omega_f > v||\mathbf{k}_{||}||$ . En este caso, la densidad electromagnética continúa estando fuertemente confinada en la lámina de cristal fotónico. Sin embargo, estas resonancias pueden ser excitadas por radiación electromagnética exterior [36].

El calculo de los modos de fuga para estas estructuras es sumamente complejo. Ya que, el espesor de la estructura, el tipo de red periódica y los índices de refracción involucrados afectan notoriamente el comportamiento de  $\omega_n(\mathbf{k})$ . Por lo tanto, resulta fundamental el apoyo de métodos numéricos para realizar estos cálculos. El método numérico seleccionado para este trabajo fue *Análisis Riguroso de Ondas Acopladas* (en inglés *Rigorous Coupled Wave analysis* o *RCWA*), un método diseñado para resolver las ecuaciones de Maxwell en arreglos de láminas de cristal fotónico [72, 73]. Más detalles sobre este método en el capítulo 5.

Por ejemplo, el espectro de transmitancia de una lámina de cristal fotónico con índice de refracción 3.46, red cuadrada con parámetro de red  $a$ , espesor  $1/2 a$  y huecos circulares de radio  $1/5 a$ , muestra un comportamiento muy similar a la transmitancia de una lámina dieléctrica uniforme del mismo espesor, figura 3.3(a), pero con un índice de refracción ligeramente inferior (para más detalles sobre la respuesta óptica de una lámina uniforme, consultar el anexo A). Este hecho sugiere la posibilidad de desarrollar una teoría basada en pequeñas perturbaciones aplicadas sobre una lámina de cristal fotónico uniforme con índice de refracción  $n_{avg}$ , pues La diferencia más evidente entre ambos espectros es la aparición de cuatro discontinuidades, entre  $0.40 c/a$  y  $0.55 c/a$ , que pueden ser atribuidas a la presencia de periodicidad en la lámina de cristal fotónico.

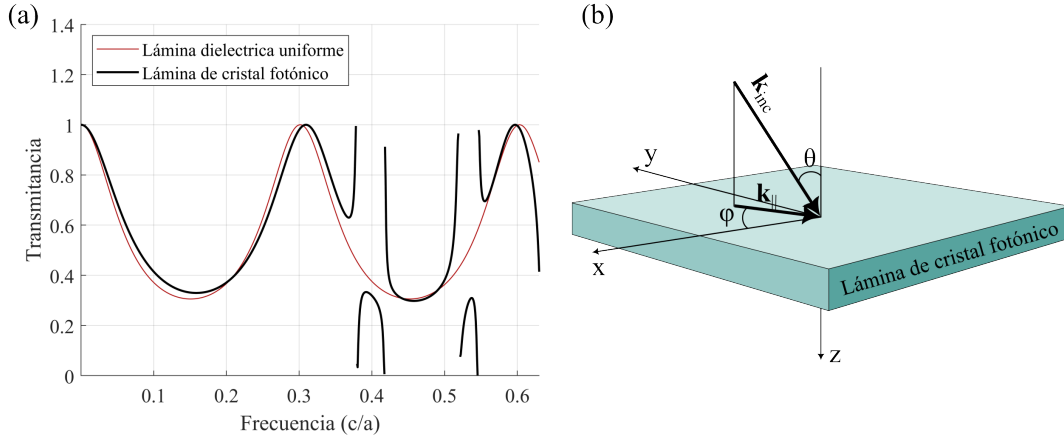


Figura 3.3: (a) Comparación del espectro de transmitancia de una lámina uniforme, con  $n = 3.16$  y espesor  $0.5a$ , calculado de manera analítica, y el espectro de transmitancia de una lámina de cristal fotónico de red cuadrada, con  $n = 3.46$ , parámetro de red  $a$ , espesor  $0.5a$  y huecos circulares de diámetro  $0.4a$ , calculado a través de *RCWA*. (b) Representación diagramática de una onda plana, con vector de onda  $\mathbf{k}_{inc}$ , incidiendo sobre una lámina de cristal fotónico con ángulos  $\theta$  y  $\varphi$ .

Una interpretación muy interesante sobre el mecanismo con el que la lámina de cristal fotónico afecta la transmisión y la reflexión de luz incidente sobre la estructura, fue propuesta por S. Fan y J.D. Joannopoulos [36]. Si se aplica la transformada de Fourier al espectro de transmitancia de la lámina de cristal fotónico, se obtiene la señal presentada en la figura 3.4(a). Esta señal puede interpretarse como la medición temporal de la amplitud del campo eléctrico transmitido, tras la incidencia normal de un pulso electromagnético sobre la estructura [74].

En particular, se destacan dos porciones de esta señal. La primera corresponde a la denominada *respuesta rápida*. Cuando el pulso electromagnético incide sobre la lámina de cristal fotónico, se registra una oscilación amplia del campo eléctrico (observar los ordenes de magnitud en la gráfica). Esta respuesta inicial es un proceso de transmisión directa, asociado a la interacción del pulso con la estructura general de la lámina. La transformada de Fourier de esta porción de la señal indica que la luz, inicialmente, observa la naturaleza uniforme de la estructura (Fig 3.4(b)). Pasado un tiempo, aparece la respuesta lenta, que presenta oscilaciones de menor amplitud en comparación con la respuesta rápida. Esto se debe a que es un proceso de transmisión indirecta: parte de la energía incidente sobre la lámina excita las resonancias guiadas de la lámina de cristal fotónico, y regresa al medio lentamente en forma de pequeñas oscilaciones del campo eléctrico. Este fenómeno se visualiza al calcular la transformada de Fourier de la respuesta lenta, donde aparecen picos con distribuciones lorentzianas en las frecuencias correspondientes a las discontinuidades del espectro de transmitancia de la lámina de cristal fotónico. De esta manera, es posible calcular el factor de calidad  $Q$  de las resonancias guiadas de una lámina de cristal fotónico a través de  $\omega/\delta\omega$ , donde  $\omega$  es la frecuencia central de la resonancia y  $\delta\omega$  es el ancho de la resonancia [36].

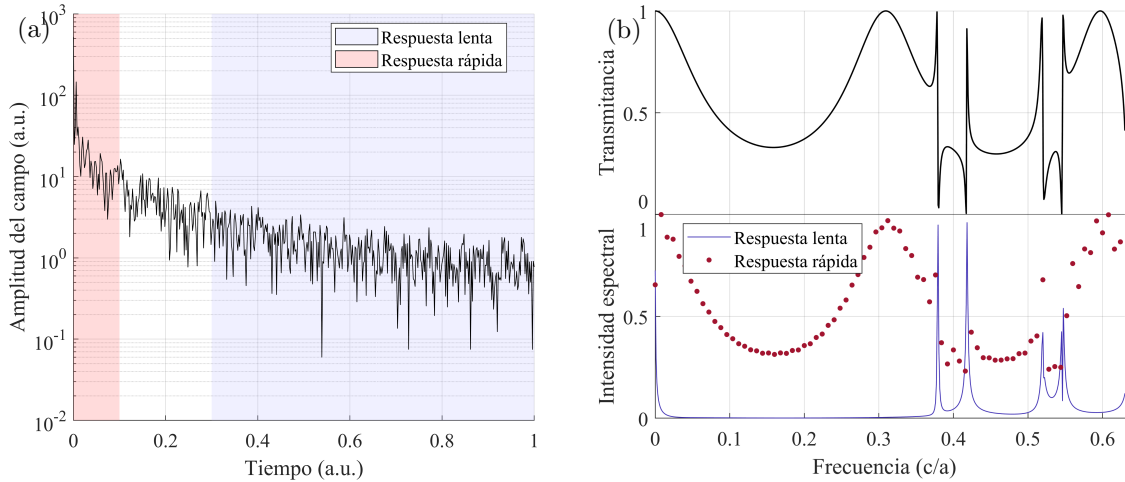


Figura 3.4: (a) Medición temporal de la amplitud del campo eléctrico transmitido tras la incidencia normal de un pulso electromagnético sobre la lámina de cristal fotónico. Se resaltan las regiones de la respuesta rápida y la respuesta lenta. (b) Comparación entre el espectro de transmitancia de la lámina de cristal fotónico y la transformada de Fourier de las respuestas rápida y lenta.

Esto implica que los modos de fuga de la lámina del cristal fotónico se manifiestan en el espectro de transmitancia en forma de resonancias de Fano. Reciben este nombre debido a que el mecanismo descrito anteriormente presenta una analogía con las resonancias de Fano en estado sólido y física atómica [36, 37]. De hecho, los modos de fuga solo pueden ser excitados por ondas planas que compartan su vector de onda [40, 57].

Por lo tanto, es posible determinar la estructura de bandas de las láminas de cristal fotónico mediante su espectro de transmitancia: Si una onda plana con vector de onda  $\mathbf{k}_{inc}$  incide sobre una lámina de cristal fotónico, con ángulos  $\theta$  y  $\varphi$  (figura 3.3(b)), y se observa una resonancia Fano alrededor de la frecuencia  $\omega$  de la onda plana, entonces es posible asegurar que una resonancia guiada con vector de onda

$$\mathbf{k}_{||} = k_{inc,x}\mathbf{x} + k_{inc,y}\mathbf{y} = \frac{\omega}{c} \sin(\theta) \sin(\varphi)\mathbf{x} + \frac{\omega}{c} \sin(\theta) \cos(\varphi)\mathbf{y} \quad (3.1)$$

ha sido excitada. De esta forma, con la selección correcta de  $\theta$  y  $\varphi$  es posible realizar una exploración completa de la primera zona de Brillouin. Este método, conocido como espectroscopia resuelta en ángulo [36–42], será ampliamente utilizado a lo largo de este trabajo para obtener el diagrama de bandas de las estructuras fotónicas analizadas.

Por ejemplo, este método, en combinación con *RCWA*, se utilizó para calcular la estructura de bandas de la lámina de cristal fotónico presentada como ejemplo durante esta sección. Los resultados se muestran en la figura 3.5. La figura 3.5(a) presenta la forma común con que se reporta el diagrama de bandas, mientras que la figura 3.5(b) ofrece una representación tridimensional de la estructura de bandas, proporcionando una perspectiva más general del espacio y del cono de luz.

Los cambios abruptos en la transmitancia, que aparecen como líneas bien definidas y afiladas, se corresponden con las resonancias guiadas de la estructura. Por otro lado, alrededor de  $0.3c/a$  y  $0.6c/a$  se observan las resonancias Fabry-Perot [65, 75, 76], las cuales están asociadas con la naturaleza uniforme de la lámina. Además, es importante mencionar que cerca del cono de luz la transmitancia disminuye notablemente debido a esta misma razón (Anexo A).

Estos resultados son un buen ejemplo para mostrar la complejidad del problema, pues la estructura de bandas puede llegar a ser altamente compleja. Por esta razón, las herramientas numéricas resultan de gran utilidad.

Finalmente, mencionar que no todas las resonancias guiadas de una lámina de cristal fotónico son visibles en el espectro de transmitancia. Algunas de ellas, conocidas como modos de-sacoplados, no pueden ser excitadas por radiación exterior debido a su simetría espacial. Estas resonancias son antisimétricas respecto a las ondas electromagnéticas externas a la lámina, lo que impide su acoplamiento [57].

### 3.3. Modos propios de una lámina dieléctrica uniforme

Tras evidenciar la similitud entre el espectro de transmitancia de una lámina dieléctrica uniforme y el de una lámina de cristal fotónico, se mencionó la posibilidad de plantear una aproximación de los modos guiados y de los modos de fuga de esta última a través de los modos propios de una lámina dieléctrica uniforme. Esto es posible si se consideran aquellos modos que se encuentran confinados al interior de la lámina uniforme [57], los cuales presentan un espectro discreto y se mantienen bajo el cono de luz, lo que sugiere que no pueden acoplarse a radiación externa (por esta razón no se observan alteraciones, como las resonancias Fano, en el espectro de transmitancia de la lámina dieléctrica uniforme en la figura 3.3). Además, la densidad de campo electromagnético de estos modos decae exponencialmente por fuera de

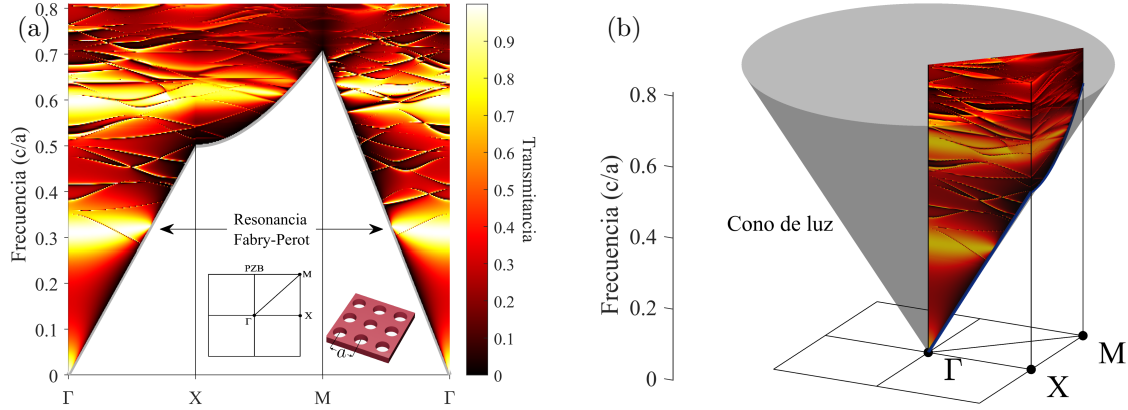


Figura 3.5: (a) Estructura de bandas de una lámina de cristal fotónico con red cuadrada con índice de refracción 3.46, cuyo parámetro de red es  $a$ , su espesor  $0.5a$  y está compuesta por agujeros cilíndricos de radio  $0.2a$ , calculada mediante una simulación de espectroscopia resuelta en ángulo usando *RCWA*. (b) Se observa cómo el cono de luz separa la estructura de bandas en dos regiones. Debido a que esta técnica de espectroscopia, así como el método *RCWA*, considera radiación externa incidente sobre la lámina, solo es posible observar la región superior al cono de luz.

la lámina dieléctrica uniforme, lo cual indica que la reflexión interna total juega un papel fundamental en este sistema. Ahora, si se considera la existencia artificial de una primera zona de Brillouin y se realiza el doblamiento de las curvas de dispersión de los modos propios de la lámina dieléctrica uniforme a través de los extremos de esta porción del espacio recíproco, se obtiene la aproximación de orden cero de los modos guiados y de los modos de fuga para cualquier cristal fotónico que cuente con dicha primera zona de Brillouin. [39].

En la figura 3.6(a) se encuentra la comparación entre la estructura de bandas de una lámina de cristal fotónico con índice de refracción 3.46 y red cuadrada (cuyo parámetro de red es  $a$  y está compuesto por agujeros cilíndricos de radio  $a/10$ ) y el doblamiento correspondiente de las curvas de dispersión de una lámina dieléctrica uniforme con índice de refracción 3.16. Inicialmente, vale la pena resaltar que, debido al doblamiento, los modos guiados de la lámina uniforme logran pasar a la parte superior del cono de luz, representado a través de la línea gris, lo cual los convierte en modos de fuga. También, se observa que los modos propios de la lámina uniforme se acercan considerablemente al caso cristalino. Dado que el radio de los agujeros de la lámina de cristal fotónico es pequeño, en comparación con su parámetro de red, ambos casos se diferencian muy poco entre sí. Por otra parte, en los puntos resaltados en la gráfica, los modos propios de la lámina dieléctrica uniforme presentan un alto degeneramiento, pues los puntos  $\Gamma$ ,  $X$  y  $M$  cuentan con múltiples simetrías [57]. Sin embargo, en la estructura de bandas de la lámina de cristal fotónico, se observa que este degeneramiento se levanta, pues las curvas se dividen en varias y no pasan, exactamente, por el mismo punto. Esto es una propiedad fundamental de las teorías de pequeñas perturbaciones, donde ocurre un levantamiento de los degeneramientos debido a la inclusión de una perturbación, en este caso, la red cristalina y los agujeros cilíndricos.

Cabe resaltar que mientras más se diferencie la lámina de cristal fotónico de una lámina dieléctrica uniforme, más alejados estarán sus modos propios de esta aproximación de orden cero. Esto, sumado al hecho de que resulta ser muy difícil desarrollar ordenes superiores de la



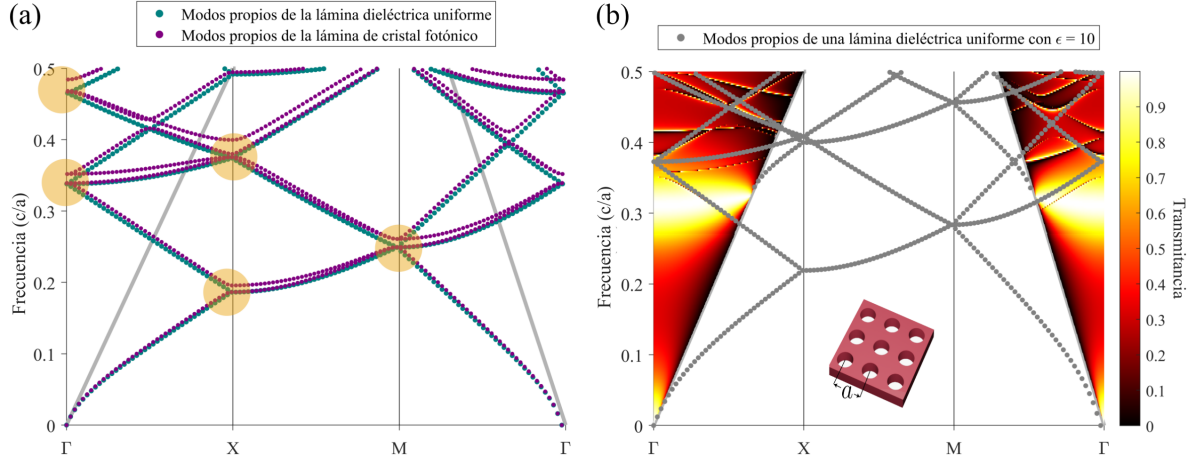


Figura 3.6: (a) Comparación entre los modos propios de una lámina dieléctrica uniforme, con índice de refracción 3.16 y espesor  $a$ , y una lámina de cristal fotónico, con índice de refracción 3.46, parámetro de red  $a$ , espesor  $a$  y huecos cilíndricos de radio  $a/10$ . El cono de luz es representado a través de líneas de color gris. Las zonas resaltadas permiten ubicar rápidamente puntos de alta simetría donde el degeneramiento se levanta para los modos propios de la lámina de cristal fotónico. (b) Comparación de la aproximación de orden cero, a través de los modos propios de una lámina dieléctrica uniforme con índice de refracción 3.16 y espesor  $0.5a$ , y la estructura de bandas de una lámina de cristal fotónico con índice de refracción 3.46, red cuadrada, parámetro de red  $a$ , espesor  $0.5a$  y huecos cilíndricos de radio  $0.2a$ .

aproximación, hace que las herramientas computacionales como *RCWA* sean más atractivas, pues permiten profundizar en el comportamiento óptico del sistema al tiempo que se obtiene la estructura de bandas. Por ejemplo, en la estructura 3.6(b) se encuentra la comparación entre una porción de la estructura de bandas de la figura 3.5(a) y la aproximación de orden cero correspondiente. En este caso, la aproximación no es tan buena, pues los agujeros tienen un radio mayor. Además, el cálculo de la transmitancia permite identificar que el acomplamiento de la radiación exterior a las resonancias guiadas se manifiesta en forma de una resonancia de Fano y, a la larga, esto permitiría hacer una comparación más directa entre la teoría y futuras mediciones experimentales.

Finalmente, los cálculos de la figura 3.6(a) y la aproximación de orden cero de la figura 3.6(b) han sido realizados a través de *Legume*, un paquete de programación de *Python* orientado al cálculo de la estructura de bandas de láminas de cristal fotónico a través del método *Guided-Mode Expansion* o *GME* [77]. Este paquete será de utilidad más adelante para evaluar los resultados de *RCWA*.

### 3.4. Matriz de Dispersión

Antes de abordar las estructuras de Moiré, que constituyen el objetivo principal de este trabajo, es importante desarrollar el concepto de Matriz de dispersión o matriz  $S$ , una herramienta particularmente útil para este tipo de problemas. La matriz de dispersión es un concepto motivado del estudio de múltiples sistemas cuyas respuestas a excitaciones pueden ser caracterizadas por un operador lineal. Por ejemplo, en la mecánica cuántica toma la forma



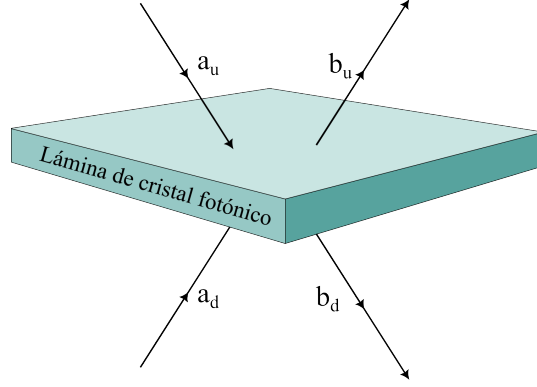


Figura 3.7: Diagrama de una lámina de cristal fotónico con ondas electromagnéticas planas incidentes, con amplitudes  $a_u$  y  $a_d$ , y ondas planas difractadas de primer orden, con amplitudes  $b_u$  y  $b_d$ . Las amplitudes  $a_i$  y  $b_i$  están relacionadas linealmente entre sí por la matriz  $S$ .

de un operador  $\hat{S}$  que transforma el estado inicial de una partícula que interactúa con un potencial dispersor,  $|\psi_{in}\rangle$ , en el estado final  $|\psi_{out}\rangle$  [78].

$$|\psi_{out}\rangle = \hat{S}|\psi_{in}\rangle. \quad (3.2)$$

En el contexto de las láminas de cristales fotónicos, la matriz  $S$  relaciona la luz que incide sobre una de estas (el estado de entrada) con la luz que es reflejada y transmitida (el estado de salida). Por ejemplo, al considerar dos ondas electromagnéticas planas, con amplitudes  $a_u$  y  $a_d$ , incidentes sobre una lámina de cristal fotónico, se obtienen dos ondas planas difractadas, con amplitudes  $b_u$  y  $b_d$ , que se propagan en direcciones contrarias, ver la figura 3.7. Entonces, la matriz  $S$  relaciona las amplitudes involucradas de la siguiente manera [37]:

$$\begin{pmatrix} b_u \\ b_d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} t_d & r_u \\ r_d & t_u \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_d \\ a_u \end{pmatrix} = S \begin{pmatrix} a_d \\ a_u \end{pmatrix}. \quad (3.3)$$

Debido a que la matriz de dispersión está construida de tal manera que sea la identidad en ausencia de una lámina de cristal fotónico, y que se consideran materiales no absorbentes, esta debe ser unitaria. Es decir,

$$SS^\dagger = S^\dagger S = \mathbb{I}, \quad (3.4)$$

donde  $\mathbb{I}$  representa a la matriz identidad y  $S^\dagger$  representa a la matriz transpuesta conjugada de  $S$ .

La matriz de dispersión es una herramienta clave para conocer el desempeño óptico de una estructura fotónica y analizar cómo depende de sus parámetros de diseño, así como de las características de la onda electromagnética incidente. Propiedades como el espesor, el tipo de red, los parámetros geométricos, y los índices de refracción de la lámina de cristal fotónico, junto con el vector de onda y la frecuencia de la onda incidente, influyen directamente en los valores de la matriz de dispersión. En este sentido, esta matriz sintetiza, en una sola representación matemática, la influencia de todos los parámetros involucrados en el problema.

Por estas razones, la matriz de dispersión es ampliamente utilizada en diversos métodos numéricos [55, 79], y se han realizado grandes esfuerzos para comprender su dependencia respecto a todos estos parámetros [80]. Además, permite determinar la estructura de bandas de cristales fotónicos mediante el análisis de sus valores propios [81]. También, al emplear un enfoque conocido como *Polología*, donde se considera que la matriz  $S$  puede depender de parámetros complejos, es posible establecer una conexión entre las resonancias de Fano que aparecen en el espectro de transmitancia de las láminas de cristal fotónico y los polos de la matriz  $S$  en el plano complejo de las frecuencias de la onda incidente [37, 42]. De hecho, si un polo de la matriz de dispersión se encuentra en  $\omega = \omega_r + i\omega_i$ , el factor de calidad de la resonancia guiada asociada a este polo es  $Q = \omega_r/2\omega_i$ .

Este análisis permite identificar un tipo de resonancia especial, cuyo polo de la matriz de dispersión se encuentra sobre la recta real. En consecuencia, su factor de calidad es infinito, lo cual implica un tiempo de vida también infinito. Estas resonancias son conocidas como *Estados acotados en el continuo* (*Bound States in the Continuum* o *BIC*, por sus siglas en inglés) y presentan fenómenos muy interesantes como [82–84] que permiten la construcción de biosensores, generación de armónicos, desarrollo de láseres, etc. [85–93].

Por último, es importante resaltar que, durante esta discusión, se asumió que solo un orden de difracción es propagativo. Esta suposición asegura que el proceso de difracción en campo lejano de una lámina de cristal fotónico pueda describirse por una matriz  $2 \times 2$  [37]. Más adelante, en el capítulo 5, se mostrará que el método de *RCWA* es capaz de calcular la matriz de dispersión considerando múltiples órdenes de difracción, manteniendo las características mencionadas en esta sección.

## 4. Sistema Bicapa de Láminas de Cristal Fotónico

---

Desde una postura geométrica, los cuasi-cristales son estructuras que se encuentran entre los cristales fotónicos, sistemas bien ordenados, y materiales amorfos [94]. Se caracterizan por la ausencia de simetrías traslacionales y la presencia de simetrías rotacionales, lo que les permite exhibir fenómenos únicos que no ocurren en estructuras cristalinas [1–5]. Al iniciar este trabajo fue necesario seleccionar el tipo de estructura macroscópica cuasi-cristalina que se quería estudiar. En la literatura existen múltiples ejemplos. Cada uno con distintas características que los hace más o menos atractivos. Ver la figura 4.1. Los cuasi-cristales basados en la secuencia de Fibonacci o en la teselación de Penrose, con simetrías rotacionales cuádruples, quíntuples u óctuples, e incluso aquellos diseñados a partir de un gradiente en sus elementos, son solo algunos ejemplos de la vasta cantidad y diversidad de opciones disponibles. No obstante, aquellas estructuras que resultaron más interesantes fueron los patrones de Moiré formados por la superposición desigual de dos láminas de cristal fotónico idénticas, figura 4.1(e).

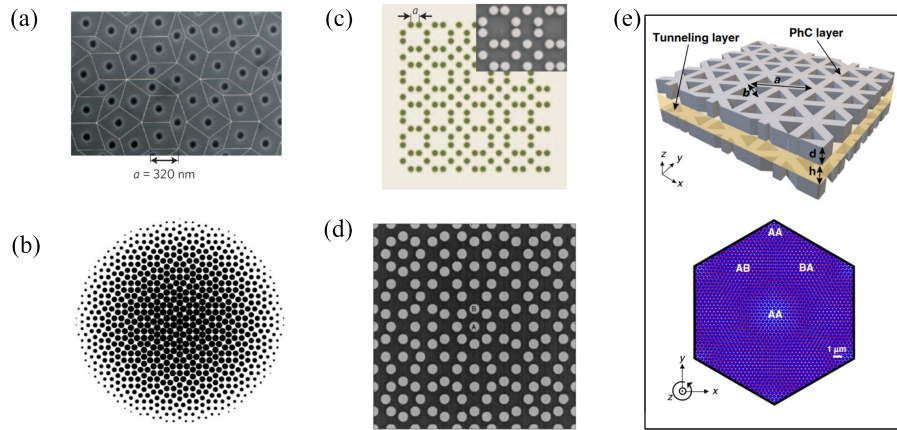


Figura 4.1: Ejemplos de estructuras fotónicas cuasi-cristalinas. Basadas en (a) la teselación de Penrose [1], (b) un gradiente de los elementos de un cuasi-cristal dodecagonal [2], (c) la secuencia de Fibonacci [3], (d) un mosaico octagonal [4] y (e) un patrón de Moiré [5].

