

Universidad Autónoma de Querétaro
Facultad de Ingeniería

Diseño de espejos estructurales de amplio espectro
basados en cristales fotónicos unidimensionales
modulados de silicio poroso.

Tesis

Que como parte de los requisitos para obtener el
grado de

Ingeniero Físico

Presenta

Eric Ortiz Vazquez

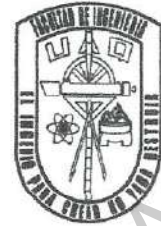
Dirigido por

Dr. Cristian Felipe Ramírez Gutiérrez

Querétaro, Qro., a 05 de octubre de 2021



Universidad Autónoma de Querétaro
Facultad de Ingeniería
Ingeniería física



Diseño de espejos estructurales de amplio espectro basados en cristales fotónicos unidimensionales modulados de silicio poroso

TESIS

Que como parte de los requisitos para obtener el grado de
INGENIERO FÍSICO

Presenta:

Eric Ortiz Vazquez

Dirigido por:

Asesor

Dr. Cristian Felipe Ramírez Gutiérrez

SINODALES

Dr. Cristian Felipe Ramírez Gutiérrez
Presidente

Dr. Mario Enrique Rodríguez García
Secretario

Dr. Jorge David Castaño Yepes
Vocal

Dr. César Augusto Isaza Bohórquez
Suplente


Firma

Firma

Firma

Firma

Firma

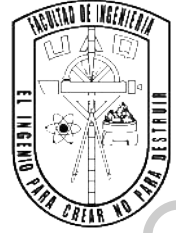
Centro Universitario
Querétaro, QRO
México.
Octubre 2021



Universidad Autónoma de Querétaro

Facultad de Ingeniería

Ingeniería física



Diseño de espejos estructurales de amplio espectro basados en cristales fotónicos unidimensionales modulados de silicio poroso

TESIS

Que como parte de los requisitos para obtener el grado de
INGENIERO FÍSICO

Presenta:

Eric Ortiz Vazquez

Dirigido por:

Asesor

Dr. Cristian Felipe Ramírez Gutiérrez

SINODALES

Dr. Cristian Felipe Ramírez Gutiérrez

Presidente

Firma

Dr. Mario Enrique Rodríguez García

Secretario

Firma

Dr. Jorge David Castaño Yepes

Vocal

Firma

Dr. César Augusto Isaza Bohórquez

Suplente

Firma

Centro Universitario

Querétaro, QRO

México.

Octubre 2021

Dirección General de Bibliotecas UAQ

© 2021 - Eric Ortiz Vazquez

Derechos reservados.

Dirección General de Bibliotecas UAQ

Dirección General de Bibliotecas UAQ

A mi mamá, mi papá, mis hermanos, mis gatos y mi novia...

Agradecimientos

Gracias a mis padres: Lucy y Mario, por ser los principales promotores de mis sueños, por confiar y creer en mí, por los consejos, valores y principios que me han enseñado.

Agradezco a los docentes de la carrera de ingeniería física de la facultad de Ingeniería de la Universidad Autónoma de Querétaro, por haber compartido sus conocimientos a lo largo de la preparación de nuestra profesión, en especial a mi director de tesis, el Dr. Cristian Felipe Ramírez Gutiérrez por guiar esta investigación y a mis sinodales el Dr. Mario Enrique Rodríguez García, el Dr. Jorge David Castaño Yepes y el Dr. César Augusto Isaza Bohórquez por sus comentarios y sugerencias acerca de la tesis.

Dirección General de Bibliotecas UAQ

Dirección General de Bibliotecas UAQ

Abstract

This work proposes the optimization of structural mirrors based on porous silicon designed to obtain the greatest possible total reflectance efficiency. In this sense, a genetic algorithm is used to optimize the optical response of a photonic crystal based on porous silicon. The genetic algorithm, with the use of chromosomes that characterize the system, simulates a multilayer structure of porous silicon using the transfer matrix method and the theory of effective medium. The characteristic chromosome of the system is used to generate an optical reflectance response from which the fitness of the individual is measured to maximize the response in the visible spectrum range (400 nm - 800 nm).

The optimized cases are of two types: periodic photonic crystals and modulated photonic crystals. The periodic cases are 2 Bragg reflectors which only contain 2 genes in each chromosome and each case is characterized by the difference between the contrast of the refractive index of the layers in each period to compare the optical responses. Modulated photonic crystals introduce 3 cases with different chirp functions that give the system configurations that increase the reflectance in the visible range.

Dirección General de Bibliotecas UAQ

Resumen

En este trabajo se propone la optimización de reflectores estructurales basados en silicio poroso diseñados para obtener la mayor reflectancia total posible. En ese sentido, se utiliza un algoritmo genético para optimizar la respuesta óptica de un cristal fotónico basado en silicio poroso. Dicho algoritmo, con el uso de cromosomas que caracterizan al sistema, simula una estructura multicapa de silicio poroso utilizando el método de la matriz de transferencia y la teoría del medio efectivo. El cromosoma característico del sistema se utiliza para generar una respuesta óptica de reflectancia de la cual se mide la aptitud del individuo para maximizar la respuesta en el rango del espectro visible (400 nm – 800 nm).

Los casos optimizados son de dos tipos: cristales fotónicos periódicos y cristales fotónicos modulados. Los casos periódicos son 2 reflectores de Bragg que contienen únicamente 2 genes en cada cromosoma y cada caso se caracteriza por la diferencia entre el contraste de índices de refracción de las capas en cada periodo con el objetivo de comparar las respuestas ópticas. Los cristales fotónicos modulados introducen 3 casos diferentes con funciones de variación espacial del centrado que otorgan al sistema configuraciones que aumentan la reflectancia en el rango visible.