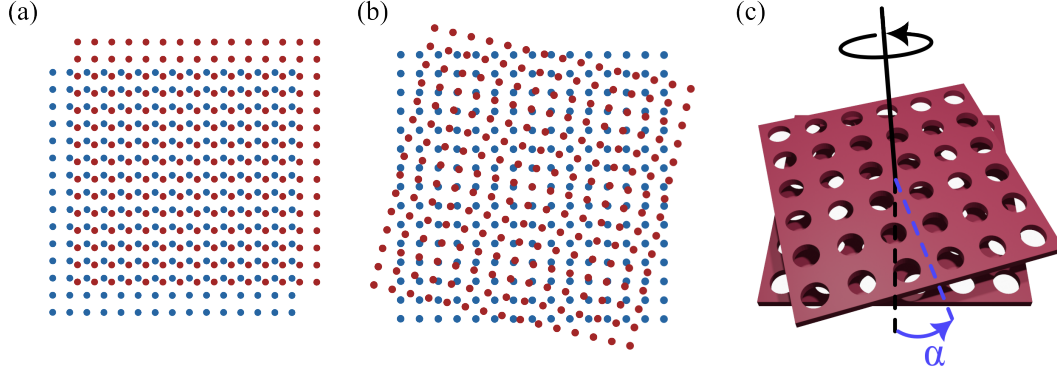


Figura 4.2: Ejemplos de patrones de Moiré, estructuras formadas por la disposición desigual de dos redes cristalinas (a) desplazadas entre sí y (b) rotadas entre sí. (c) Ejemplo del tipo de sistema seleccionado como objetivo de estudio en este trabajo, está conformado por dos láminas de cristal fotónico solapadas y con un giro relativo entre ambas.

#### 4.1. Patrones de Moiré

Los patrones de Moiré, en general, se forman cuando dos, o más, estructuras periódicas son superpuestas de manera inexacta [95]. Por ejemplo, la *super-red* que surge del solapamiento desigual de dos redes cuadradas idénticas, forma un patrón de Moiré. Ver las figuras 4.2 y 4.3. De hecho, en la cotidianidad se forman múltiples patrones de Moiré. Por ejemplo, se forman en las telas, debido a la superposición de los tejidos cristalinos, o al realizar una fotografía de alguna pantalla LED, suele aparecer un patrón de interferencia que es generado por la superposición desigual entre el sensor de la cámara y la pantalla que está siendo fotografiada (a este último patrón se le conoce como Moiré CCD).

En particular, las estructuras de interés son aquellas formadas por el solapamiento de dos láminas de cristal fotónico idénticas. En este tipo de sistema, el patrón de Moiré aparece en el momento que se realiza un desplazamiento o un giro relativo entre ambas láminas, ver las figuras 4.2(a) y 4.2(b), respectivamente. En este punto es importante resaltar que no todas las estructuras de Moiré son cuasi-cristalinas. Por ejemplo, no es difícil observar que el patrón de Moiré ilustrado en la figura 4.2(a) es, realmente, periódico (aún así, más adelante se presentarán algunos resultados relacionados con este tipo de estructuras, pues presentan comportamientos ópticos interesantes y su estudio fue de gran ayuda para lograr hacer simulaciones de las estructuras cuasi-cristalinas). En ese sentido, la estructura cuasi-cristalina aparecerá en el momento que las láminas sean giradas entre sí 4.2(b). No obstante, no todos los casos exponen una red cuasi-periódica, pues existen unos pocos ángulos de giro, conocidos como conmensurados, que exhiben patrones de Moiré periódicos. Aquellos ángulos de giro que generan estructuras cuasi-cristalinas se les conoce como no conmensurados o inconmensurados. De esta manera, aquellas estructuras que son generadas por un ángulo conmensurado, o inconmensurado, se les llama estructura conmensurada, o inconmensurada, respectivamente.

Por otro lado, es importante mencionar que, evidentemente, los patrones de Moiré aún se formarían cuando las láminas de cristal fotónico, superpuestas entre sí, sean distintas. De

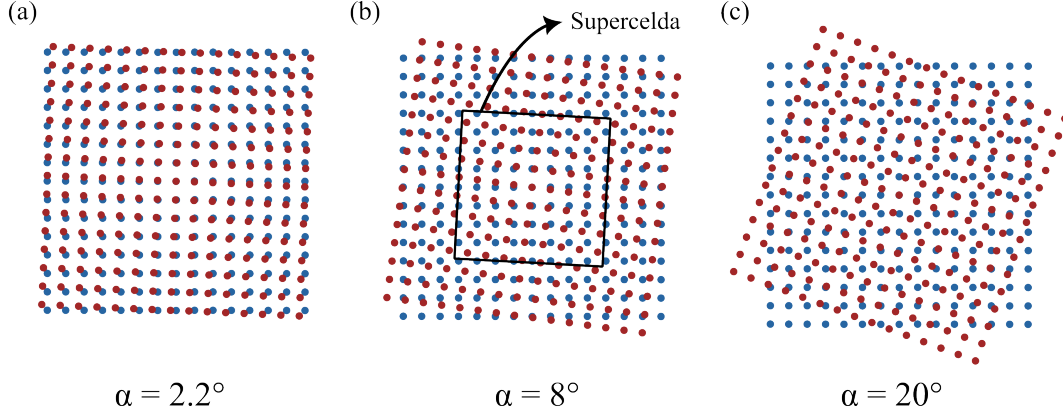


Figura 4.3: Ejemplos de Patrones de Moiré formados por la superposición de dos redes cuadradas con un giro relativo entre sí de (a)  $2.2^\circ$ , (b)  $8^\circ$  y (c)  $20^\circ$ . El recuadro negro en (b) representa la supercelda del patrón de Moiré.

hecho, el fenómeno no está restringido al solapamiento de, únicamente, un par de láminas. Sin embargo, considerar cada uno de esos casos (variaciones en los índices de refracción, tipos de red, periodicidades, espesores, cantidad de láminas, entre otros parámetros geométricos) complica el problema notablemente y su estudio haría parte de un trabajo mucho más robusto y extenso. De modo que, en este trabajo, se ha decidido trabajar exclusivamente con la superposición de dos láminas de cristal fotónico idénticas.

Ahora bien, los patrones de Moiré, concebidos de esta forma, aportan una flexibilidad y riqueza significativa al desarrollo tecnológico. Por ejemplo, al construir un dispositivo óptico basado en una lámina de cristal fotónico, sus propiedades son fijas. Es decir, la respuesta óptica de la lámina de cristal fotónico solo puede ser modificada cambiando el ángulo de incidencia de la luz o su longitud de onda. Sin embargo, al considerar un sistema como el ilustrado en la figura 4.2(c), se introducen nuevos grados de libertad, como el desplazamiento, el giro (estos dos parámetros cambian por completo la estructura con cada valor que toman, por ejemplo, cada ángulo de giro distinto genera una red cuasi-cristalina distinta, ver la figura 4.3, lo que permite la modificación de las propiedades ópticas del sistema) y la separación entre las láminas, que pueden ser aprovechados en el diseño de dispositivos ópticos más flexibles.

## 4.2. Red Recíproca y zona de Brillouin

Antes de continuar con la definición formal de los vectores recíprocos, vale la pena exponer la siguiente discusión: La transformada de Fourier de un patrón de Moiré puede arrojar información valiosa que, desde el punto de vista intuitivo, sustenta la flexibilidad, antes mencionada, del comportamiento óptico de estas estructuras. Por ejemplo, la red real de la estructura en la figura 4.4, puede representarse a través de:

$$M(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x - na) + \delta(x - na - \phi). \quad (4.1)$$

donde  $\delta$  denota la delta de Dirac. Entonces, su red recíproca sería:

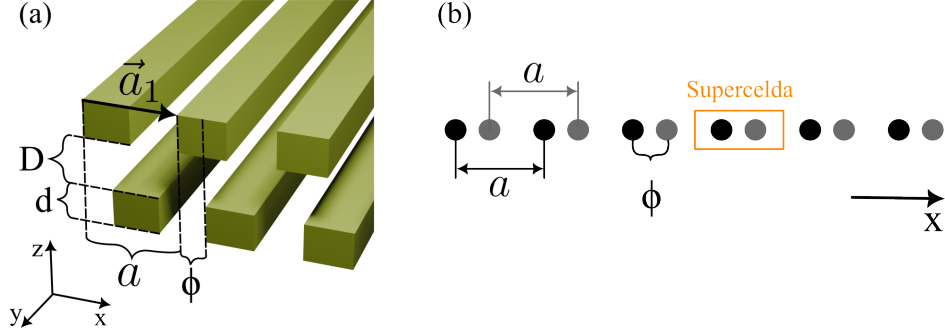


Figura 4.4: (a) Representación diagramática de un sistema compuesto por dos rejillas de difracción desplazadas entre sí, formando un patrón de Moiré, junto con (b) una representación simplificada de la red del sistema.

$$\begin{aligned}
 \tilde{M}(k_x) &= \mathcal{F}[M(x)] = \int_{-\infty}^{\infty} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x - na) + \int_{-\infty}^{\infty} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x - na - \phi) \\
 &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta\left(k_x - \frac{2\pi}{a}n\right) + e^{i\phi k_x} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta\left(k_x - \frac{2\pi}{a}n\right) \\
 &= (1 + e^{i\phi k_x}) \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta\left(k_x - \frac{2\pi}{a}n\right)
 \end{aligned} \tag{4.2}$$

donde  $\mathcal{F}$  denota la transformada de Fourier.

De este resultado se destacan dos cosas. La primera, el término de la derecha, la sumatoria, puede interpretarse como la indicación de la existencia de una red general con periodo  $a$ . Tal como se ilustra en la figura 4.4(b). En los patrones de Moiré, esta red general suele ser llamada super-red y tiene un análogo a la celda unitaria de las redes cristalinas, que es conocida como super-celda. Más adelante se continuará la discusión sobre este concepto. La segunda, el término de la izquierda, el número complejo, indica una interferencia geométrica entre ambas redes. Lo cual, puede interpretarse como un indicio de que el comportamiento de la luz, a través de estas estructuras, será altamente dependiente del parámetro  $\phi$ .

Es cierto que la estructura (figura 4.4(a)) se encuentra en un espacio tridimensional y ambas rejillas de difracción se encuentran separadas por una distancia  $D$ , pero, el resultado no es muy distinto al presentado. Tomando en consideración esta naturaleza tridimensional del sistema, la red real de la estructura estaría representada por:

$$M(x, y, z) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x - na)\delta(z) + \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x - na - \phi)\delta(z - D), \tag{4.3}$$

y red recíproca resulta ser

$$\tilde{M}(k_x, k_y, k_z) = (1 + e^{i\phi k_x} e^{iDk_z}) \delta(k_y) \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta\left(k_x - \frac{2\pi}{a}n\right) \tag{4.4}$$

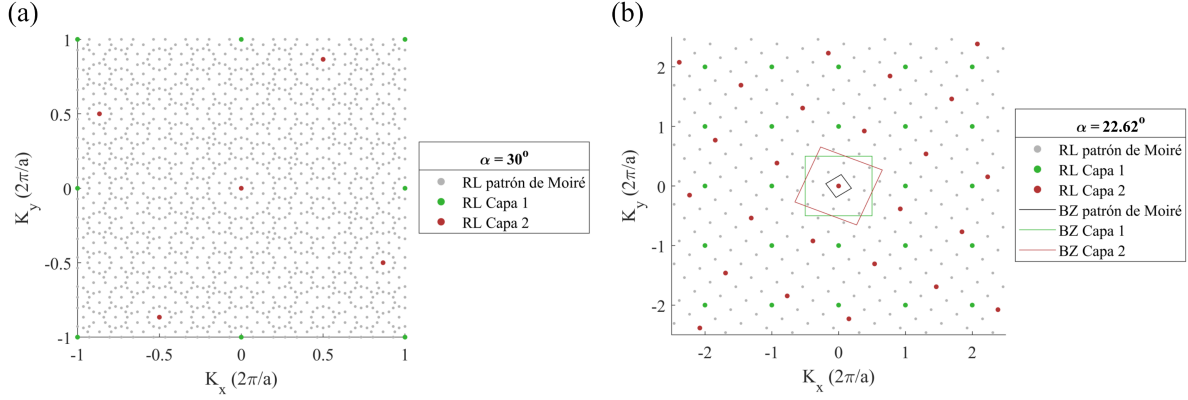


Figura 4.5: RL: Red Recíproca. BZ: Primera zona de Brillouin. Ejemplos de la red recíproca de un patrón de Moiré formado por dos redes cuadradas, con parámetro de red  $a$ , giradas entre sí (a)  $30^\circ$  (solo se han graficado algunos puntos de la red recíproca de Moiré), formando una estructura incommensurada, y (b)  $22.62^\circ$ , donde la estructura es commensurada. En esta última es posible comparar los tamaños y direcciones de las primeras zonas de Brillouin involucradas. Para los ángulos de  $30^\circ$  y  $22.62^\circ$  las estructuras resultantes son no commensurada y commensurada, respectivamente.

Por lo tanto, la discusión realizada anteriormente se mantiene. Aunque se resalta la aparición de un término dependiente de la distancia  $D$ , lo cual es razonable.

Por otra parte, la propiedad distintiva de los patrones de Moiré, compuestos por el giro relativo de dos láminas de cristal fotónico, es que son estructuras cuasi-periódicas a ángulos incommensurados (más adelante se dará claridad sobre este concepto). Es decir, son estructuras que presentan una periodicidad, aparente, más grande que la periodicidad de las redes cristalinas que las componen. Por ejemplo, en la figura 4.3(b) se expone la supercelda de la estructura, la cual es mucho más grande que la periodicidad espacial de las láminas, y resulta ser un análogo a la celda unitaria de una red cristalina. Por lo tanto, es de gran utilidad para realizar aproximaciones de estos sistemas, tal como se verá en el próximo capítulo. Ahora bien, la super-red que emerge al formar un patrón de Moiré es caracterizada por los vectores recíprocos [94]:

$$M = G_1 - G_2, \quad (4.5)$$

donde  $G_1$  y  $G_2$  son vectores recíprocos de la red real de la primera y segunda lámina de cristal fotónico, respectivamente.

Por ejemplo, los vectores recíprocos de la red real de Moiré de la figura 4.3 estarían dados por:

$$\mathbf{M}_{n,m,n',m'} = n\mathbf{a}_1 + m\mathbf{a}_2 - (n'\mathbf{a}'_1 + m'\mathbf{a}'_2), \quad n, m, n', m' \in \mathbb{N}, \quad (4.6)$$

donde  $\mathbf{a}_i$  y  $\mathbf{a}'_i$  representan los vectores de red de la primera y segunda capa. Estos últimos son equivalentes a los primeros, pues las láminas de cristal fotónico que representan son idénticas, salvo por el giro relativo de ángulo  $\alpha$ .

Nótese que estos nuevos vectores están definidos por una resta, por lo tanto, estarán más cercanos entre sí que los vectores recíprocos de las redes cristalinas originales y, en consecuencia,



la primera zona de Brillouin será más pequeña. En la figura 4.5 se exponen un par ejemplos de la red recíproca de Moiré para  $\alpha = 30^\circ, 22.62^\circ$ , donde se evidencia cómo la distancia entre cada punto  $\mathbf{M}$  y sus primeros vecinos es más pequeña que las distancias equivalentes en las redes cristalinas. Además, en la figura 4.5(b) se puede observar que la primera zona de Brillouin de la red de Moiré es más pequeña que las primeras zonas de Brillouin de las capas individuales. Estos resultados son esperables, pues la periodicidad aparente del patrón de Moiré (que se aproxima utilizando el concepto de supercelda) es más grande que la periodicidad de las láminas cristalinas que componen el sistema. Más aún, se logra evidenciar que la complejidad del estudio de la diagrama de bandas de estas estructuras, para toda la primera zona de Brillouin, aumenta considerablemente si se desea modificar el valor de  $\alpha$ . Pues la primera zona de Brillouin cambia para cada ángulo de giro distinto y, en consecuencia, la manera de abordar cada caso es diferente. Por lo tanto, se toman dos decisiones en este proyecto:

1. Se estudiará la evolución de las resonancias guiadas de estas estructuras en el punto  $\Gamma$  de la primera zona de Brillouin: Al variar  $\alpha$ , la primera zona de Brillouin cambia su orientación, tamaño, y en algunos casos, su forma [96]. Por lo tanto, las direcciones de mayor simetría (aquellas que, usualmente, son estudiadas al computar la estructura de bandas), también cambian. Entonces, al utilizar un método como *espectroscopía resuelta en ángulo*, la cantidad de casos y condiciones distintas (como los ángulos de incidencia que deben fijarse en este método) que deben estudiarse, aumenta considerablemente y se sale de los alcances de este trabajo. Sin embargo, el punto  $\Gamma$  no cambia, permitiendo que al utilizar *espectroscopía resuelta en ángulo*, sin importar  $\alpha$ , las condiciones de incidencia de la luz se mantenga iguales, a incidencia normal.
2. Se utilizarán métodos numéricos para abordar este problema: en el capítulo 3 ya se había mencionado que estas herramientas son necesarias para el estudio de láminas de cristal fotónico, pues los modos propios de las estructuras dependen de todas las condiciones geométricas de la estructura. Esta razón es más contundente en este caso, donde la variación más pequeña en  $\alpha$  cambia por completo la geometría del sistema.

Por otra parte, anteriormente se mencionó que los patrones de Moiré, formados por el solapamiento de dos láminas de cristal fotónico giradas entre sí, pueden ser clasificados en conmensurados o inconmensurados [94, 97, 98]. Aquellos ángulos que son conmensurados presentan una estructura cristalina, periódica (en estos casos, la repetición de la supercelda representa, de manera exacta, la estructura), y aquellos que son inconmensurados presentan una estructura cuasi-cristalina. Nótese cómo en la figura 4.5(b), donde se ha seleccionado un ángulo conmensurado, existen puntos de la red recíproca del patrón de Moiré que coinciden con los puntos de las redes recíprocas de ambas redes cristalinas. En otras palabras, el degeneramiento de la red recíproca es aquello que caracteriza los patrones de Moiré conmensurados. En este sentido, el criterio para determinar si un ángulo es conmensurado, o no, es a través de la siguiente ecuación [51, 94]:

$$n\mathbf{a}_1 + m\mathbf{a}_2 = n'\mathbf{a}'_1 + m'\mathbf{a}'_2, \quad n, m, n', m' \in \mathbb{N}. \quad (4.7)$$

Entonces, si existen los enteros  $m, n, m'$  y  $n'$  se dice que la red es conmensurada. A efectos prácticos, esta relación se cumple para muy pocos ángulos, por ejemplo, para el sistema representado en la figura 4.2(c) solo existen 3 ángulos conmensurados entre  $5^\circ$  y  $45^\circ$ . El ángulo de  $22.62^\circ$  es conmensurado y, como se puede observar en la figura 4.5(b), la red recíproca de la estructura resultante es cristalina y, por lo tanto, cumple la anterior relación. Por el



contrario, el ángulo de  $30^\circ$  es un ejemplo de un ángulo no conmensurado, pues no genera una red cristalina.

## 5. Métodos Numéricos

---

Existen múltiples métodos numéricos que pueden ser aprovechados para simular el comportamiento del campo electromagnético en estructuras cuasi-periódicas como las descritas en el capítulo anterior. Incluso, cualquier método, en el dominio temporal o en el dominio de frecuencias, con la capacidad de resolver las ecuaciones de Maxwell en condiciones de frontera periódicas, tiene el potencial de brindar una aproximación de los fenómenos reales. En este capítulo, se describirán la aproximación por supercelda, un primer acercamiento periódico a estructuras cuasi-cristalinas, y una modificación de *RCWA* que permite resolver las ecuaciones de Maxwell en estos sistemas cuasi-cristalinos.

### 5.1. Aproximación por Supercelda

La mayoría de los métodos numéricos utilizados para simular láminas de cristal fotónico construyen un dominio computacional como el esquematizado en la figura 5.1(b). Este dominio es diseñado a partir de la unidad fundamental del cristal fotónico, la celda unitaria. En métodos como *Diferencia finitas en el dominio temporal* (en inglés *Finite Difference Time Domain* o *FDTD*) [99,100] y el método de *Elementos finitos* (en inglés *Finite element method* o *FEM*) [101] la parte superior del dominio computacional se emplea como fuente de radiación, mientras que en la parte inferior se implementa un plano absorbente que simula una región inferior infinita, evitando reflexiones indeseadas con este límite del dominio computacional. La periodicidad de la estructura se introduce en la simulación al implementar condiciones de frontera periódicas en las superficies laterales del dominio computacional.

Cabe mencionar que es posible realizar simulaciones de láminas de cristal fotónico utilizando condiciones de frontera absorbentes en las superficies laterales del dominio computacional, de manera que se construye un dominio finito. Entonces, para lograr que este enfoque se aproxime lo suficiente a un sistema periódico es necesario incluir una sección de la lámina de cristal fotónico mucho más grande que la celda unitaria. Este método es ampliamente utilizado para explorar la construcción de guías de onda, divisores de haz, reflectores y compuertas lógicas basadas en estas estructuras periódicas [102–105]. Sin embargo, esta alternativa es poco recomendable para explorar las propiedades ópticas generales de las láminas, ya que el dominio computacional crece significativamente, incrementando el costo computacional de la

simulación.

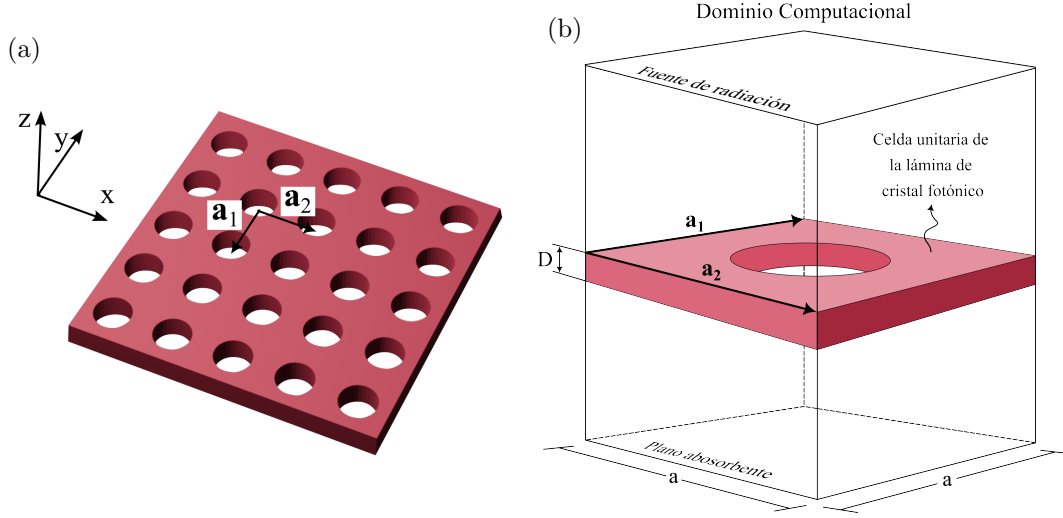


Figura 5.1: (a) Ejemplo de una lámina de cristal fotónico con red cuadrada y (b) esquema de un dominio computacional empleado para simular estructura (a) usando métodos como *FDTD* y *FEM*.

Al igual que en las láminas de cristal fotónico, en el contexto de las estructuras cuasi-cristalinas también es posible ubicar una sección mínima, aparentemente repetitiva. A esta sección se le conoce como supercelda.

Tal como se describió en el capítulo anterior, la red formada por la superposición de dos láminas de cristal fotónico puede ser periódica si se cumplen algunas condiciones. En dado caso, se dice que es conmensurada y es posible encontrar una supercelda que se repite, de manera exacta, a lo largo de toda la estructura. Por ejemplo, al superponer dos láminas de cristal fotónico con red cuadrada y generar una estructura cuasi-cristalina con un giro relativo entre ambas láminas de  $22.62^\circ$ , se encuentra una estructura conmensurada. Sin mucho esfuerzo, es posible identificar la supercelda de este sistema, tal como se expone en la figura 5.2(b). En este orden de ideas, para realizar una simulación numérica convencional, como la descrita al principio de esta sección para las láminas de cristal fotónico, sólo sería necesario construir el dominio computacional alrededor de la supercelda, como se muestra en la figura 5.2(a).