Dirección General de Bibliotecas UAQ

Índice general

Agradecimientos	
Abstract	I
Resumen	III
Índice general	v
Índice de figuras	VII
Índice de tablas	IX
1. Introducción	1
2. Estado de la técnica	4
2.1. Silicio	4
2.1.1. Propiedades ópticas del silicio	5
2.2. Silicio poroso	5
2.2.1. Fabricación de películas de silicio poroso	6
2.2.2. Caracterización in-situ del crecimiento de películas de silicio poroso	6
2.3. Cristales fotónicos	8
2.3.1. Campos electromagnéticos en medios dieléctricos mixtos	9
2.3.2. Cristales atómicos y cristales fotónicos	11
2.3.3. Reflectores de Bragg	11
2.3.4. Reflectores omnidireccionales	12
2.3.5. Microcavidades ópticas	12
2.3.6. Cristales fotónicos modulados	13
2.4. Teoría del medio efectivo	13
2.5. Propagación de ondas electromagnéticas en películas delgadas	14
2.5.1. Polarización por reflexión	16
2.6. Algoritmos genéticos	16
3. Hipótesis y objetivos	18
3.1. Hipótesis	18
3.2. Objetivos	18

3.2.1. Objetivo general	18
3.2.2. Objetivos específicos	18
4. Metodología	19
4.1. Simulación de la respuesta óptica	19
4.2. Cristales fotónicos modulados	19
4.3. Optimización de la reflectancia	21
5. Resultados y discusión	24
5.1. Funcionamiento del algoritmo	24
5.2. Cristales fotónicos periódicos	26
5.2.1. Cristal fotónico de silicio y aire: caso límite	26
5.2.2. Silicio poroso con periodo constante	28
5.3. Cristales fotónicos aperiódicos	29
5.3.1. Silicio poroso con modulación exponencial	30
5.3.2. Silicio poroso con modulación senoidal	32
5.3.3. Silicio poroso con modulación gaussiana	34
5.4. Colorimetría	37
6. Conclusión	38

Índice de figuras

1.1. Gráficas de la reflectancia de espejos comerciales de la empresa de equipos ópticos thorlabs, Inc. [4]	2
2.1. La estructura cristalina del silicio visto desde los planos A)(100), B)(110), C)(111), las cuales son las direcciones cristalinas más comunes encontradas en las obleas de silicio monocristalino.	4
2.2. Índice de refracción y coeficiente de extinción del silicio monocristalino.	5
2.3. Imágenes de microscopía electrónica de barrido de diferentes estructuras de silicio poroso.	7
2.4. Una representación de la configuración electroquímica y fotoacústica experimental utilizada para la fabricación de silicio poroso. Las muestras de superficie se iluminaron con un láser (808 nm) con intensidad modulada de onda cuadrada. Los amplificadores Lock-In y la fuente de corriente se controlaron mediante la tarjeta GPIB y el software desarrollado en Matlab (MathWorks, Inc.). Tomado y adaptado de [8].	8
2.5. Ejemplos simples de cristales fotónicos unidimensionales, bidimensionales y tridimensionales. Los diferentes colores representan materiales con diferentes constantes dieléctricas. La característica definitoria de un cristal fotónico es la periodicidad del material dieléctrico a lo largo de uno o más ejes. Tomado y adaptado de [3].	9
2.6. Índice de refracción en función de la porosidad y la longitud de onda para el silicio poroso usando la regla de LLL.	14
2.7. Esquema del modelo para la admitancia óptica donde d_i es el espesor de cada capa, η_i es el índice de refracción de la capa y θ_i el ángulo de incidencia. [31].	16
4.1. Representación de la modulación de la longitud de onda de centrado en un cristal fotónico cuyo periodo no es constante. Se muestra que las porosidades son periódicas a lo largo del sistema mientras el centrado de longitud de onda y los espesores de las capas varían.	20
4.2. Reflectancia objetivo para la optimización de la estructura de cristal fotónico en un rango de 400 nm a 800 nm.	21
4.3. Diagrama de flujo del algoritmo genético implementado. La reproducción del algoritmo genético es sexual de cruce uniforme heredando genes de ambos padres.	23

5.1. Evolución de la población en función del número de generaciones donde cada iteración participan los algoritmos de reproducción, cruza y mutación. El programa genera la función de aptitud con el valor del mejor cromosoma de cada generación. Se hicieron las pruebas para $P_{ge} = 30, 50, 70$ y 100 generaciones con $P_{po} = 20$ individuos.	25
5.2. Diseño y respuesta óptica del reflector del caso límite no modulado Silicio/Aire.	27
5.3. Respuesta óptica para polarización tipo P, S y la reflectancia promedio $R(\mathbf{V}, \lambda)$ de un reflector Silicio/Aire en función de la longitud de onda y el ángulo de incidencia del haz de luz.	27
5.4. Diseño y respuesta óptica del reflector del caso silicio poroso no modulado $PS_{45/89}$	28
5.5. Respuesta óptica para polarización tipo P, S y la reflectancia promedio $R(\mathbf{V}, \lambda)$ de un reflector $PS_{45/89}$ en función de la longitud de onda y el ángulo de incidencia del haz de luz.	29
5.6. Diseño y respuesta óptica del reflector del caso silicio poroso con modulación exponencial $PSE_{45/89}$	30
5.7. Respuesta óptica para polarización tipo P, S y la reflectancia promedio $R(\mathbf{V}, \lambda)$ de un reflector $PSE_{45/89}$ en función de la longitud de onda y el ángulo de incidencia del haz de luz.	31
5.8. Reflectancia total integrada en el rango objetivo en función del ángulo de incidencia y respuesta óptica del reflector $PSE_{45/89}$ a incidencia normal y a incidencia de 79° de luz no polarizada.	32
5.9. Diseño y respuesta óptica del reflector del caso silicio poroso con modulación senoidal $PSS_{45/89}$	33
5.10. Respuesta óptica para polarización tipo P, S y la reflectancia promedio $R(\mathbf{V}, \lambda)$ de un reflector $PSS_{45/89}$ en función de la longitud de onda y el ángulo de incidencia del haz de luz.	33
5.11. Reflectancia total integrada en el rango objetivo en función del ángulo de incidencia y respuesta óptica del reflector $PSS_{45/89}$ a incidencia normal y a incidencia de 78° de luz no polarizada.	34
5.12. Diseño y respuesta óptica del reflector del caso silicio poroso con modulación gaussiana $PSG_{45/89}$	35
5.13. Respuesta óptica para polarización tipo P, S y la reflectancia promedio $R(\mathbf{V}, \lambda)$ de un reflector $PSG_{45/89}$ en función de la longitud de onda y el ángulo de incidencia del haz de luz.	35
5.14. Reflectancia total integrada en el rango objetivo en función del ángulo de incidencia y respuesta óptica del reflector $PSG_{45/89}$ a incidencia normal y a incidencia de 78° de luz no polarizada.	36
5.15. Representación gráfica del color de silicio poroso en las muestras de silicio monocristalino para los casos presentados en la Tabla (5.1).	37

Índice de tablas

2.1. Tabla de comparación entre la mecánica cuántica en un potencial periódico y la electrodinámica en un dieléctrico periódico. Tomado y adaptado de [3].	11
4.1. Funciones de modulación de la Ec. (4.1) (centrado de subespejos) y los intervalos de interés de estudio de las constantes de modulación.	21
5.1. Reflectancia a incidencia normal y cromosomas de los reflectores optimizados con algoritmos genéticos	37

Dirección General de Bibliotecas UAQ

Dirección General de Bibliotecas UAQ

Introducción

A principios de siglo, cerca del 80 % de la electricidad consumida en el mundo provenía de los combustibles fósiles y fuentes nucleares. Estas fuentes de energía son costosas y su operación provoca un gran impacto ambiental, principalmente a partir de la emisión de gases de invernadero y desechos radioactivos. [1]

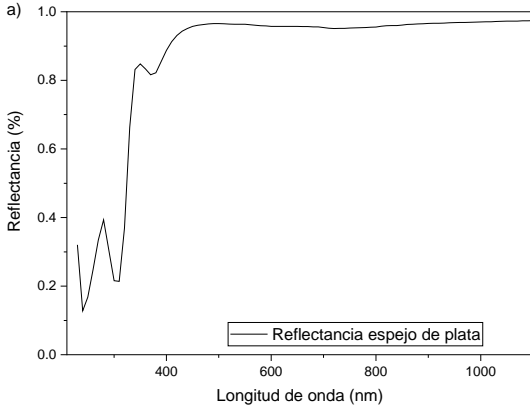
La energía solar es una alternativa viable para el futuro energético de la humanidad, dado que el sol emite energía a razón de 3.8×10^{23} kW de los cuales 1.8×10^{14} kW son interceptados por la tierra, aunque es evidente que no toda la energía puede ser aprovechada por efecto de dispersión, reflexión y absorción atmosférica. También es una fuente de energía que no es agotable, en nuestras escalas de tiempo, lo que significa que proporciona una eficiencia de producción sólida y cada vez mayor comparado con otras fuentes de energía. [2]

Los dispositivos de recolección de radiación solar necesitan reflectores que concentren la luz solar. Actualmente algunos reflectores solares son fabricados de vidrio común (óxido de silicio amorfo), estaño y paladio con un recubrimiento metálico que se utilizan para calefacción residencial y comercial, no obstante, debido a la función dieléctrica propia de los metales, no es posible generalizar y escalar los rangos del espectro electromagnético de reflectancia, es decir, es difícil construir dispositivos milimétricos para el control de ondas de microondas o nanométricas para el control de luz visible con el mismo material. [3]

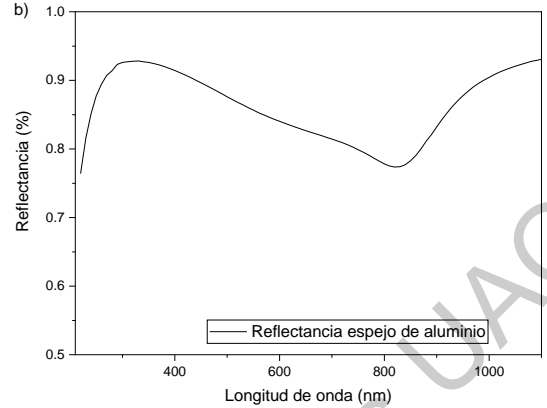
En la Fig. (1.1) se muestra la reflectancia de espejos comerciales de plata y aluminio. La Fig. (1.1a) muestra la reflectancia de un espejo de plata y se observa un espectro amplio de reflectancia después de 450 nm extendiéndose hasta los 1100 nm, abarcando la zona del espectro electromagnético visible e infrarrojo. La Fig. (1.1b) muestra la reflectancia de un espejo de aluminio. Este espectro muestra dos máximos de reflectancia cerca de 350 nm y 1100 nm en las zonas del ultravioleta e infrarrojo del espectro electromagnético y presenta un mínimo de reflectancia en 800 nm correspondiente al infrarrojo cercano al visible. La diferencia entre el mínimo y el máximo de reflectancia en el espejo de aluminio es de 10 %.

A diferencia del vidrio plateado y reflectores de aluminio, los cristales fotónicos pueden seleccionar y reflejar longitud de onda específica del espectro electromagnético, por lo que son una alternativa para hacer reflectores de amplio espectro. [3]

Los cristales fotónicos son un arreglo periódico de constantes dieléctricas distribuidas en el espacio en 1, 2 o 3 dimensiones, este tipo de material puede producir un ancho de banda fotónico de reflectancia. Los cristales fotónicos, similarmente a los cristales atómicos, están compuestos por una celda unitaria que representa la simetría de la estructura, de modo que el cristal completo se genera



(a): Gráfica de la reflectancia de un espejo de plata comercial en el rango de 230 nm a 1100 nm para luz no polarizada.



(b): Gráfica de la reflectancia de un espejo de aluminio comercial en el rango de 220 nm a 1100 nm para luz no polarizada.

Fig. (1.1): Gráficas de la reflectancia de espejos comerciales de la empresa de equipos ópticos thorlabs, Inc. [4]

desplazando a la celda unitaria distancias discretas constantes (periodo) en una o varias direcciones, formando una estructura periódica en el espacio. [3]

El silicio poroso es una mezcla homogénea entre silicio y aire y se ha mostrado que es una buena alternativa para poder controlar con precisión el crecimiento de cristales fotónicos y poder manipular sus propiedades ópticas con cierta simplicidad, sin embargo, el ancho de banda de reflectancia, en una configuración periódica, está limitado por el contraste de índices de refracción entre las capas porosas. [5, 6]

En teoría, debería ser posible obtener cualquier índice de refracción entre el aire (correspondiente a una capa de porosidad del 100%) y el índice de refracción del silicio (porosidad del 0%). Sin embargo, este intervalo se reduce debido al rango limitado de porosidad que se puede lograr en la práctica. Este rango de porosidad está determinado por la porosidad más baja que permite la difusión adecuada del electrolito durante el proceso de grabado para producir capas homogéneas, y la porosidad más alta que produce una capa mecánicamente estable. [7, 8, 5]

Una alternativa para aumentar el ancho de banda de los cristales fotónicos es la incorporación de una función de modulación que modifique el periodo de la estructura, volviendo estos cristales aperiódicos. La introducción de una modulación en el periodo de un cristal fotónico modifica su respuesta óptica permitiendo modificar el ancho de banda de reflectancia, comparado con un cristal fotónico de periodo constante, para diseñar reflectores que maximicen la reflexión de las longitudes de onda cercanas a la de la luz visible que conforma cerca del 34% de la distribución de la radiación emitida por el sol al ingresar a la atmósfera. [9, 10, 11]