Este enfoque del problema tiene varias consecuencias. Primero, es esperable que el coste computacional aumente, pues la estructura de estudio es más compleja que una lámina de cristal fotónico. A continuación, se realizará un análisis de este inconveniente a través de la comparación directa entre una estimación de la complejidad computacional del sistema cristalino en la figura 5.1 y el sistema cuasi-cristalino en la figura 5.2: por ejemplo, en una aplicación típica de *FDTD* es necesario dividir espacialmente el dominio computacional en celdas idénticas. En particular, si se decide utilizar prismas rectangulares con lados  $\Delta x$ ,  $\Delta y$  y  $\Delta z$  para esta división, el número de celdas será

$$N_{celdas} = \frac{V}{\Delta x \Delta y \Delta z}. \quad (5.1)$$

Además, aplicando la condición de *Courant-Friedrich-Lewy* para encontrar el intervalo temporal adecuado en la simulación, se obtiene [106]

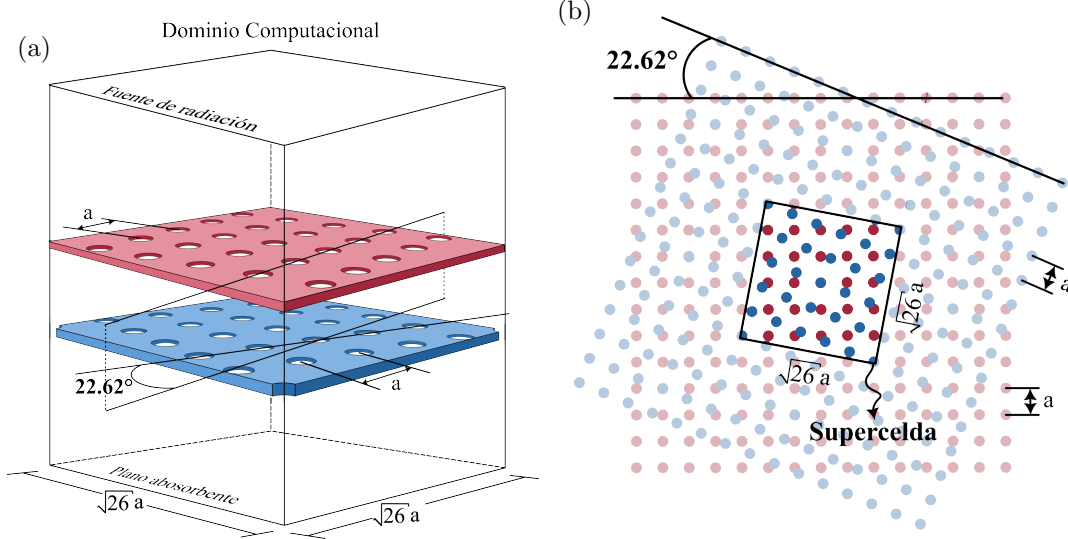


Figura 5.2: (a) Esquema del dominio computacional necesario para construir una simulación numérica convencional de un sistema cuasi-cristalino, compuesto por la superposición desigual de dos láminas de cristal fotónico, a partir de su supercelda y (b) diagrama de la red real de esta estructura, a un ángulo commensurado, donde se destaca su supercelda.

$$\Delta t \leq \frac{n}{c\sqrt{\Delta x^{-2} + \Delta y^{-2} + \Delta z^{-2}}}, \quad (5.2)$$

donde  $c$  es la velocidad de la luz en el vacío y  $n$  el índice de refracción del sistema. De esta manera, es posible estimar el número de pasos temporales requeridos para realizar una simulación durante un tiempo  $T$

$$N_{pasos} \geq \frac{Tc}{n} \cdot \sqrt{\Delta x^{-2} + \Delta y^{-2} + \Delta z^{-2}}. \quad (5.3)$$

Debido a que en *FDTD* es necesario actualizar los valores del campo eléctrico y del campo magnético en cada celda espacial e instante temporal, es posible estimar una complejidad computacional de la forma

$$C = N_{celdas} \cdot N_{pasos} \geq \frac{VTc}{n} \cdot \frac{\sqrt{\Delta x^{-2} + \Delta y^{-2} + \Delta z^{-2}}}{\Delta x \Delta y \Delta z}. \quad (5.4)$$

Por simplicidad, es razonable plantear una resolución espacial idéntica en las tres dimensiones  $\Delta x = \Delta y = \Delta z = a/m$ , donde  $m$  es un número entero. Tomando como ejemplo el dominio computacional para una lámina de cristal fotónico, figura 5.1(b), la cota inferior de  $C$  sería

$$C_{lamina} = \frac{\sqrt{3}ZTcm^4}{a^2}, \quad (5.5)$$

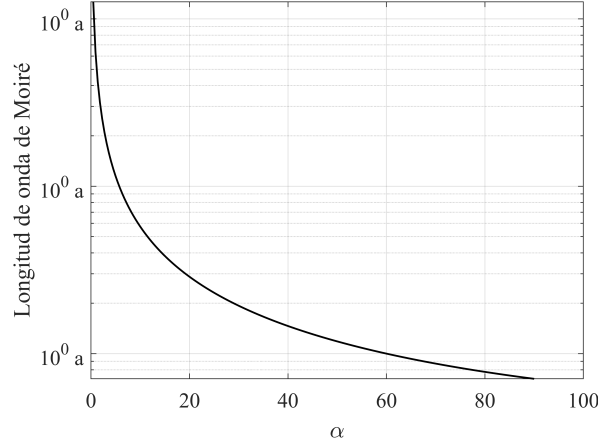


Figura 5.3: Comportamiento de la longitud de onda de Moiré, para la superposición de dos redes hexagonales, en función del giro  $\alpha$ . El mínimo de la figura se alcanza en  $90^\circ$ , donde  $\lambda = \sqrt{2}/2 a$ .

donde  $V = Z \cdot a^2$  y  $n = 1$ . Por otro lado, al considerar el sistema de la figura 5.2(a), el volumen del dominio computacional debe ser  $V = Z \cdot 26a^2$ . Entonces, manteniendo la misma resolución espacial  $a/m$ , se obtiene una complejidad computacional mínima 25 veces mayor que en el caso de la lámina de cristal fotónico.

$$C_{bilamina} = 26 \frac{\sqrt{3} Z T c m^4}{a^2} = 26 \cdot C_{lamina}. \quad (5.6)$$

Esto quiere decir que el coste computacional del problema crece notablemente, pues las dimensiones del dominio se incrementan en el momento que se decide girar las láminas de cristal fotónico entre sí. Por ejemplo, el tamaño de esta supercelda es proporcional al cuadrado de la periodicidad de la red de Moiré, también conocida como longitud de onda de Moiré ( $\lambda$ ), que puede ser calculada, para la superposición de dos redes hexagonales superpuestas, a través de  $\lambda = a/(2 \sin(\alpha/2))$  [107], ver figura 5.3.

En este sentido, explorar ángulos de giro pequeños para estas estructuras es inviable computacionalmente, ya que mientras más pequeño es el ángulo de giro, más grande es la supercelda y el dominio computacional. Adicionalmente, este enfoque del problema resulta ser una aproximación imprecisa para la gran mayoría de los ángulos; tal como se discutió en el capítulo anterior, la supercelda solo se repite de manera exacta a lo largo de la red cuasi-cristalina para ángulos de giro conmensurados, los cuales son muy escasos. Entonces, la aplicación de condiciones de frontera periódicas en los laterales del dominio computacional causa que, a ángulos no conmensurados, el sistema que se esté simulando sea notoriamente distinto al sistema que se quiere estudiar.

Cabe aclarar que, al igual que las láminas de cristal fotónico, es posible explorar el comportamiento óptico de estas estructuras cuasi-cristalinas simulando una porción mucho más grande que la supercelda y aplicando condiciones de frontera absorbentes. Si bien esto implicaría una representación más confiable del sistema, en comparación con la aproximación por supercelda, a ángulos no conmensurados, la complejidad computacional crecería aún más y el problema no sería abordable con máquinas convencionales, como las computadoras personales.

## 5.2. Análisis Riguroso de Ondas Acopladas

*FDTD* y el *Método de Elementos Finitos (FEM)* fueron las primeras técnicas consideradas al iniciar este proyecto. Debido a que *FDTD* y *FEM* están contruidos de manera genérica, sin consideraciones sobre un sistema en específico, son capaces de simular las propiedades electromagnéticas de cualquier sistema en el límite clásico. Sin embargo, la aplicación de estos métodos implica obtener resultados limitados con una alta exigencia para la máquina. Por lo tanto, fue necesario investigar alternativas.

El método de *Análisis Riguroso de Ondas Acopladas*, o *RCWA* por sus siglas en inglés, es un método semi-analítico muy utilizado en el análisis óptico de estructuras compuestas por capas de láminas de cristal fotónico. Este método resuelve una versión matricial de las ecuaciones de Maxwell aprovechando las propiedades de la transformada de Fourier, tal como se describirá a continuación [55, 73, 79].

Inicialmente, se consideran las ecuaciones de Maxwell en forma armónica temporal:

$$\begin{aligned}\nabla \cdot \mathbf{D} &= 0, & \nabla \times \mathbf{E} - i\omega \mathbf{B} &= 0, \\ \nabla \cdot \mathbf{B} &= 0, & \nabla \times \mathbf{H} + i\omega \mathbf{D} &= 0.\end{aligned}\tag{5.7}$$

Para aliviar los cálculos numéricos, resulta conveniente normalizar el campo magnético  $\mathbf{H} \rightarrow -i\sqrt{\frac{\epsilon_0}{\mu_0}}\mathbf{H}$ . De esta manera, se obtienen las ecuaciones

$$\begin{aligned}\nabla \times \mathbf{E} &= k_0 \mu(\mathbf{r}) \mathbf{H}, \\ \nabla \times \mathbf{H} &= k_0 \epsilon(\mathbf{r}) \mathbf{E},\end{aligned}\tag{5.8}$$

donde  $k_0 = \sqrt{\mu_0 \epsilon_0} \omega$ .

Debido a que la forma convencional de *RCWA* está orientada hacia el análisis de láminas de cristal fotónico, esta emplea la expansión en términos de Fourier de la permitividad eléctrica, la permeabilidad magnética y los campos eléctrico y magnético, utilizando la red recíproca  $\mathcal{G}$  de la estructura cristalina como base de la expansión.

$$\epsilon(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{g} \in \mathcal{G}} \tilde{\epsilon}(\mathbf{g}) e^{i\mathbf{g} \cdot \mathbf{r}},\tag{5.9}$$

$$\mu(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{g} \in \mathcal{G}} \tilde{\mu}(\mathbf{g}) e^{i\mathbf{g} \cdot \mathbf{r}},\tag{5.10}$$

$$E_i(x, y, z)(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{g} \in \mathcal{G}} \tilde{E}_i(\mathbf{g}; z) e^{i(k_x(\mathbf{g})x + k_y(\mathbf{g})y)},\tag{5.11}$$

$$H_i(x, y, z)(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{g} \in \mathcal{G}} \tilde{H}_i(\mathbf{g}; z) e^{i(k_x(\mathbf{g})x + k_y(\mathbf{g})y)},\tag{5.12}$$

donde  $i = x, y, z$  y  $k_i(\mathbf{g}) = k_{i,inc} + g_i$ . En esta relación,  $k_{i,inc}$  es la componente  $i$  del vector de onda incidente sobre la estructura. Tomando como ejemplo la lámina de cristal fotónico en la figura 5.1, el conjunto  $\mathcal{G}$  sería:

$$\mathcal{G} = \left\{ \mathbf{g}_{n,m} : \mathbf{g}_{n,m} = \frac{2\pi}{a}(n\hat{\mathbf{x}} + m\hat{\mathbf{y}}), n, m \in \mathbb{Z} \right\}. \quad (5.13)$$

Por conveniencia numérica, los campos eléctrico y magnético son escritos en forma vectorial a través de sus coeficientes de Fourier:

$$\mathbf{e}_i = \begin{pmatrix} \tilde{E}_i(\mathbf{g}_{0,0}) \\ \vdots \\ \tilde{E}_i(\mathbf{g}_{N_m, N_m}) \end{pmatrix}, \quad \mathbf{h}_i = \begin{pmatrix} \tilde{H}_i(\mathbf{g}_{0,0}) \\ \vdots \\ \tilde{H}_i(\mathbf{g}_{N_m, N_m}) \end{pmatrix}, \quad (5.14)$$

Debido a que se trata de un método numérico, es necesario truncar la cantidad de términos de Fourier que se utilizan en el cómputo. En este caso se toma  $N_m$  como la cantidad máxima de términos en la expansión.

Es importante resaltar que, al igual que todos los métodos basados en la transformada de Fourier, la cantidad de términos utilizados afecta, notoriamente, la convergencia del método (cuántos más términos sean utilizados, mejores serán los resultados). En el siguiente capítulo se presenta el criterio utilizado para determinar el número de términos de Fourier necesarios para las simulaciones.

Continuando con la descripción de *RCWA*. A partir de la notación en 5.14 se encuentra una forma matricial de las ecuaciones 5.8 [79]:

$$\mathbf{e}_z = i[[\epsilon]]^{-1}(\tilde{\mathbf{K}}_x \mathbf{h}_y - \tilde{\mathbf{K}}_y \mathbf{h}_x), \quad (5.15)$$

$$\mathbf{h}_z = i[[\mu]]^{-1}(\tilde{\mathbf{K}}_x \mathbf{e}_y - \tilde{\mathbf{K}}_y \mathbf{e}_x), \quad (5.16)$$

$$\frac{d}{d\tilde{z}} \begin{pmatrix} \mathbf{h}_x \\ \mathbf{h}_y \end{pmatrix} = \mathbf{Q} \begin{pmatrix} \mathbf{e}_x \\ \mathbf{e}_y \end{pmatrix}, \quad (5.17)$$

$$\frac{d}{d\tilde{z}} \begin{pmatrix} \mathbf{e}_x \\ \mathbf{e}_y \end{pmatrix} = \mathbf{P} \begin{pmatrix} \mathbf{h}_x \\ \mathbf{h}_y \end{pmatrix}, \quad (5.18)$$

donde

$$\mathbf{Q} = \begin{pmatrix} \tilde{\mathbf{K}}_x [[\mu]]^{-1} \tilde{\mathbf{K}}_y & [[\epsilon]] - \tilde{\mathbf{K}}_x [[\mu]]^{-1} \tilde{\mathbf{K}}_x \\ \tilde{\mathbf{K}}_y [[\mu]]^{-1} \tilde{\mathbf{K}}_y - [[\epsilon]] & -\tilde{\mathbf{K}}_y [[\mu]]^{-1} \tilde{\mathbf{K}}_x \end{pmatrix}, \quad (5.19)$$

$$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} \tilde{\mathbf{K}}_x [[\epsilon]]^{-1} \tilde{\mathbf{K}}_y & [[\mu]] - \tilde{\mathbf{K}}_x [[\epsilon]]^{-1} \tilde{\mathbf{K}}_x \\ \tilde{\mathbf{K}}_y [[\epsilon]]^{-1} \tilde{\mathbf{K}}_y - [[\mu]] & -\tilde{\mathbf{K}}_y [[\epsilon]]^{-1} \tilde{\mathbf{K}}_x \end{pmatrix}. \quad (5.20)$$

Las matrices  $\tilde{\mathbf{K}}_i$  son las matrices diagonales de los vectores de onda normalizados  $k_i(\mathbf{g})/k_0$  y  $\tilde{z} = k_0 z$  es la coordenada  $z$  normalizada. Las matrices  $[[\epsilon]]$  y  $[[\mu]]$  están definidas de la siguiente manera:

$$[[\epsilon]] = \begin{pmatrix} \tilde{\epsilon}(\mathbf{g}_{0,0} - \mathbf{g}_{0,0}) & \cdots & \tilde{\epsilon}(\mathbf{g}_{0,0} - \mathbf{g}_{N_m, N_m}) \\ \vdots & & \vdots \\ \tilde{\epsilon}(\mathbf{g}_{N,N} - \mathbf{g}_{0,0}) & \cdots & \tilde{\epsilon}(\mathbf{g}_{N_m, N_m} - \mathbf{g}_{N_m, N_m}) \end{pmatrix}, \quad (5.21)$$

$$[[\mu]] = \begin{pmatrix} \tilde{\mu}(\mathbf{g}_{0,0} - \mathbf{g}_{0,0}) & \cdots & \tilde{\mu}(\mathbf{g}_{0,0} - \mathbf{g}_{N_m, N_m}) \\ \vdots & & \vdots \\ \tilde{\mu}(\mathbf{g}_{N,N} - \mathbf{g}_{0,0}) & \cdots & \tilde{\mu}(\mathbf{g}_{N_m, N_m} - \mathbf{g}_{N_m, N_m}) \end{pmatrix}. \quad (5.22)$$

Las ecuaciones 5.15-5.18 permiten obtener las ecuaciones de campo eléctrico a través de

$$\begin{pmatrix} \mathbf{e}_x(\tilde{z}) \\ \mathbf{e}_y(\tilde{z}) \end{pmatrix} = e^{-\mathbf{\Omega}\tilde{z}} \mathbf{e}^+(0) + e^{\mathbf{\Omega}\tilde{z}} \mathbf{e}^-(0) \quad (5.23)$$

donde  $\mathbf{\Omega}^2 = \mathbf{PQ}$  y  $\mathbf{e}^\pm$  son las condiciones de frontera impuestas en  $z = 0$ . Tomando las matrices de vectores propios  $W$  y valores propios  $\Lambda$  de  $\mathbf{\Omega}^2$ , es posible aliviar el computo de 5.23 transformándola en:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{e}_x(\tilde{z}) \\ \mathbf{e}_y(\tilde{z}) \end{pmatrix} = \mathbf{W}e^{-\Lambda\tilde{z}} \mathbf{c}^+ + \mathbf{W}e^{\Lambda\tilde{z}} \mathbf{c}^-, \quad (5.24)$$

de manera análoga para el campo magnético:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{h}_x(\tilde{z}) \\ \mathbf{h}_y(\tilde{z}) \end{pmatrix} = \mathbf{V}e^{-\Lambda\tilde{z}} \mathbf{c}^+ + \mathbf{V}e^{\Lambda\tilde{z}} \mathbf{c}^-, \quad (5.25)$$

donde  $\mathbf{c}^\pm = W^{-1}\mathbf{e}^\pm(0)$  y  $\mathbf{V} = \mathbf{QW}\Lambda^{-1}$ .

La aplicación recursiva de estas dos ecuaciones, permite encontrar las componentes de campo eléctrico y magnético para cualquier  $z$ . Adicionalmente, *RCWA* tiene la capacidad de calcular la matriz de dispersión  $S$  de las estructuras cristalinas. Incluso, para estructuras compuestas por múltiples capas logra calcular la matriz de dispersión del sistema completo a través del *producto Redheffer* [108]

$$S = S^{(1)} \otimes S^{(2)} \otimes \cdots \otimes S^{(N)}. \quad (5.26)$$

$S^{(i)}$  representa la matriz de dispersión de la capa  $i$  y  $\otimes$  representa el producto Redheffer.

Hasta este punto, se ha descrito el funcionamiento general de *RCWA*, el cual está orientado al estudio de estructuras cristalinas. Sin embargo, recientemente, un grupo de investigadores ha propuesto una modificación de este método con el objetivo de lograr aplicarlo a estructuras cuasi-cristalinas [49, 79]. El ajuste fundamental ocurre al reemplazar  $\mathcal{G}$  (considere, por ejemplo, la ecuación 5.13) por la red recíproca de la estructura cuasi-cristalina compuesta por la superposición desigual de las dos láminas de cristal fotónico. Esta edición es motivada debido a que la luz es dispersada por ambas capas cuando interactúa con la estructura. Es decir, considerando la ecuación 2.22, la luz incidente es dispersada en ondas planas con vector de onda  $\mathbf{k}_i + \mathbf{G}_1 + \mathbf{G}_2$ , donde  $\mathbf{G}_1$  y  $\mathbf{G}_2$  son vectores de la red recíproca de la primera y segunda



lámina de cristal fotónico, respectivamente. Por lo tanto, utilizar, únicamente, la red recíproca de una de las capas no es suficiente para describir el fenómeno. Por ejemplo,  $\mathcal{G}$  tomaría la siguiente forma para la estructura en la figura 5.2:

$$\mathcal{G} = \left\{ \mathbf{g}_{m,n} : \mathbf{g}_{n,m,n',m'} = \frac{2\pi}{a}(n\hat{\mathbf{x}} + m\hat{\mathbf{y}} + n'\hat{\mathbf{x}}' + m'\hat{\mathbf{y}}'), n, m, n', m' \in \mathbb{Z} \right\}, \quad (5.27)$$

donde,  $\hat{\mathbf{x}}'$  y  $\hat{\mathbf{y}}'$  se corresponden con las rotaciones en un ángulo  $\alpha$  de  $\hat{\mathbf{x}}$  e  $\hat{\mathbf{y}}$  para la segunda lámina.

$$\hat{\mathbf{x}}' = \cos \alpha \hat{\mathbf{x}} - \sin \alpha \hat{\mathbf{y}}, \quad (5.28)$$

$$\hat{\mathbf{y}}' = \sin \alpha \hat{\mathbf{x}} + \cos \alpha \hat{\mathbf{y}}. \quad (5.29)$$

Nótese que esta forma de presentar la red recíproca del sistema es equivalente a la construcción que se plantea en la ecuación 4.6 y puede ser interpretada como el producto tensorial entre ambas redes recíprocas [49].

Salvo este cambio, y algunos ajustes necesarios [79], el método continúa aplicándose de manera análoga al caso cristalino usando las ecuaciones 5.24 y 5.25. Cabe resaltar que realizar esta combinación de las redes recíprocas incrementa el costo computacional del método, debido a que, por ejemplo, si antes se utilizaban  $N_m$  vectores recíprocos para la expansión en términos de Fourier, ahora será necesario el uso de  $N_m^2$  vectores de la red recíproca cuasi-cristalina. Esto implica que las matrices involucradas en los cálculos numéricos pasarán de tener un tamaño de  $N_m \times N_m$  a un tamaño de  $N_m^2 \times N_m^2$ . Esto incrementa, notablemente, el costo computacional, pero permite superar varios retos que fueron considerados en la sección anterior. En este caso, no es necesario aplicar ninguna aproximación del tipo supercelda. De hecho, la única aproximación involucrada se debe a que el método es basado en una expansión en términos de Fourier. Además, no es necesario construir simulaciones distintas para cada ángulo  $\alpha$  que debe ser examinado y, computacionalmente, es equivalente explorar ángulos grandes y ángulos pequeños.

Finalmente, el objetivo de utilizar *RCWA*, en este proyecto, es obtener las estructuras de bandas de estos sistemas. En este sentido, fue posible identificar dos alternativas. La primera, *RCWA* permite encontrar la distribución espacial de los campos eléctricos y magnéticos cuando el sistema es excitado por una onda plana con frecuencia  $\omega$ . Entonces, se obtendría la distribución espacial de los campos eléctrico y magnético que sería una superposición de los modos de Bloch 2.20; cada modo de Bloch cuenta con un vector de onda  $k$  propio. Entonces, al realizar la transformada de Fourier, de la distribución espacial de los campos eléctrico y magnético, surgirían picos en los valores de  $k$  de los modos involucrados. Lo cual permitiría realizar una relación directa entre la frecuencia  $\omega$  y los vectores de onda  $k$ . Es decir, se encontraría la estructura de bandas del sistema. Si bien, este método es aplicable, directamente, en láminas de cristal fotónico unidimensionales (en el capítulo 6 se encuentra la estructura de bandas de un espejo de Bragg, calculada con este método), no se encontró una manera clara y eficiente para encontrar la estructura de bandas de estructuras más complejas. Por lo tanto, se optó por la segunda alternativa. *La espectroscopía resulta en ángulo*, la cual fue descrita en el capítulo 3.

## 6. Resultados

---

En el capítulo 1 se realizó una descripción general del método aplicado para cumplir con los objetivos de este proyecto. A continuación, se realizará la presentación de los resultados de dicho procedimiento, junto con una descripción más específica de los medios empleados. Inicialmente se expondrán las pruebas preliminares, ideadas para comprobar el funcionamiento del entorno computacional construido. Seguidamente, se presentarán las pruebas de concepto a escala reducida, simulaciones de sistemas bicapa, menos complejos, que forman un patrón de Moiré. Y, finalmente, se expondrán los resultados de la exploración del comportamiento óptico de las estructuras cuasi-cristalinas.

### 6.1. Pruebas preliminares

*RCWA* tiene la capacidad de simular una vasta cantidad de fenómenos electromagnéticos, siempre que el sistema esté construido por capas. Entonces, para corroborar el correcto funcionamiento del entorno computacional, y como ejercicio académico, se planteó la exploración de fenómenos ópticos bien conocidos.

#### 6.1.1 Refracción

En un principio se exploró la incidencia oblicua de ondas electromagnéticas planas sobre una interfaz entre dos medios semi-infinitos con índices de refracción  $n_1$  y  $n_2$  (este sistema no representa un reto con *RCWA*, especialmente con el paquete de programación seleccionado, pues solo es cuestión de plantear dos capas dieléctricas homogéneas con índices de refracción distintos), ver la figura 6.1(a).

En este problema, la ley de Snell [56] relaciona el ángulo de incidencia  $\theta_I$  y el ángulo de transmisión  $\theta_T$ :

$$\frac{\sin \theta_T}{\sin \theta_I} = \frac{n_1}{n_2}. \quad (6.1)$$

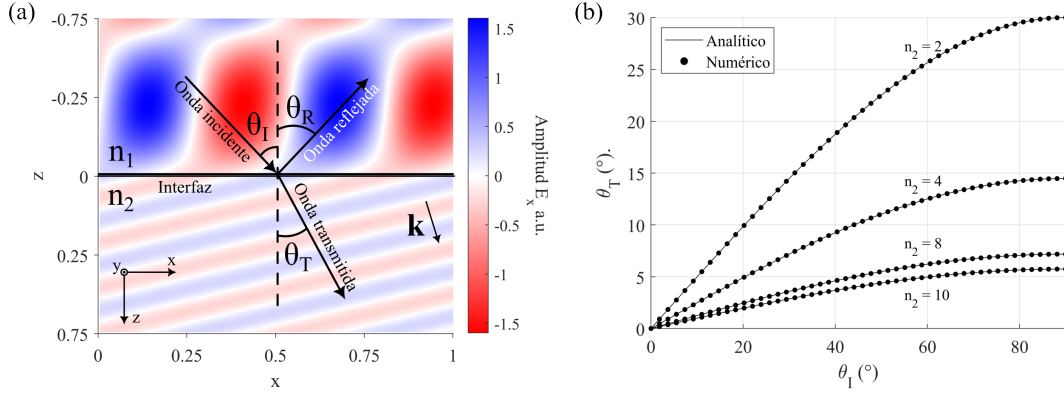


Figura 6.1: (a) Representación diagramática del mecanismo de refracción de la incidencia de una onda electromagnética sobre una interfaz de dos medios dieléctricos semi-infinitos junto con la distribución espacial, de la componente  $x$ , del campo eléctrico, calculada con *RCWA* simulando dos materiales con índices de refracción  $n_1$  y  $n_2$ . En la parte superior se observa la superposición de las ondas incidente y reflejada, mientras que en la parte inferior se observa la onda transmitida. (b) Comparación entre las predicciones analíticas y los resultados numéricos de *RCWA* del ángulo de transmisión  $\theta_T$  en función del ángulo de incidencia  $\theta_I$  y algunos valores del índice de refracción del segundo material.

Para corroborar que ésta relación se cumple en las simulaciones hechas con *RCWA*, se planteó la comparación de los resultados numéricos de  $\theta_T$  con la predicción analítica:

$$\theta_T = \sin^{-1} \left( \frac{n_1 \sin \theta_I}{n_2} \right). \quad (6.2)$$

Para esto, se mantuvo fijo el valor de  $n_1 = 1$ , mientras se realizó una variación de  $n_2 = 2, 4, 8, 10$ , y se exploraron los ángulos  $\theta_I$  entre  $0^\circ$  y  $90^\circ$ . El cálculo de  $\theta_T$  se realizó a partir de los campos eléctrico y magnético en algún punto después de la interfaz. Puesto que

$$\mathbf{E} \cdot \mathbf{k} = 0, \quad (6.3)$$

$$\mathbf{B} \cdot \mathbf{k} = 0, \quad (6.4)$$

$$\mathbf{E} \cdot \mathbf{B} = 0, \quad (6.5)$$

donde  $\mathbf{k}$  es el vector de onda, es posible calcular  $\mathbf{k}$ , y por tanto el ángulo  $\theta_T$ , a través de

$$\mathbf{k} = \frac{\mathbf{E} \times \mathbf{B}}{|\mathbf{E} \times \mathbf{B}|} \quad (6.6)$$

y así,  $\theta_T = \tan^{-1} \left( \frac{k_x}{k_z} \right)$ , ver la figura 6.1(a).