Se ha mostrado que el uso de modulaciones en cristales fotónicos de silicio poroso puede producir respuestas de alta reflectancia en el infrarrojo, donde el índice de refracción del silicio es aproximadamente constante, y espejos omnidireccionales que reflejan porciones de la luz visible, aunque algunos de estos reflectores cuentan con 500 capas lo que lo hace un reto para la fabricación. [9, 12, 10, 13]

Encontrar la modulación correcta y las características óptimas del cristal fotónico no es un problema trivial pero existen métodos de optimización que son muy eficaces a la hora de resolver

problemas que tienen un campo de búsqueda muy extenso. Los algoritmos genéticos son un algoritmo de búsqueda que imita la teoría de la evolución de Darwin para la resolución de problemas, para ello se define una población inicial de posibles soluciones que se combinan y mutan durante cierto número de generaciones favoreciendo a los individuos más capacitados obteniendo como producto final una solución que minimiza el error comparado con un objetivo. El uso de algoritmos genéticos ayuda a encontrar las características, de uno o varios sistemas, que maximizan la respuesta óptica en un rango seleccionado del espectro electromagnético. [14]

Dirección General de Bibliotecas UAQ

Estado de la técnica

2.1. Silicio

El silicio es el elemento 14 de la tabla periódica. Aunque no se encuentra en su forma pura de manera natural se presenta en abundancia en forma de compuestos como el óxido de silicio o los silicatos, que conforman un 95 % de la corteza terrestre [15]. Estos compuestos son expuestos a tratamientos de purificación como el método de solidificación direccional [16] en donde se obtienen obleas monocristalinas de silicio, frecuentemente dopado con impurezas como el boro o el fósforo que modifican sus propiedades eléctricas como la resistividad. Las obleas de silicio monocristalinas, que tienen un enlace covalente entre sus átomos, son la base para los sustratos que son usados en la fabricación de silicio poroso. Las obleas de silicio tienen el menor costo por unidad de área y la mayor calidad cristalina de cualquier material semiconductor. [17]

Como se muestra en la Fig. (2.1), el silicio monocristalino tiene una estructura tipo diamante, específicamente el grupo de simetría $FD3M$. Las obleas monocristalinas de silicio pueden fabricarse en una dirección cristalina específica que tiene efectos sobre la fabricación de silicio poroso afectando principalmente a la morfología de los poros.

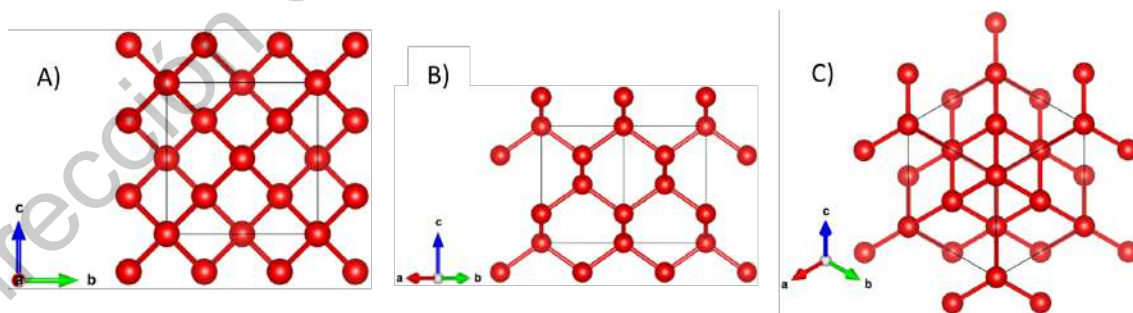


Fig. (2.1): La estructura cristalina del silicio visto desde los planos A)(100), B)(110), C)(111), las cuales son las direcciones cristalinas más comunes encontradas en las obleas de silicio monocristalino.

2.1.1. Propiedades ópticas del silicio

Los datos precisos de las propiedades ópticas del silicio son útiles en los cálculos de las propiedades ópticas de los cristales fotónicos de silicio poroso. Se usa una tabulación actualizada del coeficiente de absorción, α , y las partes real e imaginaria del índice de refracción (η y κ , respectivamente). El coeficiente de extinción, κ , y α están directamente relacionados, $\alpha = 4\pi\kappa/\lambda$, donde λ es la longitud de onda del espacio libre. Los datos de la Fig. (2.2) se proporcionan a 300 K en el rango de 210 nm a 1100 nm a intervalos de 1 nm. [18]

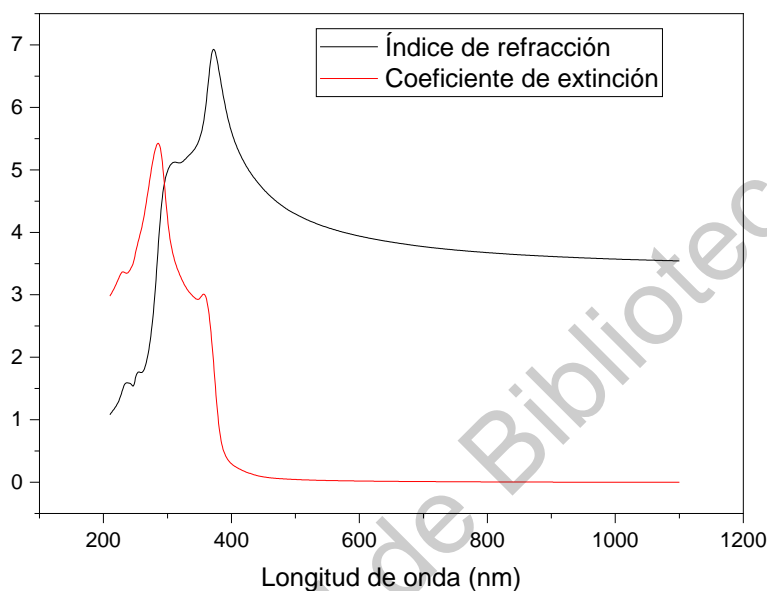


Fig. (2.2): Índice de refracción y coeficiente de extinción del silicio monocristalino.

Se puede observar que en las zonas cercanas al ultravioleta el silicio tiene un alto coeficiente de extinción e índice de refracción mientras que a partir de 500 nm el índice de refracción y el coeficiente de extinción se mantienen aproximadamente constantes, esto hace que el silicio sea un material cuya respuesta óptica es simple de modificar en grandes longitudes de onda, pero es difícil hacer estructuras que puedan modificar la respuesta óptica en longitudes de onda cercanas al ultravioleta.