Los resultados de estos cálculos se encuentran en la figura 6.1(a) y 6.1(b). En la figura 6.1(a) se muestra el comportamiento del campo eléctrico en la dirección  $x$ . Es evidente cómo en la parte superior se muestra la superposición de dos ondas planas, la onda incidente y la onda reflejada. Mientras que en la parte inferior, se manifiesta la onda transmitida. A su

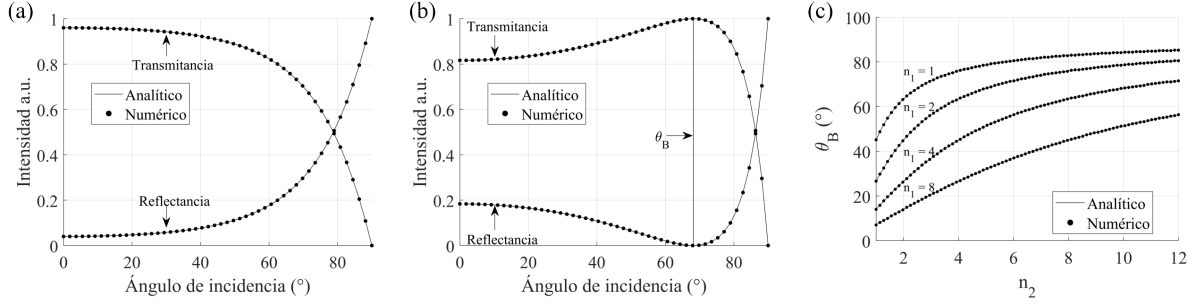


Figura 6.2: Reflectancia y transmitancia de una onda electromagnética plana que incide sobre una interfaz de dos materiales con índice de refracción  $n_1 = 1$  y (a)  $n_2 = 1.5$ , con polarización  $s$ , y (b)  $n_2 = 2.5$ , con polarización  $p$ . En esta última se puede apreciar el ángulo de Brewster  $\theta_B$ , donde la transmitancia es total. En ambas gráficas se presentan las predicciones analíticas y los resultados numéricos, obtenidos con *RCWA*. (c) Comparación entre la predicción analítica del ángulo de Brewster y el cálculo numérico realizado con *RCWA*, para  $n_1 = 1, 2, 4, 8$  y  $n_2 \in (1, 12]$ .

vez, en la figura 6.1(b), los resultados numéricos de  $\theta_T$ , en función del índice de refracción  $n_2$  y el ángulo de incidencia, son presentados y comparados con 6.2. Como se puede observar, ambos acercamientos al problema se comportan de manera idéntica. De hecho, el promedio del coeficiente de correlación de Pearson [114], para los cuatro casos, es 1.00.

Por otro lado, este método numérico es ampliamente utilizado para calcular la transmitancia y la reflectancia de los sistemas. Por esta razón, también resulta interesante calcular estos valores. En general, dado que los materiales involucrados son dieléctricos, la energía debe conservarse. Por lo tanto, la transmitancia  $T$  y la reflectancia  $R$  deben cumplir  $T + R = 1$ . Analíticamente, se encuentra que la reflectancia, en este sistema, cumple las siguientes relaciones [56]:

$$R = \begin{cases} \left( \frac{\alpha - \beta}{\alpha + \beta} \right)^2, & \text{para polarización } s, \\ \left( \frac{\sin(2\theta_T) - \sin(2\theta_I)}{\sin(2\theta_T) + \sin(2\theta_I)} \right)^2, & \text{para polarización } p, \end{cases} \quad (6.7)$$

donde  $\alpha = \cos \theta_T / \cos \theta_I$  y  $\beta = n_1 / n_2$ . La transmitancia se calcula a través de  $T = 1 - R$ .

Cabe resaltar que las polarizaciones  $s$  o  $p$  se refieren a las situaciones donde la luz es polarizada perpendicular o paralela al plano de incidencia. Este plano de incidencia está dado por el plano al que pertenece el vector de onda incidente que perpendicular a la superficie. A efectos prácticos, en incidencia normal, la polarización  $s$  o  $p$  se refieren a los casos en que la luz es polarizada en el eje  $y$  o  $x$ , respectivamente.

En la figura 6.2(a) se puede observar la comparación de este resultado analítico y el acercamiento numérico para una polarización  $s$  y  $n_1 = 1$  y  $n_2 = 1.5$ . El coeficiente de correlación entre los resultados, numéricos y analíticos, para la transmitancia y la reflectancia fue de 1.00, al igual que para la polarización  $p$ , donde  $n_2 = 2.5$ , figura 6.2(b). En esta última situación, se observa un fenómeno bien conocido. El ángulo de Brewster es un ángulo de incidencia, denotado por  $\theta_B$ , en el cual la transmitancia es total. Este ángulo es aproximado a través de la relación [56]

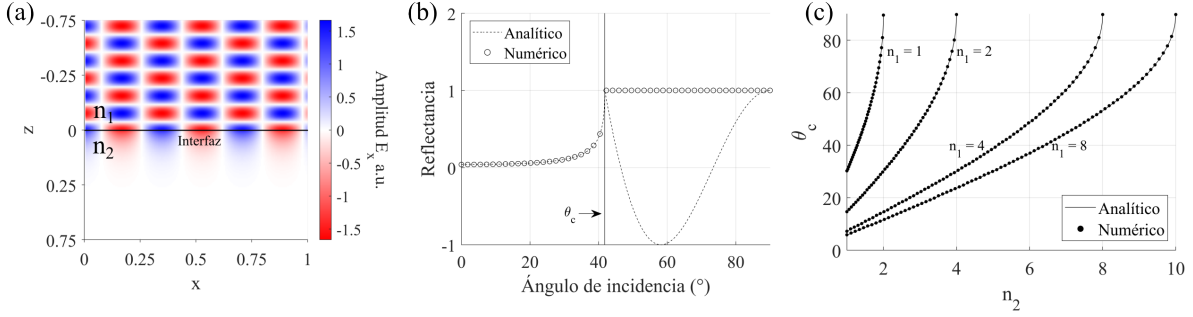


Figura 6.3: (a) Ejemplo de la distribución (calculada con *RCWA*), de la componente en  $\mathbf{x}$ , del campo eléctrico donde una onda electromagnética plana incide, de manera oblicua, sobre la interfaz, de dos materiales con índices de refracción  $n_1$  y  $n_2$ , donde  $n_1 > n_2$ . Se aprecia la reflexión interna total de la luz, en la parte superior, y las ondas evanescente, en la parte inferior. (b) Reflectancia de una onda plana que incide sobre una interfaz de dos materiales con índice de refracción  $n_1 = 1.5$  y  $n_2 = 1$ , con polarización  $s$ . Se puede apreciar el ángulo crítico  $\theta_c$ , a partir del cual la reflectancia es total. Se comparan los resultados numéricos con la predicción analítica del problema. De esta última se presentaron los valores reales únicamente, pues, a partir del ángulo crítico, arroja valores complejos. (c) Comparación entre la predicción analítica del ángulo  $\theta_c$  y el cálculo numérico realizado con *RCWA*, para  $n_1 = 1, 2, 4, 8$  y  $n_2 \in (1, 10]$ .

$$\theta_B = \tan^{-1} \left( \frac{n_2}{n_1} \right). \quad (6.8)$$

De manera análoga a la ley de Snell, se encontró, numéricamente, el ángulo de Brewster realizando una variación de  $n_1 = 1, 2, 4, 8$  y tomando  $n_2 \in (1, 12]$ . Los resultados de estas simulaciones se muestran en la figura 6.2(c). Donde, en promedio, el coeficiente de correlación de Pearson fue, nuevamente, 1.00.

Finalmente, existe otro fenómeno, igualmente interesante, en este sistema. Cuando la luz incide sobre una interfaz desde un material con índice de refracción mayor al del material que lo sucede, surge la posibilidad de que, a partir de un ángulo de incidencia  $\theta_c$ , la luz sea completamente reflejada. A este fenómeno se le conoce como reflexión interna total. El ángulo  $\theta_c$  es calculado de manera analítica a través de

$$\theta_c = \sin^{-1} \left( \frac{n_2}{n_1} \right). \quad (6.9)$$

En la figura 6.3(a) se encuentra el cálculo numérico de la componente en  $\mathbf{x}$ , ver figura 6.1, del campo electromagnético. Es evidente cómo la onda electromagnética incidente es completamente reflejada. De hecho, se logra observar la aparición de las ondas evanescentes, presentes en la parte inferior de la gráfica y caracterizadas por un decaimiento exponencial de su amplitud. En la gráfica 6.3(b) se evidencia cómo, hasta el ángulo  $\theta_c$ , ambos acercamientos al problema se corresponden correctamente; sin embargo, a partir de allí, difieren por completo. Esto se debe a que la ecuación 6.7 no describe correctamente el fenómeno. Incluso, arroja valores complejos (para evitar gran carga visual en la figura, sólo se graficaron los valores reales). En este sentido, *RCWA* realiza predicciones más acertadas con la realidad.

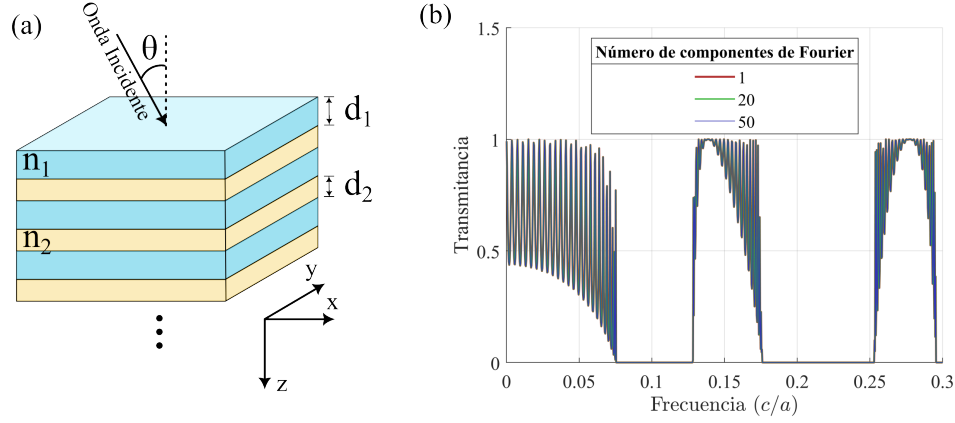


Figura 6.4: (a) Diagrama de una onda electromagnética incidiendo, con ángulo  $\theta$ , sobre un espejo de Bragg compuesto por capas con índice de refracción  $n_1$  y  $n_2$  con espesores  $d_1$  y  $d_2$ , respectivamente. (b) transmitancia de un espejo de Bragg, con  $n_1 = 3.6$ ,  $n_2 = 1$  y  $d_1 = d_2 = a = 1$ , en función de la frecuencia  $\omega$ , para tres cantidades distintas de componentes de Fourier. Las tres curvas son exactamente iguales, por esa razón no se evidencian diferencias entre sí.

Al igual que para la ley de Snell, y el ángulo de Brewster, se realizaron múltiples simulaciones con el objetivo de comparar las estimaciones numéricas con 6.9. Estos resultados se exponen en 6.3(c), donde, nuevamente, se encuentra un índice de correlación igual a 1.00 y se confirma el correcto funcionamiento del entorno computacional.

Finalmente, es interesante abordar estos problemas utilizando *RCWA* pues, a diferencia de los sistemas que se expondrán más adelante, no es necesario utilizar un gran número de términos de Fourier. De hecho, dado que las capas involucradas son homogéneas en el plano  $xy$ , sólo es necesario un término de Fourier para describir la permitividad eléctrica del sistema. De hecho, el cálculo de los campos eléctrico y magnético, en el área mostrada en 6.1(a) y 6.3 (con una resolución de  $200 \times 200$ ), tarda en promedio 0.12 s.

### 6.1.2 Espejo de Bragg

Con el objetivo de hacer un primer acercamiento a estructuras periódicas, se exploró un cristal fotónico unidimensional. Un espejo de Bragg es un arreglo periódico de láminas dieléctricas uniformes, como se puede ver en la figura 6.4(a).

Esta estructura cristalina es particularmente interesante. Presenta propiedades características de los cristales fotónicos, como las brechas fotónicas, y es, relativamente, sencillo de abordar de manera teórica (la transmisión, reflexión y otras propiedades ópticas de este sistema pueden ser estudiadas a través del formalismo matricial del anexo A [75]). Por ejemplo, en la figura 6.4(b) puede encontrarse la transmitancia, calculada con *RCWA*, de ondas planas, con  $\theta = 0^\circ$ , incidiendo sobre un espejo de Bragg con índices de refracción  $n_1 = 3.6$  y  $n_2 = 1$ , con  $d_1 = d_2 = a$ . Se destaca que estos resultados se acercan lo suficiente, de manera cualitativa, a las curvas de transmitancia características de un espejo de Bragg presentes en la literatura [75, 115]. Además, se resalta una propiedad fundamental del método numérico, que fue mencionada al finalizar la sección anterior; los resultados de las simulaciones son independientes de la cantidad de componentes de Fourier utilizadas. Esto se debe a que el sistema es uniforme en las direcciones

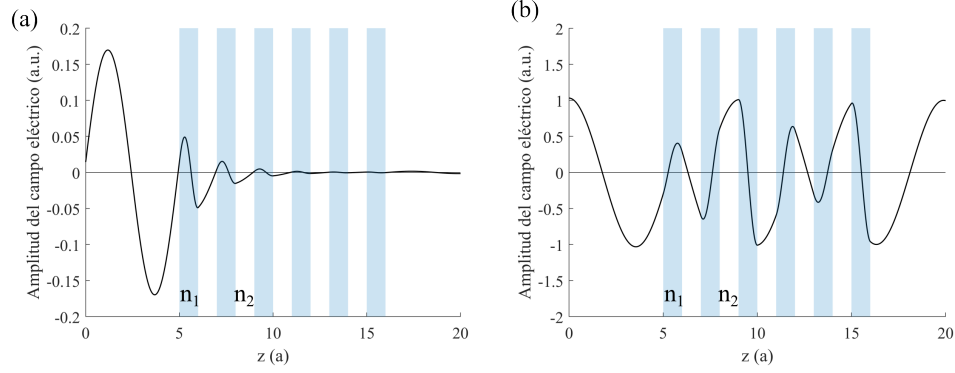


Figura 6.5: Comportamiento de la amplitud del campo eléctrico cuando una onda electromagnética plana, con frecuencia (a)  $0.2\omega a/2\pi c$  y (b)  $0.14\omega a/2\pi c$ , incide a  $\theta = 0$  sobre un espejo de Bragg con 11 capas con espesor  $a$ , e índices de refracción  $n_1 = 3.6$  y  $n_2 = 1$ . La frecuencia de la onda plana en (a) pertenece a una brecha fotónica, mientras que, la frecuencia de la onda plana en (b), no.

$x$  e  $y$ , es decir, no es periódico en las direcciones en las que se involucra la transformada de Fourier durante el diseño de *RCWA*. Entonces, la cantidad de términos de Fourier utilizados en la simulación no afecta los resultados; observar las ecuaciones 5.24 y 5.25. Por otro lado, es importante mencionar que el hecho de que *RCWA* simule la periodicidad de los sistemas en el plano  $xy$ , implica que no simula periodicidades infinitas en la dirección  $z$ , por lo tanto, un sistema como el espejo de Bragg está forzado a ser finito en esta dirección. Sin embargo, tal como se mencionó en el capítulo dedicado a los métodos numéricos, la inclusión de un número grande de periodos en el dominio computacional, en proporción con el parámetro de red, logra ser una aproximación fiel al sistema original. En las simulaciones dedicadas al espejo de Bragg, se usó una cantidad de 168 capas, que es una cantidad más que suficiente para observar las propiedades de un cristal fotónico unidimensional. Naturalmente, mientras más capas se usaran en la simulación, más tiempo tardaba en converger el método numérico, de hecho, para *RCWA*, este tiempo crece en el orden de  $O(MN_m^3)$ , donde  $M$  es el número de capas y  $N_m$  la cantidad de términos de Fourier [55]. En este sentido, dado que se puede utilizar una cantidad mínima de  $N_m$  (un sólo término de Fourier es suficiente), fue posible aumentar considerablemente la cantidad de capas sin afectar notoriamente el tiempo de compilación.

Por otra parte, en la figura 6.4, es evidente la aparición de tres zonas, alrededor de  $0.1\omega a/2\pi c$ ,  $0.2\omega a/2\pi c$  y  $0.3\omega a/2\pi c$ , donde la transmitancia cae, exactamente, a cero. Esto es una indicio claro de la presencia de tres brechas fotónicas distintas. Pues, tal como se discutió en el primer capítulo, las ondas electromagnéticas cuya frecuencia haga parte de una brecha fotónica, no puede propagarse a través del cristal fotónico y, por lo tanto, es completamente reflejada. En la figura 6.5 se pueden encontrar dos ejemplos, bastante interesantes, de la amplitud del campo eléctrico resultante de la incidencias de una onda plana sobre un espejo de Bragg con pocas capas. El primer caso (6.5(a)) muestra lo que sucede cuando una onda plana, cuya frecuencia hace parte de una brecha fotónica, incide de manera normal sobre un espejo de Bragg. Como se puede observar, la amplitud de la onda transmitida es, prácticamente, cero (no llega a ser cero, pues la cantidad de capas usadas, 11, no es suficiente para encontrar una reflectancia completa [115]). Mientras que, en la figura 6.5(b), la onda plana, con frecuencia  $0.14\omega a/2\pi c$ , logra transmitirse a través del cristal fotónico, ya que no hace parte de una brecha fotónica.



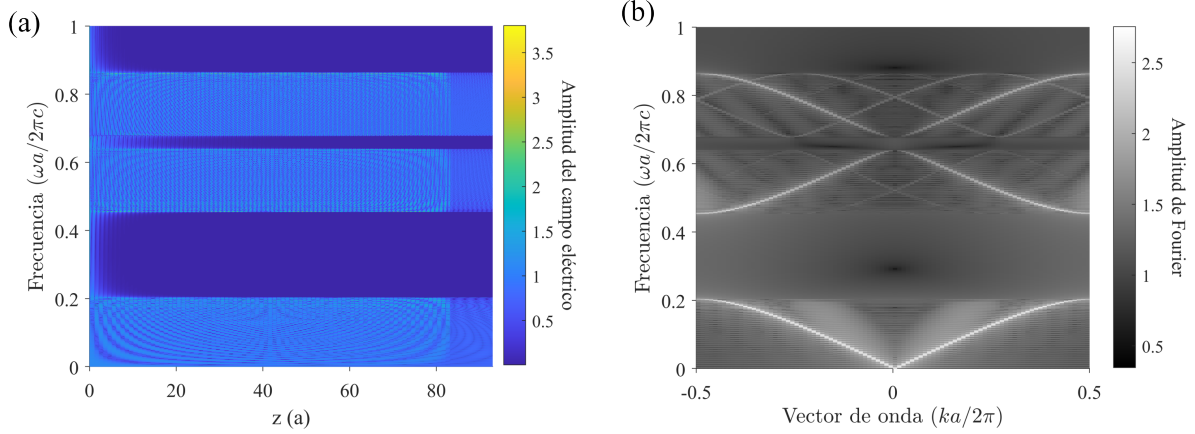


Figura 6.6: (a) Cálculo de la amplitud del campo magnético a través de un espejo de Bragg, con 168 capas y  $n_1 = 3.6$ ,  $n_2 = 1$ ,  $d_1 = 0.8a$  y  $d_2 = 0.2a$ , en función de la coordenada  $z$  y la frecuencia de la onda electromagnética plana incidente, con  $\theta = 0$ . Cálculos realizados con *RCWA*. se observar cómo, en las brechas fotónicas, el campo electromagnético logra penetrar superficialmente,  $z = 0$ , el espejo de Bragg hasta desvanecerse. Y (b) transformada de Fourier, a lo largo de la coordenada espacial  $z$ , de estos resultados. En los máximos de esta gráfica se obtiene la estructura de bandas de este cristal fotónico unidimensional.

Ahora bien, el objetivo principal de esta prueba fue explorar un primer método para obtener la estructura de bandas de un cristal fotónico. Este método está basado en el hecho de que el campo electromagnético dentro de un cristal fotónico, cuando incide una onda plana con frecuencia  $\omega$ , será una superposición de los modos de Bloch 2.20. Esto quiere decir que si se realiza la transformada de Fourier de la distribución espacial del campo electromagnético dentro del cristal fotónico, se obtendrán picos en los vectores de onda  $\mathbf{k}$  de los modos de Bloch involucrados en dicha superposición. En otras palabras, a través de estos máximos se podría realizar una relación directa entre la frecuencia  $\omega$  y  $\mathbf{k}$ , es decir, se encontraría la estructura de bandas.

En la figura 6.6(a) se puede observar la amplitud del campo eléctrico a través de un espejo de Bragg, con 168 capas y  $n_1 = 3.6$ ,  $n_2 = 1$ ,  $d_1 = 0.8a$  y  $d_2 = 0.2a$ , en función de la coordenada  $z$  y la frecuencia de la onda electromagnética plana. Las brechas fotónicas se hacen evidentes, pues, como es de esperarse, la amplitud del campo electromagnético es cero. El campo electromagnético logra penetrar superficialmente el espejo de Bragg, pero se desvanece rápidamente. A estos resultados se les aplica la transformada de Fourier, en la dirección horizontal para mantener la frecuencia y transformar la coordenada espacial  $z$  en la coordenada recíproca  $k$ , y se obtiene la figura 6.6(b). Aquellos máximos con mayor intensidad son los que conforman el diagrama de bandas de este cristal fotónico. Los picos en la amplitud de Fourier que no hacen parte de la estructura de bandas son resultado de que la superposición del campo electromagnético también incluye las funciones periódicas  $\mathbf{u}_{\mathbf{k}n}$  y una porción del campo electromagnético por fuera del espejo de Bragg, después de  $z = 168a$ . Realizando una comparación cualitativa con resultados presentes en la literatura [17], se puede concluir que estos resultados son satisfactorios.



### 6.1.3 Lámina de cristal fotónico Bidimensional

Debido a que el método para obtener la estructura de bandas, presentado al final de la sección anterior, describe adecuadamente el espejo de Bragg (un cristal fotónico unidimensional), surge la pregunta: ¿Cómo extender este método para estructuras más complejas, como láminas de cristal fotónico dos dimensionales, ó estructuras bilaminas que forman patrones de Moiré? Pues bien, la respuesta no es trivial y la discusión a continuación sugiere la búsqueda de un nuevo procedimiento. Por ejemplo, para una lámina de cristal fotónico bidimensional se debería calcular el campo electromagnético, dentro de la lámina y a lo largo de un plano paralelo a esta, en función de la frecuencia de la onda plana incidente. Después, al calcular la transformada de Fourier, a través de los máximos en las amplitudes resultantes, se obtendrían las curvas de isofrecuencias de la estructura de bandas. Claramente, en terminos computacionales, este procedimiento sería mucho más costoso, pues, sería necesario aplicar *RCWA* para obtener el campo eléctrico sobre una superficie (para el espejo de Bragg sólo fue necesario realizar este cálculo a lo largo de una recta, debido a las simetrías del sistema), y calcular la transformada de Fourier dos-dimensional de estos resultados. Por ejemplo, para obtener la figura 6.6(b) fue necesario aplicar la transformada rápida de Fourier a 200 arreglos de punto flotante con 200 elementos, cada uno. En el ejemplo de un sistema con una periodicidad bidimensional, sería necesario calcular la transformada de Fourier dos-dimensional de 200 matrices con  $200^2$  elementos, cada una. Esto hace que este método sea menos atractivo, pues, el aumento del costo computacional es notable y se hace evidente el aumento de complejidad al lidiar con datos de esta dimensión. Además, no hay certeza que este método, como se está planteando aquí, funcione más adelante. Ciertamente, en un cristal fotónico bidimensional funcionaría sin mayor inconveniente. La simetría traslacional continua que tienen este tipo de sistemas, garantiza que el campo electromagnético, resultado de la excitación de una onda plana con vector de onda perpendicular a la periodicidad del cristal fotónico, se propague manteniendo dicha simetría traslacional. Por lo tanto, este método, basado en la aplicación de la transformada de Fourier sobre la distribución espacial del campo electromagnético, sería, sin lugar a dudas, aplicable sobre estos sistemas periódicos e infinitos. Sin embargo, una lámina de cristal fotónico carece de esta simetría traslacional infinita, lo cual complica la aplicación de este procedimiento. Entonces, una solución podría ser plantear una lámina de cristal fotónico cuyo espesor  $d$  sea mucho más grande que su parámetro de red  $a$ ,  $d \gg a$ , para aproximar la lámina de cristal fotónico, lo máximo posible, a un cristal fotónico. Sin embargo, esta imposición en el espesor  $d$  trae consecuencias indeseables, pues impediría la investigación de situaciones que solo tienen lugar cuando  $d$  es comparable con  $a$ . Cabe resaltar que en el caso del espejo de Bragg, se realizó una aproximación de su periodicidad, más no, de su simetría traslacional en el plano  $xy$ , figura 6.4 (las condiciones de frontera periódicas, impuestas en el diseño de *RCWA*, se encargaron de simular la dimensionalidad infinita, en dos direcciones, de las láminas uniformes). En el caso de las láminas de cristal fotónico, no existe forma de hacer algo semejante, pues el hecho de que su espesor sea finito, es una propiedad intrínseca de éstas estructuras. En este sentido, tampoco está claro cómo aplicar este método para obtener la estructura de bandas de sistemas bilaminas más complejos como el de la figura 4.2(c). Entonces, resulta necesario encontrar una alternativa con un enfoque distinto sobre el problema.

El método seleccionado fue *Espectroscopía resuelta en ángulo* (capítulo 3), el cual está basado en que el acoplamiento de la radiación externa a los modos propios de la lámina de cristal fotónico, se manifiesta en forma de una resonancia de Fano en la transmitancia. Este método fue aplicado como ejemplo para obtener la estructura de bandas, en la direcciones  $\Gamma X$ ,  $XM$  y  $\Gamma M$ , de una lámina de cristal fotónico con índice de refracción 3.46 de red cuadrada, cuyo

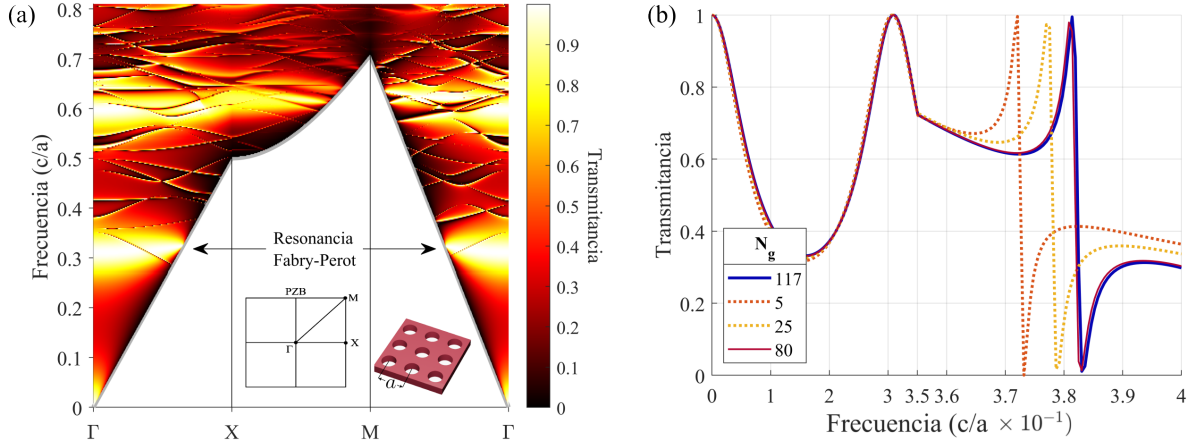


Figura 6.7: (a) Estructura de bandas de una lámina de cristal fotónico con índice de refracción 3.46 con red cuadrada, obtenida utilizando el método de espectroscopía resuelta en ángulo en *RCWA* y (b) resultados de la transmitancia en el punto  $\Gamma$  para diferentes cantidades de términos de Fourier  $N_g$ . Se puede apreciar que la resonancia de Fano, después de  $0.35 c/a$ , es la más difícil de describir con pocos términos de Fourier.

parámetro de red es  $a$ , su espesor  $0.2a$  y está compuesta por agujeros cilíndricos de radio  $0.4a$ .