2.2. Silicio poroso

El silicio poroso fue descubierto accidentalmente en el año de 1956 por Arthur Uhlir y su esposa en los laboratorios Bell mientras desarrollaban una técnica para el electropulimiento en sustratos de silicio y germanio [19]. Aunque en esa época no causó mucho interés en la comunidad científica fue hasta el año de 1996 donde Leigh Canham diseñó un experimento donde se reveló que el silicio poroso emitía luz eficiente si se somete a una disolución electroquímica, un efecto de confinamiento cuántico [20]. Desde entonces el silicio poroso ha sido estudiado por sus propiedades ópticas y eléctricas modulables y no lineales, por su simplicidad en la fabricación y se mantiene generando expectativas para múltiples aplicaciones.

El silicio poroso es una mezcla homogénea entre silicio y aire, fabricado a partir de obleas monocristalinas de silicio que bajo ciertas condiciones de corriente de anodización y concentraciones

de electrolito forma pequeños poros en la superficie que producen que la oblea se torne de diversos colores. La formación del poro ocurre en los defectos o irregularidades superficiales del silicio; una superficie en la cual se agotan los huecos es pasivada por el ataque electroquímico, lo que significa que el ataque electroquímico es autolimitante.

Un método para la formación del silicio poroso es a través de la anodización de un sustrato de silicio monocristalino con un cátodo de platino inmerso en una solución de ácido fluorhídrico acompañado de un surfactante (etanol, etilenglicol) que favorezca el mojado de la superficie. Cuando una corriente es aplicada al arreglo, la reacción electroquímica se lleva a cabo produciendo la dilución del silicio. Las propiedades de la película porosa, como el espesor, porosidad, y velocidad de formación dependen principalmente de la corriente aplicada, el tiempo de exposición y la composición del electrolito [21].

La Fig. (2.3) muestra las imágenes SEM de diferentes películas de silicio poroso. La Fig. (2.3a) es la imagen SEM de un corte transversal de un sistema multicapa de silicio poroso con dos índices de refracción distintos. Se distingue cada capa y la interfaz con superficie rugosa entre cada capa, la rugosidad de la interfaz depende de la resistividad de las obleas de silicio. La Fig. (2.3b) muestra el contraste entre dos capas de silicio poroso. La capa de abajo corresponde a la capa superior en la estructura y cuenta con una porosidad menor a la capa inferior. La película se rompió ya que la estructura es mecánicamente inestable por el contraste de porosidad en ambas capas. La Fig. (2.3c) corresponde a la imagen SEM de un corte transversal de una monocapa de silicio poroso y también se puede apreciar la superficie de ataque. La Fig. (2.3d) muestra un corte trasversal de un sistema de monocapa de silicio poroso. Ambas imágenes corresponden a una misma densidad de corriente. Las Fig. (2.3e) y Fig. (2.3f) son imágenes SEM de una vista superficial de una monocapa de silicio poroso con densidad de corriente distinta. Ambas imágenes muestran la homogeneidad de los poros en la superficie.

2.2.1. Fabricación de películas de silicio poroso

El silicio poroso es fabricado a través de una reacción electroquímica, donde una muestra de silicio monocristalino usada como electrodo de sacrificio, es puesta en contacto con una solución de ácido fluorhídrico y le es aplicada una corriente externa. La formación de poros es limitada por la densidad de corriente a través del circuito.

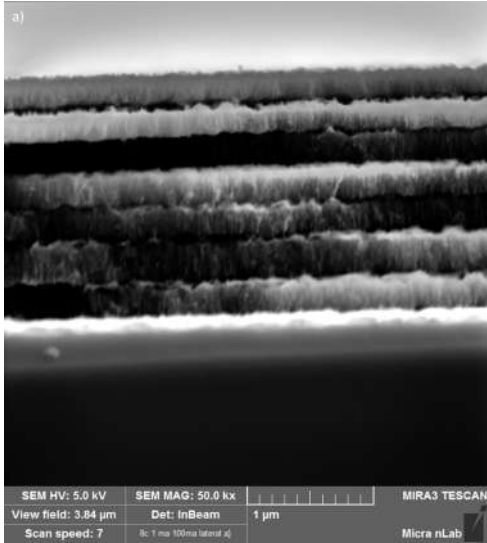
El tamaño de poro es sensible a la densidad de corriente, la resistividad del sustrato y la concentración de ácido fluorhídrico en la solución electrolítica produciendo poros en rangos de 2 nm a 100 nm antes del electropulido. [6]

Se usa como sustrato un cristal de silicio dopado con boro con dirección cristalina [100] y resistividad de $0,005 \Omega \cdot \text{cm}$. Las muestras se cortan en cuadrados de 1 cm^2 y se limpian utilizando el método de limpieza estándar de RCA para obleas de silicio. [22] Para el proceso de grabado se realiza un electrolito compuesto por ácido fluorhídrico al 40% y etanol al 99.67% en una relación de volumen 3:7, y la temperatura de la celda se mantiene en 25°C .

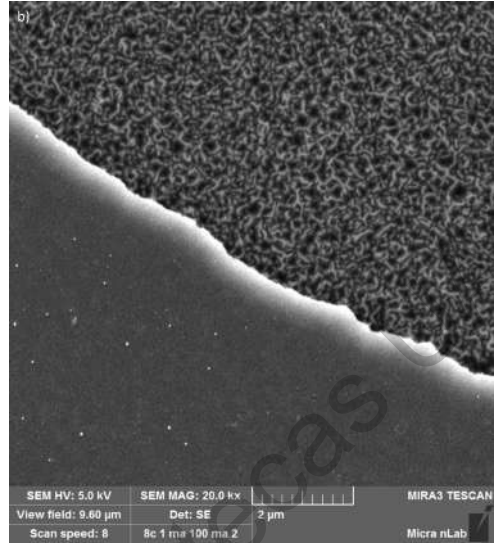
La porosidad de las capas está basada en las curvas de calibración de corriente-porosidad, que sean necesarias para la fabricación de los reflectores. [8]

2.2.2. Caracterización in-situ del crecimiento de películas de silicio poroso

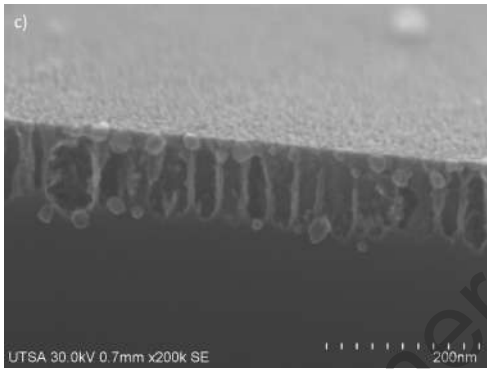
Para el montaje experimental se usa una celda electroquímica acoplada a una celda fotoacústica que permite el monitoreo del crecimiento en tiempo real, lo cual permite el control de los espesores



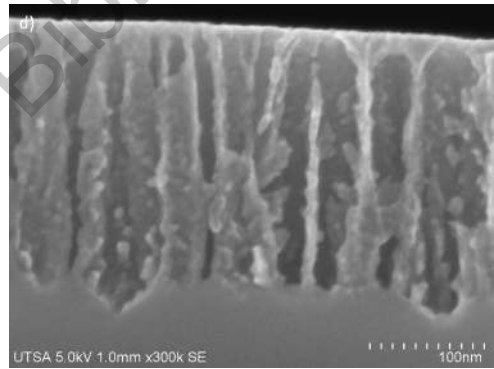
(a): Imagen SEM de un corte transversal de una estructura multicapa de silicio poroso con dos porosidades diferentes.



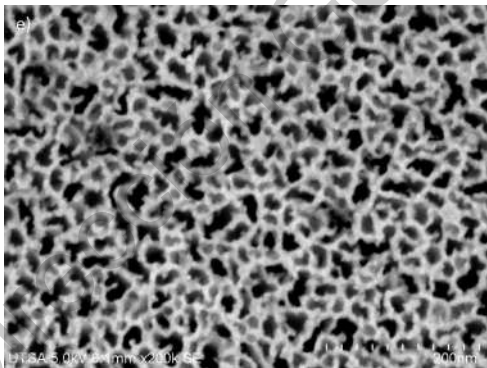
(b): Imagen SEM superficial de una estructura multicapa de silicio poroso el corte permite observar el contraste de porosidad.



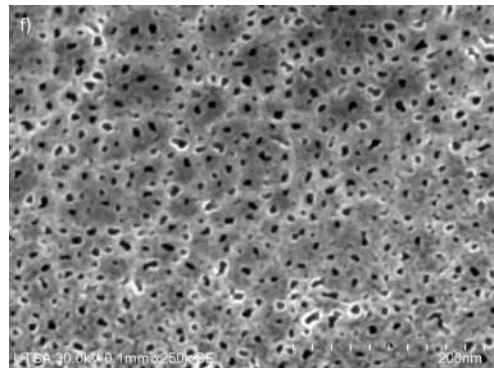
(c): Imagen SEM de un corte transversal y superficial de una capa de silicio poroso.



(d): Imagen SEM de un corte transversal de una capa de silicio poroso.



(e): Imagen SEM superficial de una capa de silicio poroso con porosidad alta.



(f): Imagen SEM superficial de una capa de silicio poroso con porosidad baja.

Fig. (2.3): Imágenes de microscopía electrónica de barrido de diferentes estructuras de silicio poroso.

en las capas de silicio de acuerdo con las curvas de calibración. [23]

En el arreglo experimental, la muestra de silicio que es atacada es monitoreada por la técnica de fotoacústica, la cual consiste en hacer incidir un haz de luz modulada, coherente y monocromática, y que por el efecto fotoacústico hace que la muestra genere variaciones de presión en un medio gaseoso cercano. En concreto se usa un haz de un láser de 808 nm y las variaciones de presión son medidas por un micrófono de condensador electreto que está situado en una cámara de gas cercana a la muestra, generando una señal fotoacústica medida respecto a una señal de referencia para evitar ruido externo. [8]

La Fig. (2.4) muestra el arreglo experimental

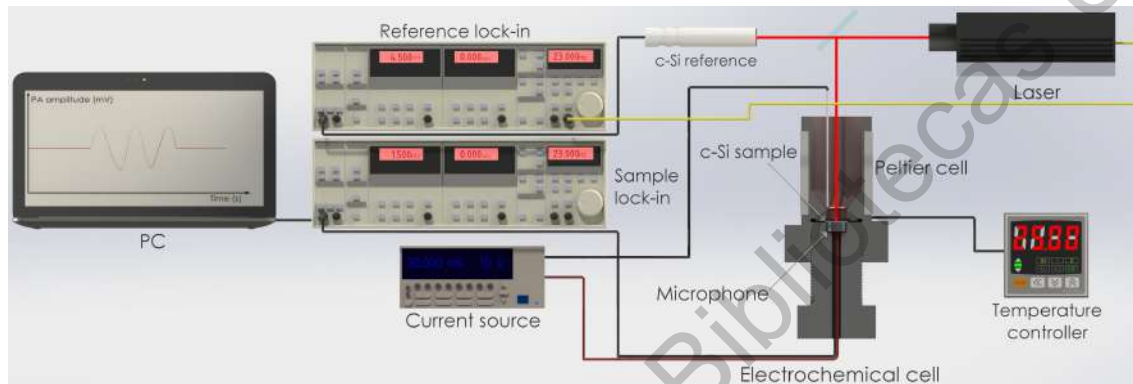


Fig. (2.4): Una representación de la configuración electroquímica y fotoacústica experimental utilizada para la fabricación de silicio poroso. Las muestras de superficie se iluminaron con un láser (808 nm) con intensidad modulada de onda cuadrada. Los amplificadores Lock-In y la fuente de corriente se controlaron mediante la tarjeta GPIB y el software desarrollado en Matlab (MathWorks, Inc.). Tomado y adaptado de [8].

2.3. Cristales fotónicos

Un cristal atómico se define como aquel material que produce un patrón de difracción nítido y bien definido. Este tipo de materiales, normalmente, presentan una estructura atómica donde sus elementos constitutivos, llamados celda unitaria, se repiten de manera periódica en una red en el espacio. La estructura atómica tiene un potencial periódico efectivo en donde los electrones se desplazan en ciertas direcciones y con diferente energía. El potencial periódico puede generar brechas de energía prohibida haciendo que los electrones no puedan propagarse con cierta energía en ciertas direcciones. De manera similar los cristales fotónicos son un arreglo periódico de constantes dieléctricas distribuidas en el espacio en 1, 2 o 3 dimensiones como se muestra en la Fig. (2.5). Los cristales fotónicos presentan una función periódica dieléctrica o, equivalentemente, índices de refracción periódicos. Esto define una geometría que controla las propiedades de la propagación de los fotones en el cristal. Si las constantes dieléctricas del material son lo suficientemente diferentes, y la absorción del material es mínima, pueden producirse un ancho de banda fotónico, esto significa que las ondas electromagnéticas no pueden propagarse en ciertas direcciones con frecuencias en específico. Los cristales fotónicos son un tipo de material que nos permite controlar la propagación de las ondas electromagnéticas dentro del mismo.