En la figura 6.7(a) se puede observar la estructura de Bandas obtenida con este método. Aquellos cambios afilados en la transmitancia son las resonancias de Fano resultantes de la excitación de los modos de fuga del sistema, y se corresponden con la estructura de bandas. También se pueden observar las resonancias Fabry-Perot, alrededor de  $0.3 c/a$  y  $0.6 c/a$ , que hacen parte del *fondo* del espectro. Por otro lado, en la parte superior de la estructura de bandas se encuentran los modos de orden superior que, como se puede observar, están muy cercanos entre sí. Por lo tanto, no sería posible aprovecharlos para la *fabricación de un dispositivo óptico* como el que se busca diseñar en este trabajo. Por esa razón, durante las simulaciones posteriores no se explorarán los espectros de transmitancia a frecuencias tan altas, pues los modos de fuga no se encuentran lo suficientemente separados entre sí como para poder ser aprovechados experimentalmente.

Esta prueba también fue aprovechada para visualizar, de manera directa, el papel que cumple la cantidad de términos de Fourier en los resultados de *RCWA*. En la figura 6.7(b) se puede observar el comportamiento de la transmitancia, en el punto  $\Gamma$  del diagrama de bandas, para diferentes cantidades de términos de Fourier. En la gráfica, en el rango  $0 c/a$  y  $0.35 c/a$ , no se observa una diferencia notable entre los 4 ejemplos. Esto se debe a que, en esta zona, el comportamiento de la transmitancia está descrito, principalmente, por la *respuesta rápida del sistema*, que depende de la estructura general de la lámina y no de sus particularidades. Es decir, que las frecuencias en el rango  $(0 c/a, 0.35 c/a)$  la transmitancia son tan pequeñas, que la onda plana incidente no logra interactuar con los agujeros, ni la periodicidad, de la lámina de cristal fotónico. Por lo tanto, la luz se comporta como si incidiera sobre una lámina dieléctrica uniforme, por esta razón, aparece de manera clara la primera resonancia Fabry-Perot. Entonces, la cantidad de términos de Fourier no modifica notablemente los resultados, pues, tal como fue expuesto en las primeras dos secciones de este capítulo, *RCWA* logra simular de manera satisfactoria el comportamiento óptico de sistemas dieléctricos uniformes sin que la cantidad de términos de Fourier juegue un papel clave en las simulaciones. Sin embargo, en el rango

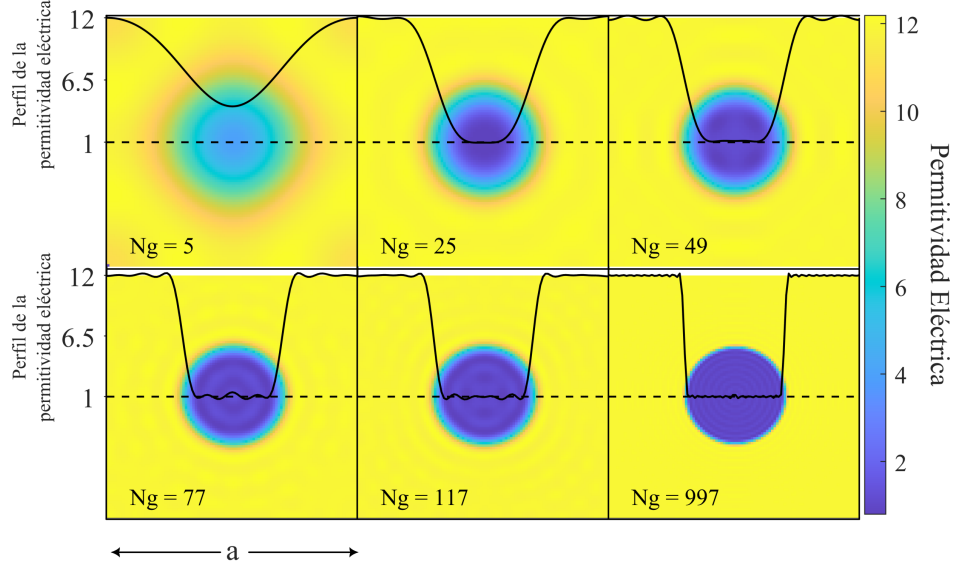


Figura 6.8: Reconstrucción de la permitividad eléctrica de la celda unitaria de una lámina de cristal fotónico para distintas cantidades de términos de Fourier ( $N_g$ ). El perfil de la permitividad eléctrica, calculado sobre la línea punteada, se presenta superpuesto a los mapas de calor.

( $0.35c/a$ ,  $0.4c/a$ ), las consecuencias de usar pocos términos de Fourier se hacen evidentes. La forma que toma la transmitancia en esta región es característica de una resonancia de Fano, es decir, que el comportamiento del espectro se ve influenciado por la *respuesta lenta*, la cual surge cuando la radiación exterior se acopla a algún modo propio de la lámina. Por tanto, la cantidad de términos de Fourier es fundamental en para la correcta convergencia del método.

Estos resultados motivaron el criterio de selección de la cantidad de términos de Fourier que se decidió utilizar de aquí en adelante. En *RCWA*, la permitividad eléctrica es descompuesta en términos de Fourier. Por lo tanto, es posible realizar la reconstrucción de este parámetro y determinar su exactitud y precisión con respecto a la permitividad dieléctrica ideal. En la figura 6.8 se puede observar dicha reconstrucción en función de la cantidad de términos de Fourier para la lámina de cristal fotónico que está siendo tratada en esta sección. Tal como era de esperarse, pocos términos de Fourier ( $N_g = 5, 25$ ) no realizan una reconstrucción certera, mientras que, una cantidad alta de términos, como  $N_g = 997$ , sí lo hace. Sin embargo, utilizar 997 términos de Fourier para realizar las simulaciones no es realista, pues el tiempo de ejecución de *RCWA* escala con  $O(N_g^3)$  para una única lámina de cristal fotónico [55]. Por ejemplo, el cálculo de 6.7(a), con  $N_g = 117$ , tardó alrededor de  $\sim 616$  horas, tiempo de procesador. Entonces, utilizar 997 términos de Fourier no es viable técnicamente. Por lo tanto, se decide trabajar con la mayor cantidad de términos que permita optimizar la exactitud y la precisión en la reconstrucción de la permitividad eléctrica y el tiempo de ejecución en la máquina.

Cabe mencionar que los vectores recíprocos utilizados en la expansión en términos de Fourier del *RCWA* fueron seleccionados de manera simétrica. Por ejemplo, se consideraron los primeros vecinos, o los primeros y segundos vecinos, o los primeros, segundos y terceros vecinos, etc., del punto  $\Gamma$ . Esto, con el objetivo de no priorizar ninguna dirección.

Finalmente, con el objetivo de realizar una evaluación directa de los resultados expuestos

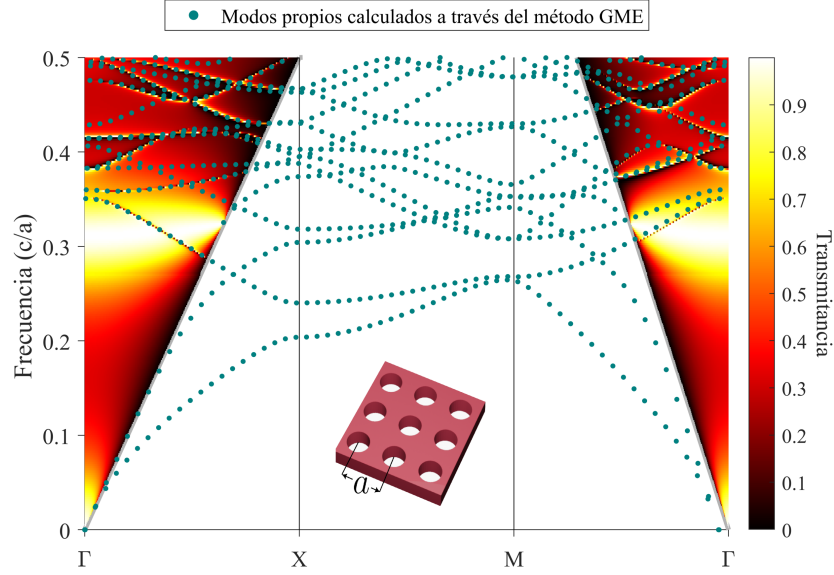


Figura 6.9: Comparación directa del cálculo de la estructura de bandas de un cristal fotónico con red cuadrada utilizando *GME*, puntos, y *espectroscopía resuelta en ángulo* con *RCWA*, mapa de calor.

en la figura 6.7(a), se realizó el cálculo de la estructura de bandas de la misma lámina de cristal fotónico a través del método *Guided-Mode Expansion* [77], *GME*. Como se puede observar en la figura 6.9, a través de una comparación cualitativa, las resonancias de Fano en la transmitancia se ajustan correctamente a los resultados obtenidos con este nuevo método. Esto indica que el método de *Espectroscopía resuelta en ángulo* aplicada a través de *RCWA* funciona correctamente en el entorno computacional construido. Cabe mencionar que algunas de las resonancias encontradas por *GME* no aparecen en el espectro de transmitancia calculado con *RCWA*, por ejemplo aquella en  $0.38 c/a$  cerca del punto  $\Gamma$ . Esto se debe a que es un modo de fuga de orden mayor que no fue posible observar con la cantidad de términos de Fourier utilizados en la simulación de *RCWA*. Este es otro ejemplo que señala la importancia de utilizar un número grande de términos de Fourier, sin embargo, no es problemático, pues la mayoría de las resonancias guiadas sí aparecen.

## 6.2. Pruebas de concepto

Tras confirmar que el entorno computacional construido expone correctamente fenómenos ópticos bien conocidos y funciona de manera adecuada para estructuras cristalinas, se decidió explorar sistemas bilaminares cuya estructura general da lugar a patrones periódicos. Esto se realizó con dos objetivos

1. Evidenciar la presencia de resonancias guiadas de sistemas bicapa que pueden ser manipuladas a través de un giro, o desplazamiento, entre las láminas del sistema.
2. Encontrar un punto intermedio entre estructuras cristalinas, como las láminas de cristal fotónico, y las estructuras de Moiré, conmensuradas e inconmensuradas, formadas a través del giro relativo de láminas de cristal fotónico.

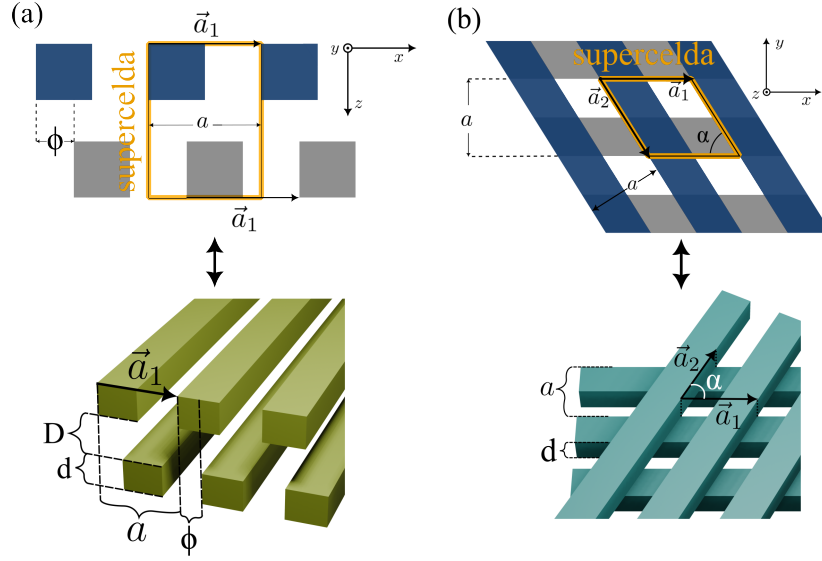


Figura 6.10: Representación diagramática y tridimensional de dos sistemas compuestos por la superposición de dos rejillas de difracción idénticas que forman un patrón de Moiré a través de (a) el desplazamiento  $\phi$  y (b) el ángulo de giro  $\alpha$ . Las rejillas de difracción tienen un factor de llenado de 0.5 y en la estructura bilaminar se encuentran separadas entre sí por una distancia  $D$ . En ambos diagramas se señala la supercelda del sistema.

De esta manera se logra explorar el efecto de estos nuevos grados de libertad que surgen en las estructuras bilaminares sin incurrir en los fenómenos e implicaciones que se producen al estudiar estructuras incommensuradas.

Entonces, se decidió estudiar el comportamiento óptico de dos sistemas compuestos por la superposición de dos rejillas de difracción. En ambos casos se estudia el comportamiento óptico, a través de la transmitancia, en el punto  $\Gamma$  y a una incidencia de  $\theta = 30^\circ$ , en función del desplazamiento  $\phi$ , para el primer caso, y el ángulo de giro  $\alpha$ , para el segundo caso, respectivamente. Ver las figuras 6.10(a) y 6.10(b).

Estos sistemas pueden ser estudiados a través de la forma convencional de *RCWA*, pues, como se puede ver en la figura 6.10, es posible encontrar una supercelda periódica. Esto se debe a que las rejillas de difracción, individualmente, presentan una periodicidad unidimensional, lo cual permite que el conjunto de dos láminas cuente con una red recíproca unidimensional, para el primer caso, y bidimensional, para el segundo caso. Además, debido a que la segunda estructura también puede ser explorada a través de *RCWA4D*, esta parte de las pruebas de concepto fue enfocada a la comparación directa entre la aproximación por supercelda y dicha modificación de *RCWA*.

### 6.2.1 Patrón de Moiré por Desplazamiento

Las rejillas de difracción construidas en la simulación, para este primer caso, contaban con un espesor  $d = 1/4 a$  y una separación entre sí de  $D = 8/100 a$ , con una permitividad eléctrica relativa de 9.8, que se corresponde con la alumina en el rango de las microondas [44].

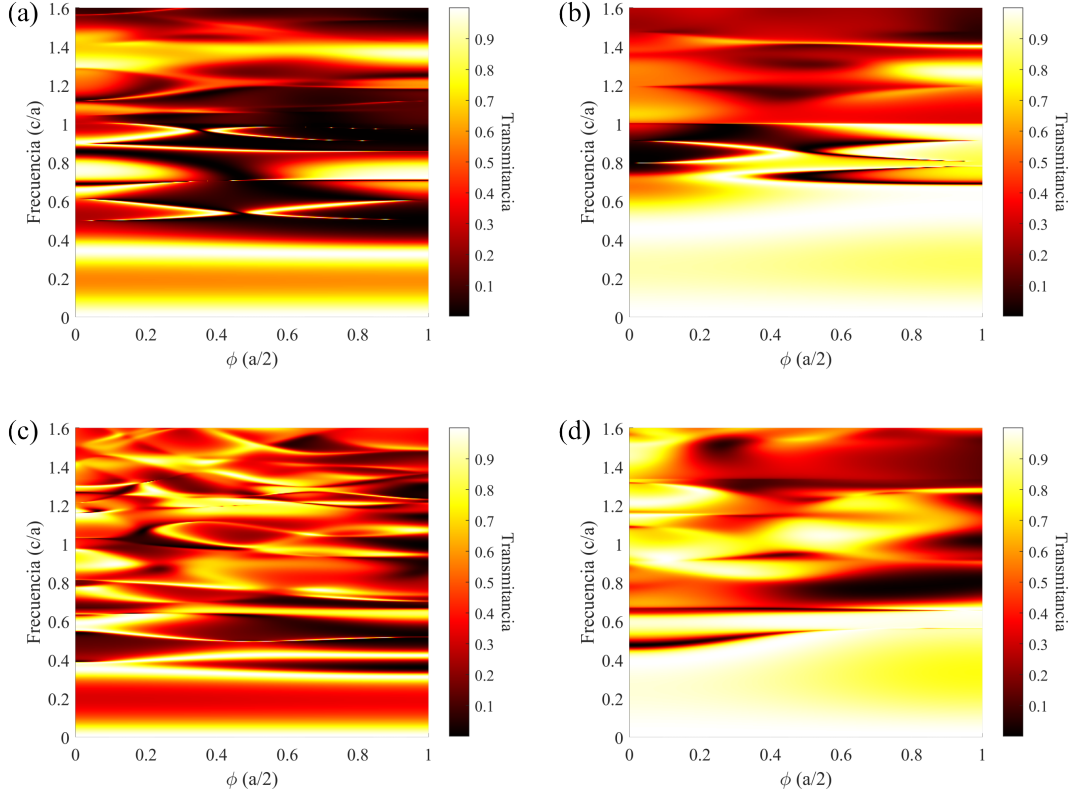


Figura 6.11: Espectros de transmitancia en función del desplazamiento  $\phi$  para un sistema bilaminar de rejillas de difracción, con una permitividad eléctrica de 9.8, superpuestas entre sí. Cada rejilla cuenta con un parámetro de red  $a$ , espesor  $1/4 a$  y están separadas entre sí  $1/800 a$ . Las figuras (a) y (b) presentan los resultados para una incidencia normal de la luz a la estructura, mientras que las figuras (c) y (d), presentan los resultados para una incidencia con  $\theta = 30^\circ$ . La primer y segunda fila se corresponden con los resultados para polarización  $s$  y  $p$ , respectivamente.

Los resultados para la polarización  $s$  y  $p$ , para incidencias normal y oblicua de  $\theta = 30^\circ$ , se encuentran en la figura 6.11. Al observar estos resultados, es posible evidenciar, inmediatamente, la aparición de las resonancias de Fano y cómo estas dependen del parámetro  $\phi$ .

Al seleccionar un ángulo de incidencia  $\theta$  distinto a  $0^\circ$ , es esperable que las simetrías del sistema se rompan y, por lo tanto, el degeneramiento de algunos modos de fuga se levante. Como resultado, existen resonancias guiadas del punto  $\Gamma$  que se dividen en dos, o más, cuando se explora un punto distinto de la primera zona de Brillouin [57]. Esto se evidencia al observar la segunda fila de la figura 6.11, donde el efecto de la ruptura de esta simetría se hace evidente, pues la cantidad de resonancias de Fano es mucho mayor que en las figuras superiores. Este efecto se hace más evidente a frecuencias mayores, ya que, basándose en la ecuación 3.1 y considerando los ángulos  $\theta$  y  $\phi$  fijos, mientras más grande sea la frecuencia de la onda plana incidente, más se alejará la resonancia guiada excitada del punto  $\Gamma$ .

Considerando que el objetivo principal de esta prueba de concepto es evidenciar la aparición de resonancias guiadas que dependen directamente del desplazamiento  $\phi$ , se puede afirmar que los resultados fueron satisfactorios. De hecho, los resultados obtenidos para los cuatro casos exponen resonancias de Fano bien comportadas que podrían ser aplicadas para el objetivo final



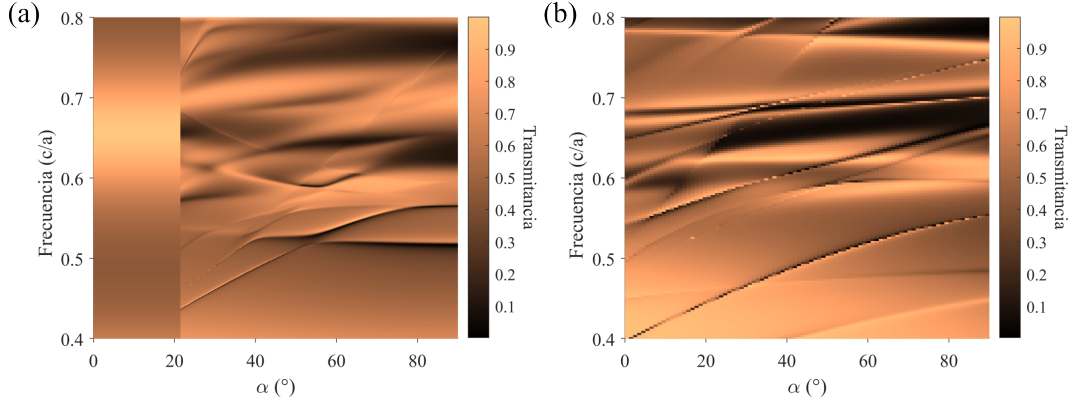


Figura 6.12: Espectro de transmitancia, calculado con (a) *RCWA* a través de la supercelda del sistema y (b) *RCWA4D*, para un sistema bicapa de rejillas de difracción con parámetro de red  $a$ , espesor  $a/4$  y permitividad eléctrica de 9.8, superpuestas a una distancia  $a/800$  y giradas entre sí un ángulo  $\alpha$ .

de este trabajo, el diseño de un dispositivo óptico. Pues, tal como puede observarse en la figura 6.11(a), por ejemplo, a partir  $\phi = 0.47$  es posible filtrar las frecuencias que se transmiten a través de la estructura desde  $0.54 c/a$  hasta  $0.60 c/a$  (también sería posible aprovechar el máximo de transmitancia que depende de  $\phi$ , alrededor de  $0.4 c/a$  o  $0.6 c/a$ , en la figura 6.11). En este sentido, este sistema resulta muy llamativo, pues ejemplos como este pueden encontrarse en los cuatro casos explorados. Entonces, esta estructura será analizada con mayor detenimiento en una sección posterior donde se realizarán cálculos de su transmitancia en condiciones más realistas.

### 6.2.2 Patrón de Moiré por Giro

Con el objetivo de comparar directamente los resultados de la aproximación por supercelda y *RCWA4D*, se decidió estudiar el comportamiento óptico del sistema en la figura 6.10(b) con parámetros  $d = a/4$ ,  $D = 8a/100$  y una permitividad eléctrica 9.8. Tomando como condiciones iniciales ondas electromagnéticas incidentes con polarización  $s$ , ángulo  $\theta = 26.6^\circ$  y frecuencia  $\omega$ , se realizaron los cálculos de la transmitancia en función de  $\omega$  y  $\alpha$  utilizando la versión convencional de *RCWA* y *RCWA4D*. Las gráficas correspondientes a ambas simulaciones se encuentran en la figura 6.12.

Al observar los resultados para la aproximación por supercelda, figura 6.12(a), resalta inmediatamente que por debajo de los  $21^\circ$  la transmitancia no presenta ninguna resonancia de Fano. De hecho, el comportamiento es el mismo para cada valor de  $\alpha$  en este intervalo. Dicho comportamiento expone una de las principales desventajas del uso del enfoque por supercelda: si se observa la figura 6.10(b) es posible percatarse de que cuando  $\alpha$  toma valores pequeños, la supercelda se hace más delgada y dos de sus esquinas se tornan más agudas. Esto implica que durante la simulación, la representación en términos de Fourier de la permitividad eléctrica, para valores pequeños de  $\alpha$ , requiere vectores recíprocos de orden cada vez mayor. Bajo esta perspectiva, la ausencia de resonancias de Fano, entre  $\alpha = 0^\circ$  y  $\alpha = 21^\circ$ , indica que la cantidad de términos de Fourier utilizados en la simulación no fue suficiente para describir correctamente el sistema. Ciertamente, esto se confirma al observar la gran similitud entre dicho comportamiento y el espectro de transmitancia de dos láminas uniformes con

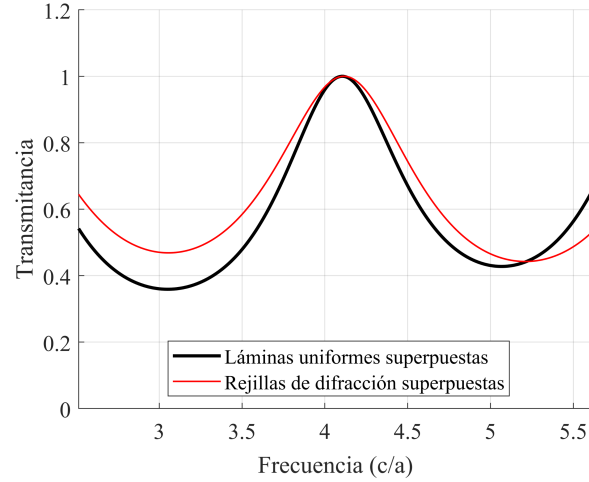


Figura 6.13: Comparación entre el espectro de transmitancia de un sistema de dos láminas uniformes con permitividad eléctrica de 8.3 (ver el anexo A para más información) y el espectro de transmitancia, obtenido a través del enfoque de supercelda en *RCWA* con 37 términos de Fourier, para dos rejillas de difracción superpuestas y giradas entre sí un ángulo  $\alpha = [0^\circ, 21^\circ]$ , con permitividad eléctrica de 9.8. Las láminas de ambos sistemas tienen un espesor de  $a/4$  y una intercapa de  $8a/100$ .

permitividad eléctrica 8.3 y parámetros geométricos idénticos al sistema de las rejillas de difracción, figura 6.13.

Por otra parte, al observar con detenimiento los resultados obtenidos a partir de la versión modificada de *RCWA*, figura 6.12(b), se observa una gran diferencia con los resultados anteriores, pues es evidente que el comportamiento general difiere notoriamente entre ambas gráficas. Sin embargo, aquella resonancia guiada que varía desde  $0.4 c/a$  hasta  $0.55 c/a$ , representa una gran similitud entre ambos espectros de transmitancia y permite evidenciar una de las debilidades de *RCWA4D*: los resultados de la figura 6.12(a) fueron obtenidos utilizando 37 términos de Fourier para describir todo el sistema, mientras que para los resultados obtenidos en 6.12(b) se utilizaron  $25^2$  términos de Fourier (este valor se corresponde con el uso de dos bases de 25 elementos, o términos de Fourier, para describir la primera y la segunda capa, pues el producto tensorial entre ambas bases resulta en un conjunto de vectores con  $25^2$  elementos, ver el capítulo 5). A pesar de que este número parezca grande y, por lo tanto, debería implicar que los resultados en 6.12(b) son más acertados, la cantidad de términos no es suficiente para explorar resonancias con ordenes superiores y, tal como se expone en [79], *RCWA4D* es un método de convergencia lenta para sistemas con un alto contraste en los índices de refracción; como en este caso, donde las barras de las rejillas de difracción, con  $\epsilon = 9.8$ , se encuentran suspendidas en el vacío. Por lo tanto, una mayor cantidad de términos de Fourier debería garantizar la convergencia de los resultados de *RCWA4D* a un comportamiento similar al obtenido utilizando la versión convencional de este método (si bien la inclusión de dichos cálculos habría enriquecido este análisis fue necesario optimizar el tiempo de computo disponible para analizar las demás estructuras). En este sentido, la resonancia que aparece en ambas gráficas, entre  $0.4 c/a$  y  $0.55 c/a$ , debe ser una resonancia guiada de primer orden que no requiere una gran cantidad de términos de Fourier para ser observada numéricamente. Cabe resaltar que el hecho de que dicha resonancia sea bien comportada, se presente en los resultados de ambos métodos y varíe notoriamente en función de  $\alpha$  indica que esta prueba de



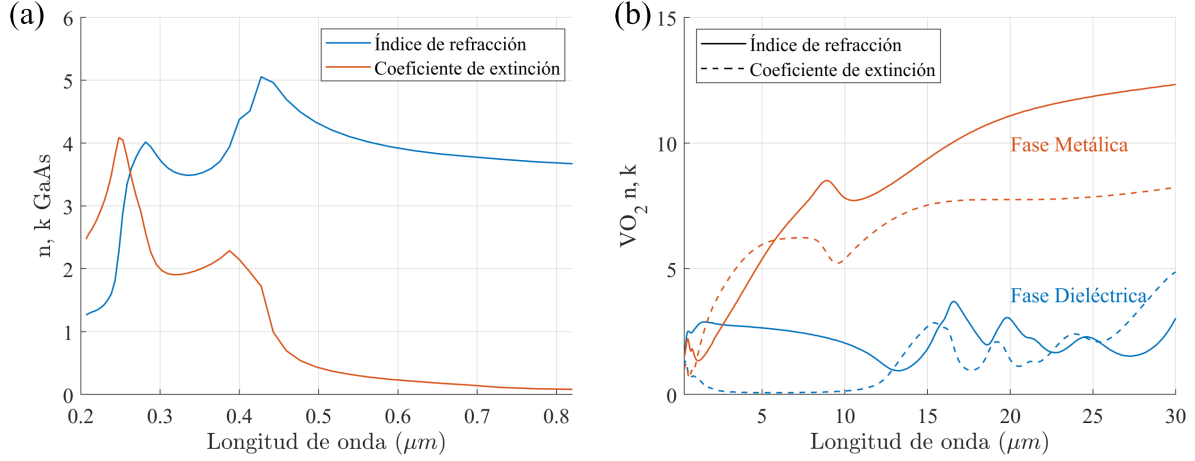


Figura 6.14: Índices de refracción y coeficientes de extinción para (a) Arsenuro de Galio y (b) Dióxido de Vanadio. Extraídos de [6] y [7], respectivamente.

concepto fue exitosa, pues indica que existe por lo menos una resonancia guiada que podría ser aprovechada en alguna aplicación futura.