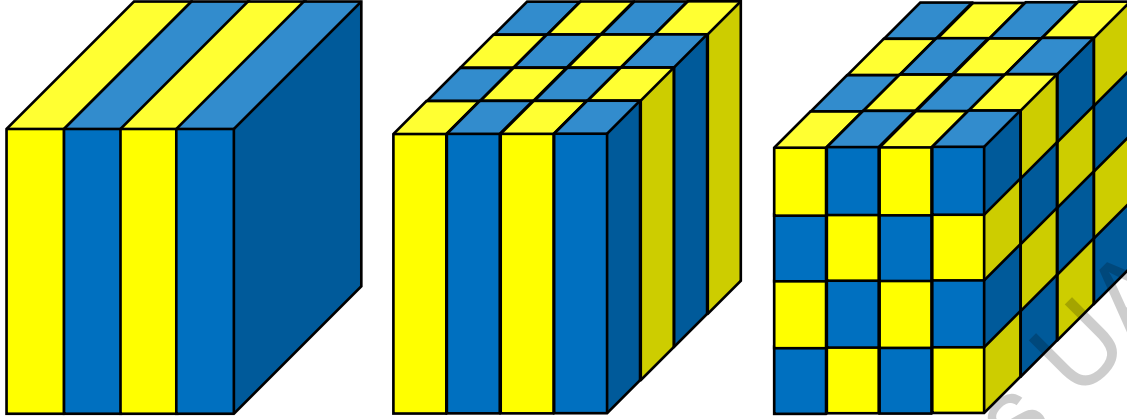


Fig. (2.5): Ejemplos simples de cristales fotónicos unidimensionales, bidimensionales y tridimensionales. Los diferentes colores representan materiales con diferentes constantes dieléctricas. La característica definitoria de un cristal fotónico es la periodicidad del material dieléctrico a lo largo de uno o más ejes. Tomado y adaptado de [3]

Al contrario que reflectores a base de metal, los cristales fotónicos pueden generalizar y escalar los rangos del espectro electromagnético que se quieren controlar. Esto significa que podemos construir estructuras milimétricas para el control de ondas de microondas o estructuras nanométricas para el control de luz visible.

Es bien sabido que un espejo estructural, una película dieléctrica multicapa, consiste en alternar películas de material con diferentes constantes dieléctricas. Cuando una onda electromagnética, con la longitud de onda apropiada, incide en el espejo estructural es completamente reflejada. Las múltiples interacciones de la onda incidente interfieren destructivamente para eliminar la propagación de la onda electromagnética en el material. [3]

2.3.1. Campos electromagnéticos en medios dieléctricos mixtos

La propagación de ondas electromagnéticas en un cristal fotónico está descrita por las 4 leyes de Maxwell. En el sistema internacional se definen como:

$$\begin{aligned}
 \nabla \cdot \mathbf{B} &= 0 & \nabla \times \mathbf{E} + \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} &= 0 \\
 \nabla \cdot \mathbf{D} &= \rho & \nabla \times \mathbf{H} - \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} &= \mathbf{J}
 \end{aligned}
 \tag{2.1}$$

Donde \mathbf{E} y \mathbf{H} son los campos macroscópicos eléctrico y magnético, \mathbf{D} y \mathbf{B} son los campos de desplazamiento eléctrico y de inducción magnética, y ρ y \mathbf{J} son la carga libre y la densidad de corriente.

El modelo considera la propagación de ondas electromagnéticas en un medio dieléctrico mixto, compuesto por zonas de material dieléctrico homogéneo en función del vector de posición \mathbf{r} , donde la estructura y las funciones dieléctricas no varían con el tiempo y no hay presencia de carga libre o densidad de corriente ($\rho = \mathbf{J} = 0$).

Los campos de desplazamiento eléctrico y de inducción magnética y los campos macroscópicos eléctrico y magnético son directamente proporcionales, respectivamente, y la proporcionalidad

depende solo del medio donde tienen presencia los campos

$$\begin{aligned}\mathbf{D}(\mathbf{r}) &= \varepsilon_0 \varepsilon(\mathbf{r}) \mathbf{E}(\mathbf{r}) \\ \mathbf{B}(\mathbf{r}) &= \mu_0 \mu(\mathbf{r}) \mathbf{H}(\mathbf{r})\end{aligned}\quad (2.2)$$

donde ε_0 y μ_0 son la permeabilidad eléctrica y magnética en el vacío y $\varepsilon(\mathbf{r})$ y $\mu(\mathbf{r})$ son la permeabilidad eléctrica y magnética relativa de un material. Dado que $\mu(\mathbf{r})$ es cercana a la unidad prescindiremos de ella. La función $\varepsilon(\mathbf{r})$ es una función que contiene la información del arreglo periódico dieléctrico. Sustituyendo la Ec. (2.2) en la Ec. (2.1) las ecuaciones de Maxwell se modifican de la siguiente manera:

$$\begin{aligned}\nabla \cdot \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) &= 0 & \nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) + \mu_0 \frac{\partial \mathbf{H}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} &= 0 \\ \nabla \cdot [\varepsilon(\mathbf{r}) \mathbf{E}(\mathbf{r}, t)] &= 0 & \nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) - \varepsilon_0 \varepsilon(\mathbf{r}) \frac{\partial \mathbf{E}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} &= 0\end{aligned}\quad (2.3)$$

Las Ec. (2.3) son las ecuaciones de Maxwell en un medio. En general, \mathbf{E} y \mathbf{H} son funciones que dependen del tiempo y el espacio ($\mathbf{E} = \mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ y $\mathbf{H} = \mathbf{H}(\mathbf{r}, t)$). Ya que las ecuaciones de Maxwell son lineales podemos separar la parte temporal de la parte espacial expandiendo los campos en un conjunto de modos armónicos. Es posible construir un modo armónico de la siguiente manera:

$$\begin{aligned}\mathbf{H}(\mathbf{r}, t) &= \mathbf{H}(\mathbf{r}) e^{-i\omega t} \\ \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) &= \mathbf{E}(\mathbf{r}) e^{-i\omega t}\end{aligned}\quad (2.4)$$

Considerando que no hay presencia de densidad de carga o corriente usamos las Ec. (2.4) para reducir las Ec. (2.3) a:

$$\begin{aligned}\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}) - i\omega \mu_0 \mathbf{H}(\mathbf{r}) &= 0 \\ \nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}) + i\omega \varepsilon_0 \varepsilon(\mathbf{r}) \mathbf{E}(\mathbf{r}) &= 0\end{aligned}\quad (2.5)$$

la combinación de las dos ecuaciones de campo en Ec. (2.5) resulta en una ecuación completamente en términos de \mathbf{H}

$$\nabla \times \left(\frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} \nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}) \right) = \left(\frac{\omega}{c} \right)^2 \mathbf{H}(\mathbf{r})\quad (2.6)$$

La Ec. (2.6) es la ecuación de Helmholtz para el campo magnético dentro de una estructura dieléctrica infinita no absorbente. Para una estructura con función dieléctrica $\varepsilon(\mathbf{r})$ real, la ecuación maestra resuelve los modos armónicos del campo magnético \mathbf{H} y sus correspondientes frecuencias. Posteriormente podemos recuperar el campo eléctrico.