De igual manera, la figura 6.12(b), también expone una de las fortalezas de  $RCWA_4D$ : a diferencia de su contraparte convencional, esta modificación de  $RCWA$  permite encontrar resonancias de Fano a ángulos pequeños. Es decir, a pesar de que  $RCWA_4D$  también tiene una convergencia lenta a ángulos de giro pequeños [79], es posible observar efectos debidos a la naturaleza no uniforme del sistema, lo cual contrasta con los resultados en 6.12(a).

Finalmente, los resultados para ambos sistemas bicapa de rejillas de difracción exponen resonancias guiadas, que varían en función de  $\phi$  y  $\alpha$ , que podrían ser aprovechadas para distintas aplicaciones. Por lo tanto, aunque estos sistemas no sean el objetivo final de este trabajo, se propone su análisis detallado, tanto experimental como teórico, en un trabajo futuro.

### 6.3. Dispositivo Óptico

Gracias a los resultados obtenidos para estos sistemas bilaminares, es posible tener una noción clara de cómo se comporta la luz cuando se propaga a través de estos. Sin embargo, estos resultados presentan una perspectiva limitada. En el primer capítulo se mencionó que la escalabilidad de la ecuación maestra resulta conveniente para estos problemas, pues el analizar cada sistema utilizando unidades espaciales arbitrarias permite relacionar los resultados con cualquier porción del espectro electromagnético sin mayores inconvenientes. No obstante, esta relación no deja de ser una aproximación, pues se ha ignorado que el índice de refracción de los materiales es dependiente de la longitud de onda de la luz y puede tomar valores complejos, donde la parte real indica la velocidad de fase de la luz y se denota por  $n$ , y la parte imaginaria, denotada por  $k$ , indica la atenuación de las ondas electromagnéticas que se propagan a través del material. Por ejemplo, el índice de refracción utilizado en las anteriores simulaciones se corresponde correctamente con el índice de refracción del *Arsenuro de Galio* (GaAs), cercano a 3.6 en el infrarrojo cercano (figura 6.14(a)). Es decir, los resultados que se han obtenido,

hasta este punto, son buenas aproximaciones para rangos del espectro electromagnético donde los materiales cuentan con un índice de refracción similar al utilizado en las simulaciones. Por esta razón, tras decidir utilizar estas simulaciones para plantear una aplicación directa de las estructuras bilaminares, como el planteamiento de un dispositivo óptico, es apropiado utilizar el índice de refracción de los materiales en función de la frecuencia de la luz y fijar las dimensiones espaciales de la estructura.

Inicialmente, para realizar una primera aproximación al uso de índices de refracción dependientes de la frecuencia de la luz, se utilizó el sistema donde las rejillas de difracción se encuentran desfasadas a través de un desplazamiento transversal, figura 6.10(a). Para esto, se decidió utilizar el *dióxido de Vanadio* ( $\text{VO}_2$ ) como material base, este cuenta con la capacidad de cambiar entre su fase metálica y su fase aislante a través de cambios en temperatura y campo eléctrico [116, 117]. Lo cual lo convierte en un material realmente llamativo para aplicaciones en óptica [118–122]. Particularmente, en este trabajo se considera como una opción realmente interesante, pues su transición de fase metal-aislante incluye un nuevo grado de libertad para el control de la propagación de la luz. Las rejillas de difracción construidas en la simulación cuentan con un parámetro de red  $a = 16 \mu\text{m}$ , espesor  $a/4$  e intercapa de  $8a/100$ . El índice de refracción de las barras de las rejillas se corresponde con el del  $\text{VO}_2$  para ambas fases, metálica y aislante, figura 6.14(b). De esta manera, se calculó la transmitancia de este sistema para las polarizaciones  $s$  y  $p$ , ambas fases del  $\text{VO}_2$  y longitudes de onda entre  $0.3 \mu\text{m}$  y  $30 \mu\text{m}$ . Estos resultados se presentan en la figura 6.15.

En la figura 6.15(a) se presentan los resultados del espectro de transmitancia para la fase dieléctrica del  $\text{VO}_2$  en polarizaciones  $s$  y  $p$ . En particular, los resultados para la polarización  $s$  presentan una resonancia guiada degenerada cerca de los  $10 \mu\text{m}$ , cuyo comportamiento es dependiente del desfase entre las rejillas de difracción. Este comportamiento resulta interesante para este trabajo; en la figura 6.16, se presenta la transmitancia en función de  $\phi$  para la longitud de onda que emiten los láseres de  $\text{CO}_2$ ,  $10.6 \mu\text{m}$ . Este comportamiento de la transmitancia sugiere la posibilidad de que esta estructura sea empleada como filtro atenuador del láser, pues es capaz de reducir la transmitancia máxima en un 75% de manera continua para esta longitud de onda. También, para la polarización  $p$ , se observan comportamientos similares alrededor  $4 \mu\text{m}$  y  $9 \mu\text{m}$ , donde se evidencia que la intensidad de la luz transmitida puede ser ajustada a través de  $\phi$ .

Adicionalmente, al observar la figura 6.15(a), entre  $9 \mu\text{m}$  y  $14 \mu\text{m}$  y  $\phi = [0, 0.36a/2]$ , se observa que el ancho del espectro de longitudes de onda que logran transmitirse a través de la estructura varía en función del desfase entre las rejillas de difracción, figura 6.17(a). De hecho, al tomar el ancho del espectro como el ancho a la altura media del pico más prominente, se encuentra que el ancho de este espectro sigue una relación lineal con  $\phi$ , ver la figura 6.17(b). Al realizar una regresión lineal de estos resultados, se encuentra que el ancho  $W$  sigue la ecuación:

$$W = -5.79 \cdot \phi + 3.97 \quad [\mu\text{m}], \quad (6.10)$$

con un coeficiente de correlación lineal de 0.99. Es decir, es posible utilizar el desfase  $\phi$  para ajustar el ancho del espectro transmitido, con una transmitancia máxima de  $0.27 \pm 1.2 \times 10^{-4}$ , desde  $3.44 \mu\text{m}$  hasta  $1.96 \mu\text{m}$ , manteniendo la longitud de onda máxima transmitida en  $13.34 \pm 2.7 \times 10^{-3} \mu\text{m}$ .

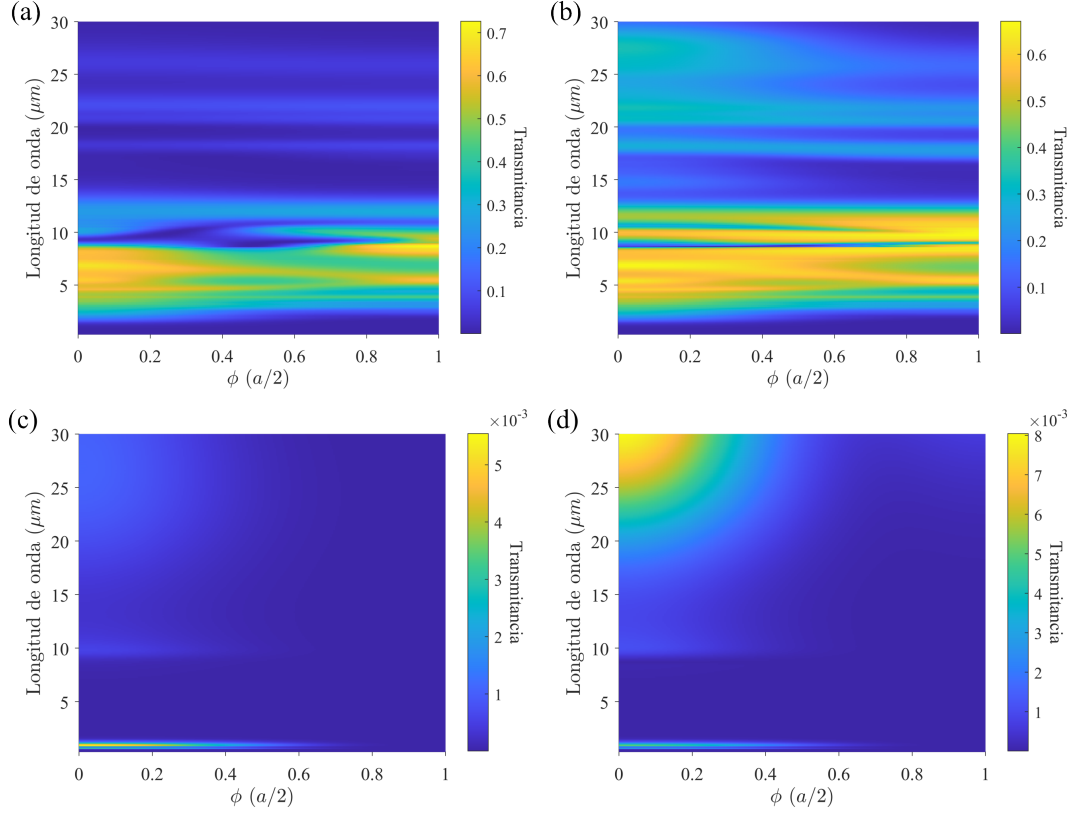


Figura 6.15: Espectro de transmitancia, para polarizaciones (a, c)  $s$  y (b, d)  $p$ , de dos rejillas de difracción superpuestas de manera paralela, con parámetro de red  $a = 16 \mu m$ , espesor  $a/4$  e intercapa  $8a/100$ , desfasadas entre sí una distancia  $\phi = [0, a/2]$ . Las barras de ambas rejillas de difracción se consideran compuestas por  $VO_2$  en su fase dieléctrica, primera fila, y su fase metálica, segunda fila.

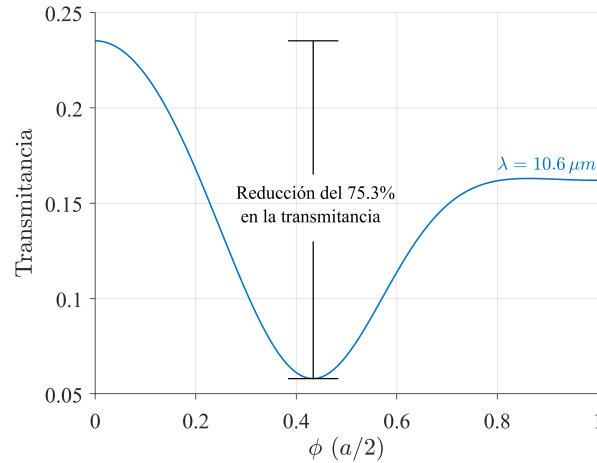


Figura 6.16: Extracción del espectro de transmitancia, para la polarización  $s$ , de la estructura compuesta por dos rejillas de difracción a una longitud de onda  $16 \mu m$  en función del desfase  $\phi$ . Se observa una curva bien comportada cuyo mínimo de transmitancia se corresponde con el 24.3% de la transmitancia máxima a esta longitud de onda.

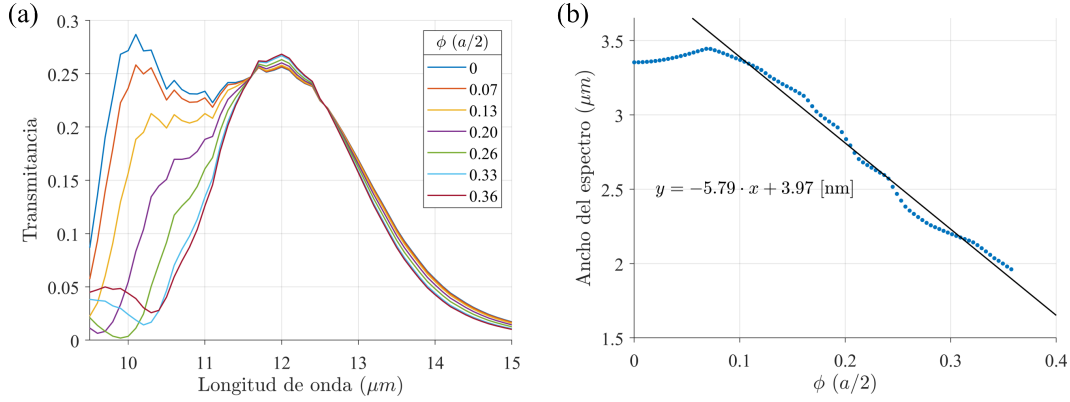


Figura 6.17: (a) Extracción de espectros de transmitancias, para la polarización  $s$ , de la estructura compuesta por dos rejillas de difracción entre  $9.6 \mu\text{m}$  y  $15 \mu\text{m}$  para distintos valores de desfase  $\phi$ . Se observa que el ancho del espectro, tomado a partir de la altura media del pico más prominente, de las longitudes de onda transmitidas a través de la estructura disminuye en función de  $\phi$ . Este comportamiento se encuentra representado en (b), donde se obtiene un comportamiento lineal cuyo coeficiente de correlación es de 0.99.

Finalmente, al observar los resultados para la fase metálica del  $\text{VO}_2$ , figura 6.15(c, d), se encuentra que la transmitancia máxima para las polarizaciones  $s$  y  $p$  es de  $5.5 \times 10^{-3}$  y  $8.0 \times 10^{-3}$ , respectivamente. Esta caída abrupta en la cantidad de luz transmitida era esperable, ya que, en su fase metálica, el coeficiente de extinción del  $\text{VO}_2$  toma un valor grande y comparable con la parte real del índice de refracción. Además, este comportamiento es realmente interesante, pues sugiere la posibilidad de crear un sistema que reduce, como mínimo, el 99.2% de la intensidad de la luz transmitida a través del cambio de fase del dióxido de vanadio.

### Dispositivo óptico basado en una estructura cuasicristalina

Para analizar las resonancias guiadas de las estructuras bicapa con red cuasicristalina, se decidió analizar un sistema compuesto por dos láminas de cristal fotónico de red cuadrada giradas entre sí un ángulo  $\alpha$ , figura 6.18(a). Se considera que ambas láminas son idénticas, con espesor  $1/2 a$  y agujeros cilíndricos de radio  $1/5 a$ , donde  $a$  es el parámetro de red. En este caso, debido a que el interés principal de este trabajo es observar los fenómenos relacionados con el giro entre ambas láminas y, tal como se expuso en el capítulo 4, la primera zona de Brillouin cambia para cada ángulo, se decide estudiar el comportamiento de la estructura de bandas únicamente en el punto  $\Gamma$ . Las ondas electromagnéticas inciden con polarización  $s$  y se toma un índice de refracción de 3.4, el cual se corresponde con el índice de refracción del Silicio en el infrarrojo cercano [123].

Al revisar los resultados en la figura 6.18(b) es posible realizar tres observaciones inmediatas:

1. La transmitancia exhibe una simetría espejo a la mitad del gráfico. Esto era esperable, pues la red real que describe a las láminas de cristal fotónico presenta el grupo puntual  $C_{4v}$ , el cual contiene simetrías de espejo diagonales a  $45^\circ$  y  $135^\circ$  [57]. En este sentido, los resultados por encima de  $45^\circ$  no proveen nueva información. De hecho, debido a que la incidencia de la luz es normal a la superficie de las láminas, las polarizaciones  $s$  y  $p$  son indistinguibles entre sí, pues este grupo puntual también contiene la simetría de giro a  $90^\circ$ . Por lo tanto, estos resultados también son válidos para la polarización  $p$ .

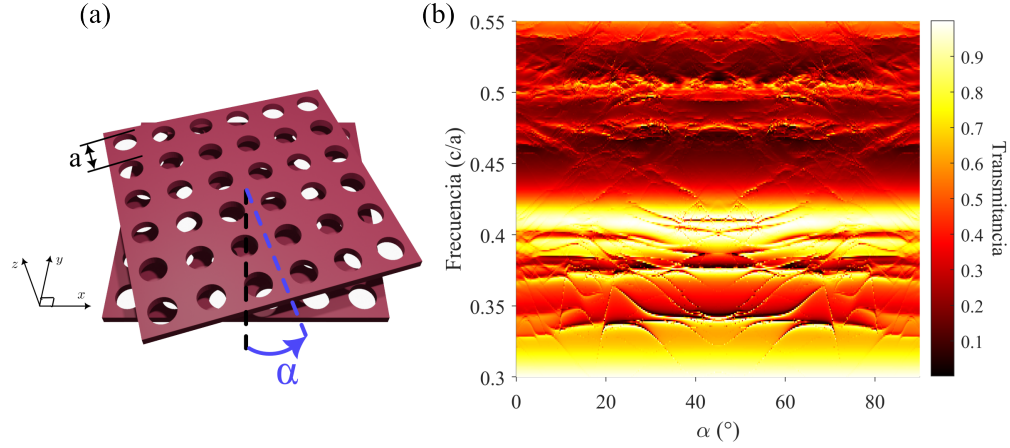


Figura 6.18: (a) Diagrama de un sistema bicapa de láminas de cristal fotónico con red cuadrada, cuya superposición forma una red cuasicristalina al girar ambas láminas entre sí. (b) Transmitancia de una estructura bicapa compuesta por dos láminas de cristal fotónico con índice de refracción 3.5 y red cuadrada, giradas entre sí un ángulo  $\alpha$  y separadas  $8/100 a$ . Ambas láminas son idénticas con espesor  $1/2 a$  y agujeros cilíndricos con radio  $1/5 a$ , donde  $a$  es el parámetro de red.

2. Existen resonancias guiadas que cambian en función del valor que tome  $\alpha$ .
3. Las resonancias guiadas mejor definidas se encuentran a bajas frecuencias y alrededor de  $45^\circ$ , mientras que a altas frecuencias se encuentran muchas resonancias poco definidas que resultan de poco interés para este trabajo. Cerca de  $0.35 c/a$  se encuentran las resonancias más atractivas, pues su factor de calidad aumenta cuando  $\alpha$  se acerca a los  $45^\circ$ . Obsérvese cómo disminuye el ancho  $\delta f$  de estas resonancias.

Dadas estas observaciones, resulta razonable plantear que el diseño de un dispositivo óptico (un filtro configurable, por ejemplo) tenga como objetivo definir las dimensiones del sistema en función de que estas resonancias, al rededor de  $0.35 c/a$ , se encuentren en la zona del espectro electromagnético donde se espera que el dispositivo trabaje. Por ejemplo, si se desea que el dispositivo trabaje al rededor de una longitud de onda  $\lambda_0$ , que sea equivalente a  $f = 0.35 c/a$ , el parámetro de red de las láminas de cristal fotónico deben cumplir  $a = 0.35 \cdot \lambda_0$ .

Ahora bien, si se compara el espectro de transmitancia de este sistema con el espectro de transmitancia de un sistema compuesto por dos láminas dieléctricas uniformes, se obtienen resultados como el expuesto en la figura 6.19(a). Como puede observarse, nuevamente, la transmitancia está compuesta en dos partes: la primera, los máximos y mínimos abruptos que se corresponden con resonancias de fano; y la segunda, el fondo que resulta de la interacción de la luz con la naturaleza uniforme del sistema. En la figura 6.19(b), es posible observar el espectro de transmitancia tras la aplicación de un filtro de realce vertical. El fondo de transmitancia, debido a la respuesta rápida del sistema, impide ubicar a simple vista todas las resonancias de fano del sistema (figura 6.18(b)). Sin embargo, tras la aplicación del kernel

$$K = \begin{pmatrix} 0 & -1/3 & 0 \\ 0 & 2/3 & 0 \\ 0 & -1/3 & 0 \end{pmatrix}, \quad (6.11)$$

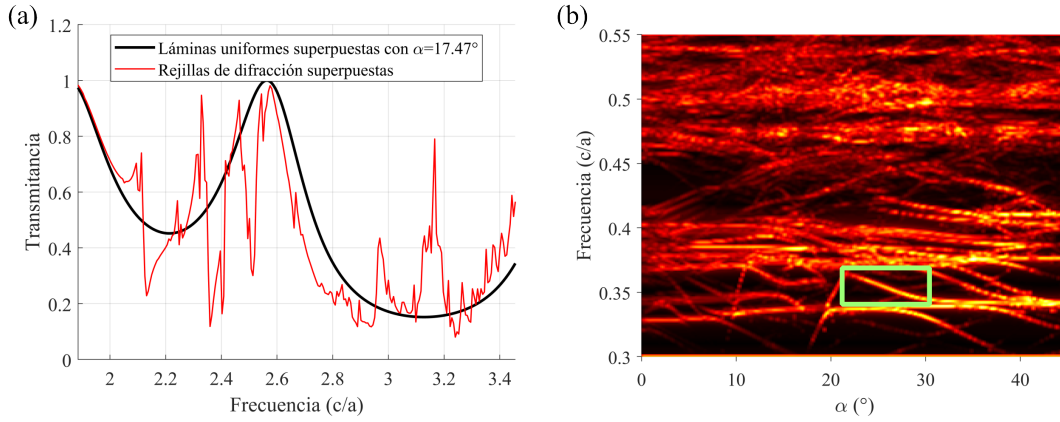


Figura 6.19: (a) Comparación entre el espectro de transmitancia de un sistema bicapa de láminas de cristal fotónico, con índice de refracción de 3.50, giradas entre sí  $17.47^\circ$  y un sistema equivalente de láminas uniformes con índice de refracción de 3.39. (b) Espectro de transmitancia (figura 6.18) tras la convolución con un kernel de realce vertical, se destacan las resonancias guiadas, pues este filtrado se deshace del fondo de transmisión. Se resalta una resonancia guiada cuya frecuencia aparenta una dependencia lineal con el ángulo  $\alpha$ .

se resaltan los cambios verticales, como las resonancias de Fano, y se atenúan los cambios progresivos, como el fondo del espectro de transmitancia. El resultado de este proceso de filtrado permite identificar la alta complejidad de esta estructura pues, tal como puede observarse en la figura 6.19(b), la transmitancia exhibe un alto número de cambios abruptos, que pueden atribuirse a resonancias de Fano y, por lo tanto, a las resonancias guiadas del sistema. Naturalmente, aquellas resonancias de menor intensidad se deben a vectores de onda de la red de Moiré de orden superior, cuyo efecto en la transmitancia es mínimo (figura 6.18(b)) y pueden ser despreciados experimentalmente [51].

Una de las resonancias más llamativa, es aquella que se encuentra señalada en la figura 6.19(b), pues está aislada de otras resonancias y, a simple vista, depende linealmente de  $\alpha$ . Una de las ideas que surge al observar este comportamiento, es aprovecharle para realizar un filtro de frecuencias variable. Sin embargo, el fondo de transmitancia complica este planteamiento, ya que bajo estas condiciones la luz logra transmitirse al rededor de esta resonancia. Afortunadamente, se ha observado que las resonancias guiadas de estos sistemas bilaminares, que dependen del ángulo de giro, inducen una conversión en la polarización de la luz transmitida. Este fenómeno no sucede con el proceso del fondo de transmisión ni en la excitación de modos de fuga de una única capa [79]. Entonces, es posible utilizar un método de *polarización cruzada* para aislar las resonancias de interés. Este procedimiento provoca que las resonancias de Fano se transformen en curvas lorentzianas [51].

En el capítulo 3 se aplicó un filtro en la transformada de Fourier del espectro de transmitancia de una lámina de cristal fotónico para deshacerse de la respuesta lenta del sistema (el fondo de transmitancia) y se encontraron resonancias en forma lorentziana (ver la figura 3.4(b)). Entonces, con el propósito de simular el efecto de la *polarización cruzada* sobre la resonancia señalada en 6.19(b), se aplicó este filtrado, basado en Fourier, sobre algunos cortes del espectro de transmitancia, ver la figura 6.20. En esta última figura se puede evidenciar, nuevamente, la transformación de las resonancias de Fano en curvas lorentzianas.

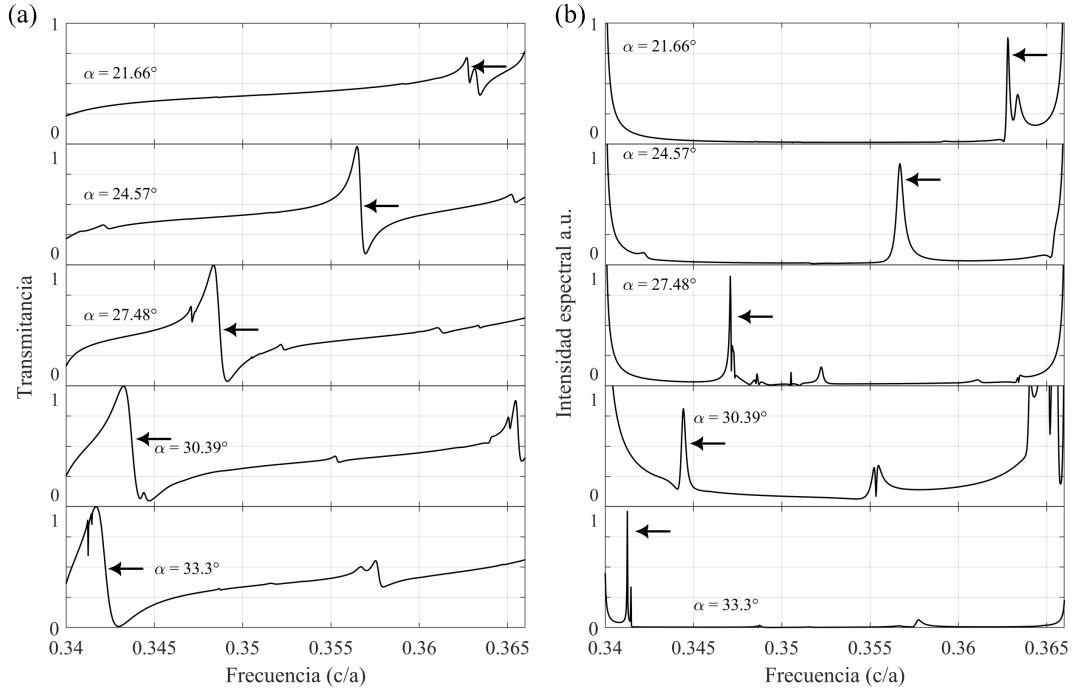


Figura 6.20: (a) Curvas de transmitancia en función de la frecuencia para distintos ángulos  $\alpha$ . se destaca una resonancia de Fano dependiente de  $\alpha$  entre  $0.340\text{ c/a}$  y  $0.365\text{ c/a}$ , ver la figura 6.19(b). Y (b) la transformada de Fourier de la respuesta lenta para cada espectro de transmitancia. Las resonancias de Fano adquieren una forma lorentziana.

| Resonancia guiada   |                        |                         |                        |                        |                        |
|---------------------|------------------------|-------------------------|------------------------|------------------------|------------------------|
| $\alpha (^{\circ})$ | 21.66                  | 22.95                   | 24.25                  | 25.54                  | 26.83                  |
| Frecuencia (c/a)    | $36.28 \times 10^{-2}$ | $36.19 \times 10^{-2}$  | $35.96 \times 10^{-2}$ | $35.76 \times 10^{-2}$ | $35.57 \times 10^{-2}$ |
| Ancho (c/a)         | $1.860 \times 10^{-4}$ | $0.7344 \times 10^{-2}$ | $4.660 \times 10^{-2}$ | $5.723 \times 10^{-2}$ | $6.173 \times 10^{-2}$ |
| Q                   | 1950                   | 4928                    | 772                    | 625                    | 576                    |
| $\alpha (^{\circ})$ | 28.13                  | 29.42                   | 30.71                  | 32.01                  | 33.30                  |
| Frecuencia (c/a)    | $35.30 \times 10^{-2}$ | $35.08 \times 10^{-2}$  | $34.86 \times 10^{-2}$ | $34.69 \times 10^{-2}$ | $34.56 \times 10^{-2}$ |
| Ancho (c/a)         | $8.242 \times 10^{-2}$ | $7.431 \times 10^{-2}$  | $3.007 \times 10^{-2}$ | $9.384 \times 10^{-2}$ | $19.00 \times 10^{-2}$ |
| Q                   | 428                    | 472                     | 159                    | 370                    | 182                    |

Tabla 6.1: Tabla de frecuencias, anchos de banda y factor de calidad de la resonancia guiada seleccionada para cada valor de  $\alpha$  expuesto en la figura 6.21.



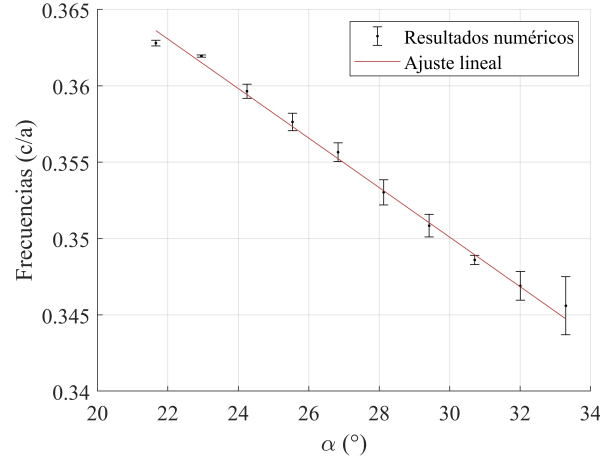


Figura 6.21: Comportamiento del máximo de las curvas de lorentz, señaladas en la figura 6.20(b) en función de  $\alpha$ . Las barras de error representan el ancho a altura media de los picos encontrados. Se observa un comportamiento lineal con un coeficiente de correlación de 0.99.

Ahora bien, en la figura 6.21 se puede observar la tendencia lineal de la frecuencia del modo guiado en función de  $\alpha$ , siguiendo la relación:

$$f_g = -16.22 \times 10^{-4} \cdot \alpha + 39.87 \times 10^{-2} [c/a] \quad (6.12)$$

con un coeficiente de correlación de Pearson de 0.99. Las barras de error en la figura 6.21 indican el ancho del pico y pueden encontrarse en la tabla 6.1 junto con los factores de calidad  $Q$  correspondientes.

En síntesis, se ha encontrado que el espectro de transmitancia de estos sistemas cuasicristalinos exhiben resonancias guiadas dependientes del parámetro geométrico  $\alpha$  y, a pesar de que el fondo de transmisión represente un obstáculo para el aprovechamiento directo de estos modos de fuga, es posible aprovecharse de la conversión de polarización en la luz transmitida para obtener, únicamente, las frecuencias de luz que interactúan con las resonancias del sistema. De esta manera, a partir de los resultados obtenidos tras el análisis de un modo de fuga particular, se puede afirmar que este sistema puede ser aprovechado en la fabricación de un filtro de frecuencias variable con ancho de banda promedio de  $6.62 \times 10^{-4} \pm 2.66 \times 10^{-7} c/a$ , cuya variación en la frecuencia central es lineal con respecto al ángulo entre las láminas del cristal fotónico a través de la relación 6.12.



# 7. Conclusiones y perspectivas

---

## 7.1. Conclusiones

Inicialmente, en este trabajo se realizó una revisión detallada de la literatura y los antecedentes para evaluar las herramientas teóricas y computacionales adecuadas para el modelamiento de estructuras fotónicas con red cuasiperiódica. Si bien el uso del método *FDTD* en conjunto con el enfoque por supercelda fue considerado como la primera opción, se determinó que *RCWA* era más adecuado para el estudio de la estructura de bandas de estos sistemas. A pesar de estar diseñado para el estudio de estructuras cristalinas, una modificación apropiada permite aplicar este método a los sistemas de interés. Además, combinado con la *Espectroscopía resuelta en ángulo*, facilitó la observación de las resonancias guiadas a través del espectro de transmitancia de los distintos sistemas.

Por otra parte, esta selección de herramientas permitió calcular la estructura de bandas en la región superior al cono de luz mediante una elección adecuada del ángulo de incidencia y la longitud de onda en *RCWA*. Además, se validó la precisión del método numérico a través de la comparación de sus predicciones con fenómenos ópticos bien conocidos, obteniendo una alta correlación con resultados teóricos. Asimismo, se logró simular con éxito la estructura de bandas de un espejo de Bragg y las resonancias guiadas de un cristal fotónico bidimensional. Esto permitió observar la evolución de dichas resonancias en función del giro o desplazamiento relativo entre capas de estructuras bilaminas en el punto  $\Gamma$  de la primera zona de Brillouin.

Respecto a la aplicabilidad de estos sistemas cuasicristalinos en dispositivos ópticos con parámetros variables, se evidenció que los modos de fuga dependen del desplazamiento y giro relativo entre las capas. Además, debido a que estos modos se manifiestan en la transmitancia a través de un mecanismo conocido como *Resonancias de Fano*, fue posible aprovechar las fluctuaciones en el espectro de transmisión, para plantear aplicaciones potenciales. En particular, para el sistema compuesto por rejillas de difracción de  $\text{VO}_2$  en fase dieléctrica, se identificó una configuración capaz de reducir la intensidad de la luz transmitida mediante el desplazamiento relativo de las láminas, alcanzando una reducción de hasta un 75.3% de la transmitancia máxima permitida por este sistema, para la longitud de onda de emisión del láser de  $\text{CO}_2$ . De igual manera, entre  $9.6\ \mu\text{m}$  y  $14.0\ \mu\text{m}$ , se halló la posibilidad de ajustar linealmente

el ancho del espectro transmitido mediante dicho desplazamiento, manteniendo la longitud de onda máxima transmitida en  $13.34 \pm 2.7 \times 10^{-3} \mu m$ . Adicionalmente, dada la transición metal-dieléctrico del  $VO_2$ , este sistema también podría ser utilizado como interruptor óptico, ya que para todo desplazamiento relativo entre las láminas, la transmitancia máxima de la estructura en fase metálica es del orden de  $10^{-3}$ . Por otra parte, al analizar un sistema bicapa, compuesto por dos láminas de cristal fotónico bidimensional, cuya red cuasicristalina cambia con el giro relativo entre ambas láminas, se ha encontrado que, en el punto  $\Gamma$ , las resonancias guiadas son altamente dependientes del ángulo de giro. Más aún, se ha encontrado que esta estructura, en conjunto con un método de *polarización cruzada*, puede ser empleada para el filtrado de señales electromagnéticas a través de su frecuencia. Ya que uno de los modos de fuga mejor comportados presenta una dependencia lineal en función del ángulo de giro entre las láminas (ecuación 6.12), y un ancho de banda promedio  $6.62 \times 10^{-4} \pm 2.66 \times 10^{-7} c/a$ .

En síntesis, este trabajo permitió analizar el comportamiento del diagrama de bandas de estructuras fotónicas bicapa, tanto cristalinas como cuasicristalinas, a través de la variación del giro relativo, o desplazamiento, entre ambas láminas. Se evidenció que estos parámetros modifican las resonancia guiadas, lo que impacta directamente la transmitancia de los sistemas. Estos hallazgos confirman que estas estructuras bilaminares poseen propiedades ópticas ajustables, las cuales abren nuevas posibilidades en el diseño de dispositivos ópticos configurables.

## 7.2. Perspectivas

- los resultados obtenidos sugieren que los cuasicristales fotónicos estudiados podrían ser empleados en la fabricación de dispositivos ópticos con parámetros de transmisión ajustables. Sin embargo, futuras investigaciones deberán abordar fenómenos adicionales, como los *Bound States in the Continuum (BICs)*, así como el estudio detallado de la evolución de los modos de fuga a lo largo y ancho de la primera zona de Brillouin en función del giro o desplazamiento. También, sería relevante explorar otros materiales, analizar la dependencia de las resonancias respecto a la separación entre las capas y estudiar la propagación de luz coplanar a la estructura (modos guiados). Además, una cuestión fundamental a resolver en el futuro es: ¿qué sucede cuando las láminas de cristal fotónico superpuestas no son idénticas, variando su periodicidad, tipo de red o material?
- Desde un enfoque teórico, resulta crucial abordar este problema analíticamente, pues esto permitiría contrastar los resultados numéricos y profundizar en la naturaleza de los fenómenos observados.
- A pesar de los desafíos experimentales asociados a la alineación precisa de dos láminas de cristal fotónico, tanto en distancia como en ángulo y desplazamiento relativo, será necesario tener una validación experimental de los resultados obtenidos numéricamente.
- En el diseño de dispositivos ópticos, el uso de métodos como FDTD permitiría estudiar el comportamiento de la luz en sistemas finitos, así como analizar otros factores relevantes en aplicaciones prácticas. Por ejemplo, en caso de utilizar materiales con coeficiente de absorción distinto de cero, este método podría emplearse para explorar los efectos de la expansión térmica, inducida por la absorción de luz, y su impacto en la forma de las láminas y, por lo tanto, en la eficiencia de los filtros y otros dispositivos basados en estas estructuras cuasicristalinas.

- Finalmente, aunque *RCWA* está diseñado para sistemas periódicos y cuasiperiódicos, con algunas modificaciones. Es posible explorar fenómenos más simples con este método, como la ley de Snell, el ángulo de Brewster, reflexión total interna, y la superposición de ondas. Entonces, incluir este método como parte de la formación académica de estudiantes podría ser beneficioso para fortalecer sus habilidades en métodos numéricos, óptica, análisis espectral y procesamiento de señales.

# A. Láminas uniformes

---

Tal como se explicó en la sección 3.2, en primera instancia, la luz "observa" la estructura general de la lámina de cristal fotónico y, posteriormente, interactúa con su red periódica. Esto se evidencia al observar el espectro de la lámina de cristal fotónico, ver la figura 3.3. Por esta razón es importante conocer cómo se comporta la luz al incidir sobre una lámina dieléctrica uniforme.

## A.1. Lámina dieléctrica uniforme suspendida en el vacío

Este sistema está constituido por una única capa homogénea insertada entre dos medios semi-infinitos, figura A.1. Suponiendo que ambos medios tienen el mismo índice de refracción, se puede asegurar que el índice de refracción se comporta de la siguiente manera:

$$n(\mathbf{r}) = n(z) = \begin{cases} n_0, & \text{si } z < 0, \\ n_1, & \text{si } 0 < z < d, \\ n_0, & \text{si } z > d, \end{cases} \quad (\text{A.1})$$

donde  $n_0$  es el índice de refracción de los medios adyacentes a la lámina uniforme de espesor  $d$  e índice de refracción  $n_1$ . Nótese que el índice de refracción depende únicamente de la coordenada  $z$ , pues el sistema es homogéneo en las direcciones  $x$  e  $y$ .

A partir de las ecuaciones de Maxwell 2.8, en ausencia de cargas y de corrientes, se encuentra la ecuación de onda para el campo eléctrico,

$$\nabla^2 \mathbf{E} = \mu_0 \epsilon_0 \epsilon(z) \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2}. \quad (\text{A.2})$$

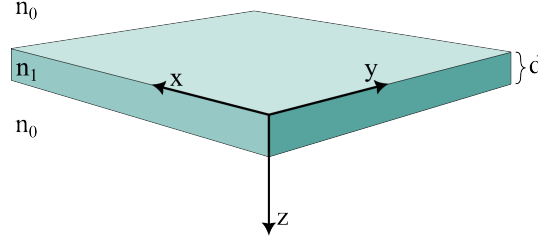


Figura A.1: Diagrama de una capa homogénea, con índice de refracción  $n_1$  y espesor  $d$ , suspendida entre dos medios semi-infinitos con índice de refracción  $n_0$ .

Suponiendo una onda electromagnética plana, cuyo vector de onda está contenido en el plano  $xz$ , la solución general de la ecuación de onda será homogénea en la dirección  $y$ , y puede ser escrita como [75]:

$$\mathbf{E}(x, z) = \mathbf{E}(z)e^{i(\omega t - \beta x)} \quad (\text{A.3})$$

donde  $\beta$  es la componente en  $x$  del vector de onda. Debido a la simetría traslacional del sistema sobre el plano  $xy$ , es posible seleccionar cualquier otro plano de incidencia. Sin embargo, se decide usar el plano  $xz$  por conveniencia.

De esta forma, suponiendo que la onda plana incide desde la parte superior de la figura A.1 y tiene una polarización  $s$  (perpendicular al plano de incidencia), el vector de campo eléctrico  $\mathbf{E}(z)$  toma la forma

$$\mathbf{E}(z) = \mathbf{y} \begin{cases} Ae^{-ik_{1z}z} + Be^{-ik_{1z}z}, & \text{si } z < 0, \\ Ce^{-ik_{2z}z} + De^{-ik_{2z}z}, & \text{si } 0 < z < d, \\ Fe^{-ik_{3z}(z-d)}, & \text{si } z > d, \end{cases} \quad (\text{A.4})$$

donde  $k_{iz} = (\omega/c)n_i \cos \theta_i$  la componente en  $z$  del vector de onda.  $\theta_i$  es el ángulo que se forma entre el vector de onda y el eje  $z$ . Imponiendo la condición de continuidad en las interfaces  $z = 0$  y  $z = d$ , se obtiene el siguiente sistema de ecuaciones

$$A + B = C + D, \quad (\text{A.5})$$

$$k_{1z}(A - B) = k_{2z}(C - D), \quad (\text{A.6})$$

$$Ce^{-ik_{2z}d} + De^{-ik_{2z}d} = F, \quad (\text{A.7})$$

$$k_{2z}(Ce^{-ik_{2z}d} - De^{-ik_{2z}d}) = k_{3z}F. \quad (\text{A.8})$$

Entonces, es posible solucionar  $B$  y  $F$  en términos de  $A$ .

$$F = A \frac{4k_{1z}k_{2z}e^{-ik_{2z}d}}{(k_{1z} + k_{2z})(k_{2z} + k_{3z}) + (k_{1z} - k_{2z})(k_{2z} - k_{3z})e^{-2ik_{2z}d}}, \quad (\text{A.9})$$

y

$$B = A \frac{(k_{1z} - k_{2z})(k_{2z} + k_{3z}) + (k_{1z} + k_{2z})(k_{2z} - k_{3z})}{(k_{1z} + k_{2z})(k_{2z} + k_{3z}) + (k_{1z} - k_{2z})(k_{2z} - k_{3z})e^{-2ik_{2z}d}}. \quad (\text{A.10})$$

Por lo tanto, para la polarización  $s$ , la transmitancia y la reflectancia de una lámina uniforme se escriben

$$T = \left| \frac{F}{A} \right|^2 = \left| \frac{\frac{2k_{1z}}{k_{1z}+k_{2z}} \cdot \frac{2k_{2z}}{k_{2z}+k_{3z}} e^{-ik_{2z}d}}{1 + \frac{k_{1z}-k_{2z}}{k_{1z}+k_{2z}} \cdot \frac{k_{2z}-k_{3z}}{k_{2z}+k_{3z}} e^{-2ik_{2z}d}} \right|^2, \quad (\text{A.11})$$

y

$$R = \left| \frac{F}{A} \right|^2 = \left| \frac{\frac{k_{1z}-k_{2z}}{k_{1z}+k_{2z}} + \frac{k_{2z}-k_{3z}}{k_{2z}+k_{3z}} e^{-2ik_{2z}d}}{1 + \frac{k_{1z}-k_{2z}}{k_{1z}+k_{2z}} \cdot \frac{k_{2z}-k_{3z}}{k_{2z}+k_{3z}} e^{-2ik_{2z}d}} \right|^2, \quad (\text{A.12})$$

respectivamente. En este punto, es importante comparar el espectro transmitancia de una lámina de cristal fotónico con estos resultados.

A este comportamiento en la transmitancia de una lámina de cristal fotónico, similar al de una lámina homogénea, se le conoce como el fondo del espectro de transmitancia. Y será observado en todos los espectros de transmitancia de láminas de cristal fotónico.

## A.2. Sistema bicapa de láminas uniformes

Las estructuras de Moiré descritas en el capítulo 4, y las trabajadas durante este documento, son estructuras compuestas por dos láminas de cristal fotónico. Por lo tanto, es previsible que el fondo del espectro de transmitancia de estas estructuras sea similar al espectro de transmitancia de un sistema bicapa de láminas uniformes (ver figura ??), tal como sucede con las láminas de cristal fotónico.

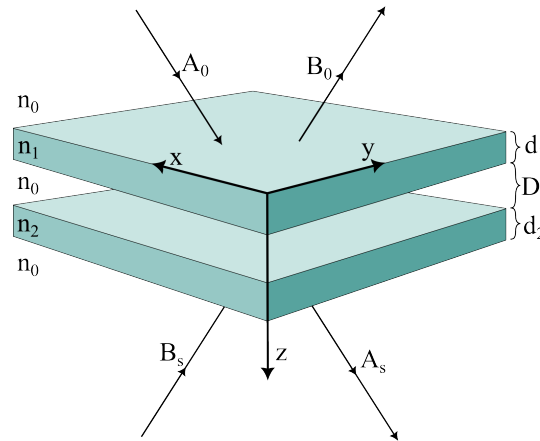


Figura A.2: Diagrama de un sistema bicapa de láminas homogéneas suspendidas en un medio con índice de refracción  $n_0$ . Las láminas tienen un índice de refracción  $n_1$  y  $n_2$ , con espesores  $d_1$  y  $d_2$ , respectivamente, y están separadas por una distancia  $D$ . Las amplitudes de las ondas planas que inciden hacia la estructura son  $A_0$  y  $B_s$ , y la amplitud de las ondas planas que salen de la estructura son  $A_s$  y  $B_0$ .

En este caso, el índice de refracción se comporta de la siguiente manera:

$$n(\mathbf{r}) = n(z) = \begin{cases} n_0, & \text{si } z < 0, \\ n_1, & \text{si } 0 < z < d_1, \\ n_0, & \text{si } d_1 < z < d_1 + D, \\ n_2, & \text{si } d_1 + D < z < d_1 + d_2 + D, \\ n_0, & \text{si } z > d_1 + d_2 + D, \end{cases} \quad (\text{A.13})$$

Si bien, es posible encontrar los espectros de transmitancia y reflectancia aplicando un razonamiento equivalente al utilizado en la sección anterior, el procedimiento sería muy tedioso. Por lo tanto, se recurrió a una formulación matricial del problema. En general, es posible describir este tipo de sistemas, compuestos por capas uniformes, a través de [75]:

$$\begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} A_s \\ B_s \end{pmatrix}, \quad (\text{A.14})$$

Donde  $A_0$  y  $B_s$  son las amplitudes de las ondas electromagnéticas planas que inciden sobre la estructura,  $A_s$  y  $B_0$  son las amplitudes de las ondas electromagnéticas planas que salen de la estructura, y  $M$  es una matriz  $2 \times 2$ . Dependiendo del orden de las capas, la matriz  $M$  se escribe como una multiplicación de las matrices

$$D_{ij} = \frac{1}{t_{ij}} \begin{pmatrix} 1 & r_{ij} \\ r_{ij} & 1 \end{pmatrix}, \quad (\text{A.15})$$

y

$$P_i(d_i) = \begin{pmatrix} e^{k_{iz}d_i} & 0 \\ 0 & e^{-k_{iz}d_i} \end{pmatrix}, \quad (\text{A.16})$$

donde  $k_{iz} = n_i \omega \cos \theta_i / c$ ,

$$r_{ij} = \begin{cases} \frac{k_{iz} - k_{jz}}{k_{iz} + k_{jz}}, & \text{para polarización } s, \\ \frac{n_i^2 k_{jz} - n_j^2 k_{iz}}{n_i^2 k_{jz} + n_j^2 k_{iz}}, & \text{para polarización } p, \end{cases} \quad (\text{A.17})$$

y

$$t_{ij} = \begin{cases} \frac{2k_{iz}}{k_{iz} + k_{jz}}, & \text{para polarización } s, \\ \frac{2n_i^2 k_{jz}}{n_i^2 k_{jz} + n_j^2 k_{iz}}, & \text{para polarización } p. \end{cases} \quad (\text{A.18})$$

En este caso, la matriz  $M$  se escribe

$$M = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} = D_{01} P_1(d_1) D_{10} P_0(D) D_{02} P_2(d_2) D_{10}. \quad (\text{A.19})$$

Suponiendo que la luz incide, únicamente, desde la parte superior,  $B_s$  debe ser igual a cero. Entonces, es posible calcular la transmitancia y la reflectancia a través de

$$T = \left| \frac{A_s}{A_0} \right|^2 = \left| \frac{1}{M_{11}} \right|^2 \quad (\text{A.20})$$

y

$$R = \left| \frac{B_0}{A_0} \right|^2 = \left| \frac{B_0}{A_s M_{11}} \right|^2 = \left| \frac{M_{21}}{M_{11}} \right|^2 \quad (\text{A.21})$$

respectivamente.



## B. Certificados de Participación

---

A continuación se incluyen los certificados de participación en el *Primer Encuentro Internacional de Investigación y Enseñanzas de las Ciencias Naturales y Exactas* y el *XVIII Encuentro Nacional de Óptica y La Conferencia Andina y del Caribe en Óptica y sus Aplicaciones*.



Figura B.1: Certificado de participación del *Primer Encuentro Internacional de Investigación y Enseñanzas de las Ciencias Naturales y Exactas*.



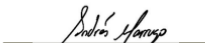
### CERTIFICATE OF ORAL PRESENTATION

The authors:

**Calderon, Juan F; Galíndez, Carlos**

have participated in the XVIII National Meeting on Optics and the IX Andean and Caribbean Conference on Optics and its Applications that took place in Cartagena de Indias, Colombia from June 12-14, 2024, with the presentation titled:

***Optical Characterization of Moiré Photonic Crystals Using the RCWA Method***

  
Andrés G. Marrugo Hernandez  
General Chair

OPTICA



Figura B.2: Certificado de participación del XVIII Encuentro Nacional de Óptica y La Conferencia Andina y del Caribe en Óptica y sus Aplicaciones.

## Referencias

- [1] M. Notomi, H. Suzuki, T. Tamamura, and K. Edagawa, “Lasing action due to the two-dimensional quasiperiodicity of photonic quasicrystals with a penrose lattice,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 92, p. 123906, Mar 2004.
- [2] P. N. Dyachenko, V. S. Pavelyev, and V. A. Soifer, “Graded photonic quasicrystals,” *Opt. Lett.*, vol. 37, pp. 2178–2180, Jun 2012.
- [3] T. D. Nguyen, A. Nahata, and Z. V. Vardeny, “Measurement of surface plasmon correlation length differences using fibonacci deterministic hole arrays,” *Opt. Express*, vol. 20, pp. 15222–15231, Jul 2012.
- [4] Y. S. Chan, C. T. Chan, and Z. Y. Liu, “Photonic Band Gaps in Two Dimensional Photonic Quasicrystals,” *Physical Review Letters*, vol. 80, pp. 956–959, Feb. 1998.
- [5] H. Tang, F. Du, S. Carr, C. DeVault, O. Mello, and E. Mazur, “Modeling the optical properties of twisted bilayer photonic crystals,” *Light: Science & Applications*, vol. 10, p. 157, July 2021.
- [6] D. E. Aspnes, S. M. Kelso, R. A. Logan, and R. Bhat, “Optical properties of  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ ,” *J. Appl. Phys.*, vol. 60, pp. 754–767, July 1986.
- [7] C. Wan, Z. Zhang, D. Woolf, C. M. Hessel, J. Rensberg, J. M. Hensley, Y. Xiao, A. Shahsafi, J. Salman, S. Richter, Y. Sun, M. M. Qazilbash, R. Schmidt-Grund, C. Ronning, S. Ramanathan, and M. A. Kats, “On the Optical Properties of Thin-Film Vanadium Dioxide from the Visible to the Far Infrared,” *Annalen der Physik*, vol. 531, p. 1900188, Oct. 2019.
- [8] C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*. Wiley, 8 ed., 2004.
- [9] H. Ibach and H. Lüth, *Solid-State Physics: An Introduction to Principles of Materials Science*. Advanced texts in physics, Springer Berlin Heidelberg, 2009.
- [10] W. Cao, H. Bu, M. Vinet, M. Cao, S. Takagi, S. Hwang, T. Ghani, and K. Banerjee, “The future transistors,” *Nature*, vol. 620, pp. 501–515, Aug 2023.
- [11] M. Tan, Y. Wang, K. X. Wang, Y. Yu, and X. Zhang, “Circuit-level convergence of electronics and photonics: basic concepts and recent advances,” *Front. Optoelectron.*, vol. 15, p. 16, Apr. 2022.
- [12] N. Margalit, C. Xiang, S. M. Bowers, A. Bjorlin, R. Blum, and J. E. Bowers, “Perspective on the future of silicon photonics and electronics,” *Applied Physics Letters*, vol. 118, p. 220501, 06 2021.

- [13] T. Robin, B. d’Humières, and J. Cochard, “An overview of global and european photonics markets and industry,” *PhotonicsViews*, vol. 19, pp. 68–71, Apr. 2022.
- [14] P. J. Winzer, D. T. Neilson, and A. R. Chraplyvy, “Fiber-optic transmission and networking: the previous 20 and the next 20 years,” *Opt. Express*, vol. 26, pp. 24190–24239, Sep 2018.
- [15] M. Ochoa, J. F. Algorri, P. Roldán-Varona, L. Rodríguez-Cobo, and J. M. López-Higuera, “Recent advances in biomedical photonic sensors: A focus on optical-fibre-based sensing,” *Sensors (Basel)*, vol. 21, p. 6469, Sept. 2021.
- [16] H. Miyan, R. Aghahari, S. K. Gowre, M. Mahto, and P. K. Jain, “Computational study of a compact and high sensitive photonic crystal for cancer cells detection,” *IEEE Sensors Journal*, vol. 22, no. 4, pp. 3298–3305, 2022.
- [17] J. D. Joannopoulos, S. G. Johnson, J. N. Winn, and R. D. Meade, *Photonic Crystals: Molding the Flow of Light (Second Edition)*. Princeton University Press, 2 ed., 2008.
- [18] J. Joannopoulos, P. R. Villeneuve, and S. Fan, “Photonic crystals,” *Solid State Communications*, vol. 102, no. 2, pp. 165–173, 1997. Highlights in Condensed Matter Physics and Materials Science.
- [19] T. F. Krauss, R. M. D. L. Rue, and S. Brand, “Two-dimensional photonic-bandgap structures operating at near-infrared wavelengths,” *Nature*, vol. 383, pp. 699–702, Oct. 1996.
- [20] C. C. Cheng and A. Scherer, “Fabrication of photonic band-gap crystals,” *Journal of Vacuum Science & Technology B: Microelectronics and Nanometer Structures Processing, Measurement, and Phenomena*, vol. 13, pp. 2696–2700, 11 1995.
- [21] M. E. Rahaman, M. M. Hossain, H. S. Mondal, R. Saha, and A. S. Muntaseer, “Theoretical analysis of large negative dispersion photonic crystal fiber with small confinement loss,” *Appl. Opt.*, vol. 59, pp. 8925–8931, Oct 2020.
- [22] S. Hu and S. M. Weiss, “Design of photonic crystal cavities for extreme light concentration,” *ACS Photonics*, vol. 3, pp. 1647–1653, Sept. 2016.
- [23] P. Lalanne, C. Sauvan, and J. P. Hugonin, “Photon confinement in photonic crystal nanocavities,” *Laser Photon. Rev.*, vol. 2, pp. 514–526, Dec. 2008.
- [24] L. Vertchenko, C. DeVault, R. Malureanu, E. Mazur, and A. Lavrinenko, “Near-zero index photonic crystals with directive bound states in the continuum,” *Laser Photon. Rev.*, vol. 15, p. 2000559, July 2021.
- [25] S. I. Azzam and A. V. Kildishev, “Photonic bound states in the continuum: From basics to applications,” *Adv. Opt. Mater.*, vol. 9, p. 2001469, Jan. 2021.
- [26] Y. C. Lin, C. H. Tsou, and W. J. Hsueh, “Ultra-slow light in one-dimensional cantor photonic crystals,” *Opt. Lett.*, vol. 43, pp. 4120–4123, Sep 2018.
- [27] T. Daghooghi, M. Soroosh, and K. Ansari-Asl, “Slow light in ultracompact photonic crystal decoder,” *Appl. Opt.*, vol. 58, pp. 2050–2057, Mar 2019.
- [28] M. K. Moghaddam and R. Fleury, “Slow light engineering in resonant photonic crystal line-defect waveguides,” *Opt. Express*, vol. 27, pp. 26229–26238, Sep 2019.

- [29] T. Li, G. Liu, H. Kong, G. Yang, G. Wei, and X. Zhou, “Recent advances in photonic crystal-based sensors,” *Coordination Chemistry Reviews*, vol. 475, p. 214909, 2023.
- [30] S. Khonina, N. Kazanskiy, A. Butt, and S. Karpeev, “Optical multiplexing techniques and their marriage for on-chip and optical fiber communication: a review,” *Opto-Electronic Advances*, vol. 5, p. 210127, 07 2022.
- [31] S. Masilamani and S. Punniakodi, “Photonic crystal ring resonator based optical MUX/DEMUX design structures: a survey and comparison study,” *J. Opt.*, vol. 49, pp. 168–177, June 2020.
- [32] J. Liu, M. Yao, and L. Shen, “Third generation photovoltaic cells based on photonic crystals,” *J. Mater. Chem. C*, vol. 7, pp. 3121–3145, 2019.
- [33] N. Fatehi, S. Olyaei, M. Seifouri, and F. Parandin, “Design of a high-efficiency perovskite solar cell based on photonic crystal in the absorption layer,” *Opt. Quantum Electron.*, vol. 56, Mar. 2024.
- [34] C. Yuan, Y. Yang, L. Huang, and Y. Xiao, “Integrating low-stack photonic crystals with the honeycomb-like structural framework to enhance the photovoltaic performance in perovskite solar cells,” *ACS Omega*, vol. 9, pp. 9720–9727, Feb. 2024.
- [35] S. G. Johnson, S. Fan, P. R. Villeneuve, J. D. Joannopoulos, and L. A. Kolodziejski, “Guided modes in photonic crystal slabs,” *Physical Review B*, vol. 60, pp. 5751–5758, Aug. 1999.
- [36] S. Fan and J. D. Joannopoulos, “Analysis of guided resonances in photonic crystal slabs,” *Physical Review B*, vol. 65, p. 235112, June 2002.
- [37] C. Blanchard, J.-P. Hugonin, and C. Sauvan, “Fano resonances in photonic crystal slabs near optical bound states in the continuum,” *Physical Review B*, vol. 94, p. 155303, Oct. 2016.
- [38] S. Chalimah, Y. Yao, N. Ikeda, K. Kaneko, R. Hashimoto, T. Kakuno, S. Saito, T. Kuroda, Y. Sugimoto, and K. Sakoda, “Midinfrared Dispersion Relations in In P -Based Photonic Crystal Slabs Revealed by Fourier-Transform Angle-Resolved Reflection Spectroscopy,” *Physical Review Applied*, vol. 15, p. 064076, June 2021.
- [39] S. Zanotto, G. Biasiol, L. Sorba, and A. Tredicucci, “Photonic bands and defect modes in metallo-dielectric photonic crystal slabs,” *Journal of the Optical Society of America B*, vol. 31, p. 1451, July 2014.
- [40] M. Galli, M. Agio, L. C. Andreani, M. Belotti, G. Guizzetti, F. Marabelli, M. Patrini, P. Bettotti, L. Dal Negro, Z. Gaburro, L. Pavesi, A. Lui, and P. Bellutti, “Spectroscopy of photonic bands in macroporous silicon photonic crystals,” *Physical Review B*, vol. 65, p. 113111, Mar. 2002.
- [41] L. Ondič, O. Babchenko, M. Varga, A. Kromka, J. Čtyroký, and I. Pelant, “Diamond photonic crystal slab: Leaky modes and modified photoluminescence emission of surface-deposited quantum dots,” *Scientific Reports*, vol. 2, p. 914, Dec. 2012.
- [42] A. Y. Song, A. R. K. Kalapala, W. Zhou, and S. Fan, “First-Principles Threshold Calculation of Photonic Crystal Surface-Emitting Lasers Using Rigorous Coupled Wave

- Analysis,” *Applied Physics Letters*, vol. 113, p. 041106, July 2018. arXiv:1806.07997 [physics].
- [43] R. Yukino, P. K. Sahoo, J. Sharma, T. Takamura, J. Joseph, and A. Sandhu, “Wide wavelength range tunable one-dimensional silicon nitride nano-grating guided mode resonance filter based on azimuthal rotation,” *AIP Advances*, vol. 7, p. 015313, 01 2017.
- [44] B. Lou, B. Wang, J. A. Rodríguez, M. Cappelli, and S. Fan, “Tunable guided resonance in twisted bilayer photonic crystal,” *Science Advances*, vol. 8, p. eadd4339, Dec. 2022.
- [45] R. Magnusson and M. Shokooh-Saremi, “Widely tunable guided-mode resonance nano-electromechanical rgb pixels,” *Opt. Express*, vol. 15, pp. 10903–10910, Aug 2007.
- [46] D. W. Dobbs and B. T. Cunningham, “Optically tunable guided-mode resonance filter,” *Appl. Opt.*, vol. 45, pp. 7286–7293, Oct 2006.
- [47] H.-S. Lee, J. Y. Kwak, T.-Y. Seong, G. W. Hwang, W. M. Kim, I. Kim, and K.-S. Lee, “Optimization of tunable guided-mode resonance filter based on refractive index modulation of graphene,” *Sci. Rep.*, vol. 9, p. 19951, Dec. 2019.
- [48] X. Ni, Y. Liu, B. Lou, M. Zhang, E. L. Hu, S. Fan, E. Mazur, and H. Tang, “Three-dimensional reconfigurable optical singularities in bilayer photonic crystals,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 132, p. 073804, Feb 2024.
- [49] B. Lou, N. Zhao, M. Minkov, C. Guo, M. Orenstein, and S. Fan, “Theory for Twisted Bilayer Photonic Crystal Slabs,” *Physical Review Letters*, vol. 126, p. 136101, Mar. 2021.
- [50] D. X. Nguyen, X. Letartre, E. Drouard, P. Viktorovitch, H. C. Nguyen, and H. S. Nguyen, “Magic configurations in moiré superlattice of bilayer photonic crystals: Almost-perfect flatbands and unconventional localization,” *Physical Review Research*, vol. 4, p. L032031, Aug. 2022. Publisher: American Physical Society.
- [51] H. Tang, B. Lou, F. Du, M. Zhang, X. Ni, W. Xu, R. Jin, S. Fan, and E. Mazur, “Experimental probe of twist angle-dependent band structure of on-chip optical bilayer photonic crystal,” *Science Advances*, vol. 9, p. eadh8498, July 2023.
- [52] T. Zhang, K. Dong, J. Li, F. Meng, J. Li, S. Munagavalasa, C. P. Grigoropoulos, J. Wu, and J. Yao, “Twisted moiré photonic crystal enabled optical vortex generation through bound states in the continuum,” *Nature Communications*, vol. 14, p. 6014, Sept. 2023. Number: 1 Publisher: Nature Publishing Group.
- [53] K. Dong, T. Zhang, J. Li, Q. Wang, F. Yang, Y. Rho, D. Wang, C. P. Grigoropoulos, J. Wu, and J. Yao, “Flat Bands in Magic-Angle Bilayer Photonic Crystals at Small Twists,” *Physical Review Letters*, vol. 126, p. 223601, June 2021. Publisher: American Physical Society.
- [54] B. Lou, H. Tang, F. Du, G. Gao, E. Mazur, and S. Fan, “Free-Space Beam Steering with Twisted Bilayer Photonic Crystal Slabs,” *ACS Photonics*, vol. 11, pp. 3636–3643, Sept. 2024.
- [55] V. Liu and S. Fan, “S4 : A free electromagnetic solver for layered periodic structures,” *Computer Physics Communications*, vol. 183, pp. 2233–2244, Oct. 2012.
- [56] D. J. Griffiths, *Introduction to electrodynamics*. Pearson, 4 ed., 2013.

- [57] K. Sakoda, *Optical Properties of Photonic Crystals*. Springer Series in Optical Sciences, Springer Berlin Heidelberg, 2013.
- [58] S. Fan, P. R. Villeneuve, J. D. Joannopoulos, and E. F. Schubert, “High extraction efficiency of spontaneous emission from slabs of photonic crystals,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 78, pp. 3294–3297, Apr 1997.
- [59] X. Lu, A. McClung, and K. Srinivasan, “High-q slow light and its localization in a photonic crystal microring,” *Nature Photonics*, vol. 16, pp. 66–71, Jan 2022.
- [60] M. P. C. Taverne, Y.-L. D. Ho, X. Zheng, L. Chen, C.-H. N. Fang, and J. Rarity, “Strong light confinement in rod-connected diamond photonic crystals,” *Opt. Lett.*, vol. 43, pp. 5202–5205, Nov 2018.
- [61] K. Üstün and H. Kurt, “Ultra slow light achievement in photonic crystals by merging coupled cavities with waveguides,” *Opt. Express*, vol. 18, pp. 21155–21161, Sep 2010.
- [62] H. Kosaka, T. Kawashima, A. Tomita, M. Notomi, T. Tamamura, T. Sato, and S. Kawakami, “Superprism phenomena in photonic crystals,” *Phys. Rev. B*, vol. 58, pp. R10096–R10099, Oct 1998.
- [63] E. C. V. Boas, J. A. P. Ribeiro, F. A. P. de Figueiredo, and J. R. Mejía-Salazar, “3-d-printed all-dielectric corner-like bragg reflector for antenna gain enhancement,” *IEEE Antennas and Wireless Propagation Letters*, vol. 23, no. 2, pp. 558–562, 2024.
- [64] M. Skorobogatiy, *Resonant Biochemical Sensors Based on Photonic Bandgap Waveguides and Fibers*, pp. 43–72. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2010.
- [65] E. Hecht, *Optics*. Pearson Education, Incorporated, 2017.
- [66] A. U. Rehman, Y. Khan, M. Irfan, M. A. Butt, S. N. Khonina, and N. L. Kazanskiy, “A novel design of optical switch based on guided mode resonances in dielectric photonic crystal structures,” *Photonics*, vol. 9, no. 8, 2022.
- [67] L. P. Caballero, M. L. Povinelli, J. C. Ramirez, P. S. S. G. aes, and O. P. V. Neto, “Photonic crystal integrated logic gates and circuits,” *Opt. Express*, vol. 30, pp. 1976–1993, Jan 2022.
- [68] T. Guo, J. Evans, N. Wang, Y. Jin, J. He, and Y. Sun, “Guided mode resonance in a low-index waveguide layer,” *Applied Sciences*, vol. 11, no. 8, 2021.
- [69] J.-M. Yang, N.-Z. Yang, C.-H. Chen, and C.-S. Huang, “Gradient waveguide thickness guided-mode resonance biosensor,” *Sensors*, vol. 21, no. 2, 2021.
- [70] T. He, Y. Meng, Z. Liu, F. Hu, R. Wang, D. Li, P. Yan, Q. Liu, M. Gong, and Q. Xiao, “Guided mode meta-optics: metasurface-dressed waveguides for arbitrary mode couplers and on-chip oam emitters with a configurable topological charge,” *Opt. Express*, vol. 29, pp. 39406–39418, Nov 2021.
- [71] T. Abir, M. Tal, and T. Ellenbogen, “Second-harmonic enhancement from a nonlinear plasmonic metasurface coupled to an optical waveguide,” *Nano Letters*, vol. 22, pp. 2712–2717, Apr 2022.
- [72] A. Y. Song, P. B. Catrysse, and S. Fan, “Broadband control of topological nodes in electromagnetic fields,” *Physical review letters*, vol. 120, no. 19, p. 193903, 2018.

- [73] M. G. Moharam and T. K. Gaylord, “Rigorous coupled-wave analysis of planar-grating diffraction,” *Journal of the Optical Society of America*, vol. 71, p. 811, July 1981.
- [74] R. Gabel and R. Roberts, *Senales y sistemas lineales*. Limusa, 1975.
- [75] P. Yeh, *Optical Waves in Layered Media*. Wiley Series in Pure and Applied Optics, Wiley, 2005.
- [76] A. Atvars, “Analytical description of resonances in fabry–perot and whispering gallery mode resonators,” *J. Opt. Soc. Am. B*, vol. 38, pp. 3116–3129, Oct 2021.
- [77] S. Zanotti, M. Minkov, D. Nigro, D. Gerace, S. Fan, and L. C. Andreani, “Legume: A free implementation of the guided-mode expansion method for photonic crystal slabs,” *Computer Physics Communications*, vol. 304, p. 109286, 2024.
- [78] R. Newton, *Scattering Theory of Waves and Particles*. Springer Berlin, Heidelberg, 2 ed., 2013.
- [79] B. Lou and S. Fan, “RCWA4D: Electromagnetic solver for layered structures with incommensurate periodicities,” *Computer Physics Communications*, vol. 306, p. 109356, Jan. 2025. Publisher: Elsevier BV.
- [80] Z. Zhu and C. Zheng, “Differentiable scattering matrix for optimization of photonic structures,” *Optics Express*, vol. 28, p. 37773, Dec. 2020.
- [81] L. Botten, N. Nicorovici, R. McPhedran, C. Sterke, and A. Asatryan, “Photonic band structure calculations using scattering matrices,” *Physical Review E*, vol. 64, p. 046603, Sept. 2001.
- [82] Y. Yang, C. Peng, Y. Liang, Z. Li, and S. Noda, “Analytical perspective for bound states in the continuum in photonic crystal slabs,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 113, p. 037401, Jul 2014.
- [83] D. C. Marinica, A. G. Borisov, and S. V. Shabanov, “Bound states in the continuum in photonics,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 100, p. 183902, May 2008.
- [84] E. N. Bulgakov and A. F. Sadreev, “Bound states in the continuum in photonic waveguides inspired by defects,” *Phys. Rev. B*, vol. 78, p. 075105, Aug 2008.
- [85] S. Romano, A. Lamberti, M. Masullo, E. Penzo, S. Cabrini, I. Rendina, and V. Mocella, “Optical biosensors based on photonic crystals supporting bound states in the continuum,” *Materials*, vol. 11, no. 4, 2018.
- [86] A. Dhibi, A. Al Abiad, A. Abassi, R. Rabhi, L. Barhoumi, N. Felidj, and N. Djaker, “Plasmonic and photonic refractive index biosensor based on bound states in the continuum,” *Physica Scripta*, vol. 99, p. 105520, sep 2024.
- [87] K. Koshelev, Y. Tang, K. Li, D.-Y. Choi, G. Li, and Y. Kivshar, “Nonlinear metasurfaces governed by bound states in the continuum,” *ACS Photonics*, vol. 6, pp. 1639–1644, Jul 2019.
- [88] A. P. Anthur, H. Zhang, R. Paniagua-Dominguez, D. A. Kalashnikov, S. T. Ha, T. W. W. Maß, A. I. Kuznetsov, and L. Krivitsky, “Continuous wave second harmonic generation enabled by quasi-bound-states in the continuum on gallium phosphide metasurfaces,” *Nano Letters*, vol. 20, pp. 8745–8751, Dec 2020.



- [89] G. Zograf, K. Koshelev, A. Zalogina, V. Korolev, R. Hollinger, D.-Y. Choi, M. Zuerch, C. Spielmann, B. Luther-Davies, D. Kartashov, S. V. Makarov, S. S. Kruk, and Y. Kivshar, “High-harmonic generation from resonant dielectric metasurfaces empowered by bound states in the continuum,” *ACS Photonics*, vol. 9, pp. 567–574, Feb 2022.
- [90] M.-S. Hwang, H.-C. Lee, K.-H. Kim, K.-Y. Jeong, S.-H. Kwon, K. Koshelev, Y. Kivshar, and H.-G. Park, “Ultralow-threshold laser using super-bound states in the continuum,” *Nature Communications*, vol. 12, p. 4135, Jul 2021.
- [91] A. Kodigala, T. Lepetit, Q. Gu, B. Bahari, Y. Fainman, and B. Kanté, “Lasing action from photonic bound states in continuum,” *Nature*, vol. 541, pp. 196–199, Jan 2017.
- [92] E. N. Bulgakov and A. F. Sadreev, “Robust bound state in the continuum in a nonlinear microcavity embedded in a photonic crystal waveguide,” *Opt. Lett.*, vol. 39, pp. 5212–5215, Sep 2014.
- [93] Y. Chen, W. Chen, X. Kong, D. Wu, J. Chu, and C.-W. Qiu, “Can weak chirality induce strong coupling between resonant states?,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 128, p. 146102, Apr 2022.
- [94] Y. Zhang, Z. Che, W. Liu, J. Wang, M. Zhao, F. Guan, X. Liu, L. Shi, and J. Zi, “Unfolded band structures of photonic quasicrystals and moiré superlattices,” *Physical Review B*, vol. 105, p. 165304, Apr. 2022.
- [95] R. Bistritzer and A. H. MacDonald, “Moiré bands in twisted double-layer graphene,” *Proceedings of the National Academy of Sciences*, vol. 108, no. 30, pp. 12233–12237, 2011.
- [96] F. Escudero, A. Sinner, Z. Zhan, P. A. Pantaleón, and F. Guinea, “Designing moiré patterns by strain,” *Phys. Rev. Res.*, vol. 6, p. 023203, May 2024.
- [97] Y. V. Kartashov, F. Ye, V. V. Konotop, and L. Torner, “Multifrequency solitons in commensurate-incommensurate photonic moiré lattices,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 127, p. 163902, Oct 2021.
- [98] S. M. Lubin, A. J. Hryn, M. D. Huntington, C. J. Engel, and T. W. Odom, “Quasiperiodic moiré plasmonic crystals,” *ACS Nano*, vol. 7, pp. 11035–11042, Dec 2013.
- [99] K. Yee, “Numerical solution of initial boundary value problems involving maxwell’s equations in isotropic media,” *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, vol. 14, no. 3, pp. 302–307, 1966.
- [100] A. Taflov, “Application of the finite-difference time-domain method to sinusoidal steady-state electromagnetic-penetration problems,” *IEEE Transactions on Electromagnetic Compatibility*, vol. EMC-22, no. 3, pp. 191–202, 1980.
- [101] O. Zienkiewicz and R. Taylor, *The Finite Element Method: Its Basis and Fundamentals*. The Finite Element Method, Butterworth-Heinemann, 2013.
- [102] J. Sharma, R. Sharma, and L. K. Dusad, “Review and analysis of photonic crystal beam splitters for optical communication applications,” in *2015 International Conference on Green Computing and Internet of Things (ICGCIoT)*, pp. 160–162, 2015.

- [103] A. Mekis, S. Fan, and J. Joannopoulos, “Absorbing boundary conditions for fdtd simulations of photonic crystal waveguides,” *IEEE Microwave and Guided Wave Letters*, vol. 9, no. 12, pp. 502–504, 1999.
- [104] Y. Rahimof, I. A. Nechepurenko, M. R. Mahani, A. Tsarapkin, and A. Wicht, “The study of 3D FDTD modelling of large-scale bragg gratings validated by experimental measurements,” *JPhys Photonics*, vol. 6, p. 045024, Oct. 2024.
- [105] R. M. Younis, N. F. F. Areed, and S. S. A. Obayya, “Fully integrated and and or optical logic gates,” *IEEE Photonics Technology Letters*, vol. 26, no. 19, pp. 1900–1903, 2014.
- [106] W. Jin, Z. Yu, and S. Fan, “Time step size and cfl condition in fdtd.” <https://www.flexcompute.com/fdtd101/Lecture-7-Time-step-size-and-CFL-condition-in-FDTD/>, 2022.
- [107] K. Kim, A. DaSilva, S. Huang, B. Fallahazad, S. Larentis, T. Taniguchi, K. Watanabe, B. J. LeRoy, A. H. MacDonald, and E. Tutuc, “Tunable moiré bands and strong correlations in small-twist-angle bilayer graphene,” *Proceedings of the National Academy of Sciences*, vol. 114, no. 13, pp. 3364–3369, 2017.
- [108] R. Redheffer, “On the relation of transmission-line theory to scattering and transfer,” *J. Math. Phys.*, vol. Vol: 41, 03 1962.
- [109] C. R. Harris, K. J. Millman, S. J. van der Walt, R. Gommers, P. Virtanen, D. Cournapeau, E. Wieser, J. Taylor, S. Berg, N. J. Smith, R. Kern, M. Picus, S. Hoyer, M. H. van Kerkwijk, M. Brett, A. Haldane, J. F. del Río, M. Wiebe, P. Peterson, P. Gérard-Marchant, K. Sheppard, T. Reddy, W. Weckesser, H. Abbasi, C. Gohlke, and T. E. Oliphant, “Array programming with NumPy,” *Nature*, vol. 585, pp. 357–362, Sept. 2020.
- [110] P. Virtanen, R. Gommers, T. E. Oliphant, M. Haberland, T. Reddy, D. Cournapeau, E. Burovski, P. Peterson, W. Weckesser, J. Bright, S. J. van der Walt, M. Brett, J. Wilson, K. J. Millman, N. Mayorov, A. R. J. Nelson, E. Jones, R. Kern, E. Larson, C. J. Carey, Í. Polat, Y. Feng, E. W. Moore, J. VanderPlas, D. Laxalde, J. Perktold, R. Cimrman, I. Henriksen, E. A. Quintero, C. R. Harris, A. M. Archibald, A. H. Ribeiro, F. Pedregosa, P. van Mulbregt, and SciPy 1.0 Contributors, “SciPy 1.0: Fundamental Algorithms for Scientific Computing in Python,” *Nature Methods*, vol. 17, pp. 261–272, 2020.
- [111] The OpenBLAS Contributors, “Openblas: An optimized blas library,” 2025. <https://github.com/OpenMathLib/OpenBLAS>.
- [112] M. Rogowski, S. Aseeri, D. Keyes, and L. Dalcin, “mpi4py.futures: Mpi-based asynchronous task execution for python,” *IEEE Transactions on Parallel and Distributed Systems*, vol. 34, no. 2, pp. 611–622, 2023.
- [113] M. Born, E. Wolf, A. B. Bhatia, P. C. Clemmow, D. Gabor, A. R. Stokes, A. M. Taylor, P. A. Wayman, and W. L. Wilcock, *Principles of Optics: Electromagnetic Theory of Propagation, Interference and Diffraction of Light*. Cambridge University Press, 7 ed., 1999.
- [114] D. Freedman, R. Pisani, and R. Purves, “Statistics (international student edition),” *Pisani, R. Purves, 4th edn. WW Norton & Company, New York*, 2007.

- [115] M. F. Weber, C. A. Stover, L. R. Gilbert, T. J. Nevitt, and A. J. Ouderkerk, “Giant Birefringent Optics in Multilayer Polymer Mirrors,” *Science*, vol. 287, pp. 2451–2456, Mar. 2000.
- [116] B. Wu, A. Zimmers, H. Aubin, R. Ghosh, Y. Liu, and R. Lopez, “Electric-field-driven phase transition in vanadium dioxide,” *Phys. Rev. B*, vol. 84, p. 241410, Dec 2011.
- [117] Z. Shao, X. Cao, H. Luo, and P. Jin, “Recent progress in the phase-transition mechanism and modulation of vanadium dioxide materials,” *NPG Asia Mater.*, vol. 10, pp. 581–605, July 2018.
- [118] C. Wan, Z. Zhang, D. Woolf, C. M. Hessel, J. Rensberg, J. M. Hensley, Y. Xiao, A. Shahsafi, J. Salman, S. Richter, Y. Sun, M. M. Qazilbash, R. Schmidt-Grund, C. Ronning, S. Ramanathan, and M. A. Kats, “On the optical properties of thin-film vanadium dioxide from the visible to the far infrared,” *Annalen der Physik*, vol. 531, no. 10, p. 1900188, 2019.
- [119] M. R. Otto, L. P. R. de Cotret, D. A. Valverde-Chavez, K. L. Tiwari, N. Émond, M. Chaker, D. G. Cooke, and B. J. Siwick, “How optical excitation controls the structure and properties of vanadium dioxide,” *Proceedings of the National Academy of Sciences*, vol. 116, no. 2, pp. 450–455, 2019.
- [120] C. Wan, E. H. Horak, J. King, J. Salman, Z. Zhang, Y. Zhou, P. Roney, B. Gundlach, S. Ramanathan, R. H. Goldsmith, and M. A. Kats, “Limiting optical diodes enabled by the phase transition of vanadium dioxide,” *ACS Photonics*, vol. 5, pp. 2688–2692, Jul 2018.
- [121] T. Son, K. Zongo, C. Ba, G. Beydaghyan, and A. Haché, “Pure optical phase control with vanadium dioxide thin films,” *Optics Communications*, vol. 320, pp. 151–155, 2014.
- [122] S. B. Choi, J. S. Kyoung, H. S. Kim, H. R. Park, D. J. Park, B.-J. Kim, Y. H. Ahn, F. Rotermund, H.-T. Kim, K. J. Ahn, and D. S. Kim, “Nanopattern enabled terahertz all-optical switching on vanadium dioxide thin film,” *Applied Physics Letters*, vol. 98, p. 071105, 02 2011.
- [123] D. F. Edwards and E. Ochoa, “Infrared refractive index of silicon,” *Appl. Opt.*, vol. 19, pp. 4130–4131, Dec 1980.