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \frac{i}{\omega \varepsilon_0 \varepsilon(\mathbf{r})} \nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r})\quad (2.7)$$

Podemos reescribir la ecuación maestra para adaptarla a un problema de valores propios

$$\hat{\Theta} \mathbf{H}(\mathbf{r}) = \left(\frac{\omega}{c} \right)^2 \mathbf{H}(\mathbf{r})\quad (2.8)$$

donde

$$\hat{\Theta} \equiv \nabla \times \frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} \nabla \times\quad (2.9)$$

es un operador lineal y hermitiano.

Las funciones propias \mathbf{H} son los patrones de campo de modos armónicos y los valores propios $(\omega/c)^2$ son proporcionales al cuadrado de las frecuencias de esos modos. Es importante mencionar que el operador hermitiano $\hat{\Theta}$ es un operador lineal, de modo que, una combinación lineal de las soluciones también es una solución.

2.3.2. Cristales atómicos y cristales fotónicos

El aspecto central del tema de los cristales fotónicos es la propagación de ondas electromagnéticas en un medio dieléctrico periódico. La mecánica cuántica estudia la propagación de la función de onda de un sistema en un potencial periódico. A escala atómica, las partículas (como el electrón) comienzan a mostrar propiedades ondulatorias, incluidas la interferencia y la no localización. La función que contiene toda la información sobre la partícula obedece a la ecuación de Schrödinger, que tiene cierto parecido con una ecuación de onda familiar. Por lo tanto, no sorprende que el estudio de la mecánica cuántica en un potencial periódico contenga paralelos directos al estudio del electromagnetismo en un dieléctrico periódico. Dado que la mecánica cuántica de los potenciales periódicos es la teoría básica de la física del estado sólido, el campo de los cristales fotónicos también puede heredar algunos de los teoremas y terminología de la física del estado sólido, de forma ligeramente modificada. [3] Se muestran algunos ejemplos en la tabla (2.1).

	Mecánica cuántica	Electrodinámica
Función de onda	$\Psi(\mathbf{r}, t) = \Psi(\mathbf{r})e^{-iEt/\hbar}$	$\mathbf{H}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{H}(\mathbf{r})e^{-i\omega t}$
Ecuación maestra	$\hat{H}\Psi = E\Psi$	$\hat{\Theta}\mathbf{H} = \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \mathbf{H}$
Operador hermitiano	$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r})$	$\hat{\Theta} = \nabla \times \frac{1}{\epsilon(\mathbf{r})} \nabla \times$

Tabla (2.1): Tabla de comparación entre la mecánica cuántica en un potencial periódico y la electrodinámica en un dieléctrico periódico. Tomado y adaptado de [3].

2.3.3. Reflectores de Bragg

Similarmente a un cristal atómico, los cristales fotónicos se forman con una celda unitaria que se traslada periódicamente y genera el cristal. Los reflectores de Bragg son un tipo de cristal fotónico de una dimensión que consiste en una secuencia de dos capas que se repiten en el espacio, donde la bicapa corresponde al parámetro de celda del cristal fotónico, con índices de refracción diferentes. En el caso de un reflector de Bragg, la celda unitaria se define con un par de capas con porosidad p_H y p_L que se repiten con una simetría de traslación simple en una dimensión. El periodo del cristal se define como:

$$\Lambda = d_H + d_L \quad (2.10)$$

Donde d_H y d_L se son los espesores correspondientes de las capas p_H y p_L respectivamente y el periodo se mantiene constante a lo largo de la estructura. Un reflector de Bragg puede mostrar un pico espectral amplio, proporcionando un ancho de banda fotónico ($\Delta\lambda$), este ancho de banda de luz es altamente reflejante.

El espesor óptico, que se define como el producto entre el índice de refracción real, el espesor de una película delgada y el coseno del ángulo de incidencia ($\eta_i d_i \cos(\theta_i)$), de cada capa tiene que ser 1/4 de la longitud de onda de centrado, y las capas tienen que coincidir en fase. Para el caso de incidencia normal se debe mantener el producto $\eta_i d_i$ constante en todos los pares de capas, sin embargo, los

índices de refracción (η_i) del par de capas debe ser diferente entre sí, es decir, $\Delta\eta \neq 0$. La condición de Bragg para dos capas que está centrado en λ_i está determinada por la ecuación

$$\frac{\lambda_i}{4} = \eta_H \eta_L \left(\frac{d_H + d_L}{\eta_H + \eta_L} \right) \quad (2.11)$$

Los subíndices H y L representan capas con índice de refracción alto y bajo, que representan porosidad baja y alta respectivamente, el índice de refracción es aproximadamente proporcional a la densidad de corriente.

El ancho de banda de reflexión incrementa si aumenta la diferencia del índice de refracción entre las dos capas según la Ec. (2.12).

$$\frac{\Delta\lambda}{\lambda_i} = \frac{4}{\pi} \sin^{-1} \left(\frac{|\eta_H - \eta_L|}{\eta_H + \eta_L} \right) \quad (2.12)$$

donde

$$\frac{|\eta_H - \eta_L|}{\eta_H + \eta_L}$$

es el contraste entre porosidades, según la Ec. (2.12) el ancho de banda reflejante depende proporcionalmente de la longitud de onda de centrado. El número de pares de capas contribuye a la formación del ancho de banda fotónico de forma que al aumentar el número de pares de capas, el ancho de banda fotónico se vuelve más definido y aumenta su reflectancia, limitados por la Ec. (2.12). [6] Para determinar el ancho de banda fotónico de un reflector de Bragg finito hecho en base a material absorbente y con índice de refracción no constante, a diferencia de la Ec. (2.12) que toma en cuenta un reflector de Bragg infinito e ideal, se mide la anchura a media altura (FWHM) que toma la diferencia entre las longitudes de onda en los extremos cuando la reflectancia corresponde al 50 % entre el valor máximo y el valor mínimo cercano al extremo.

2.3.4. Reflectores omnidireccionales

Los reflectores omnidireccionales son cristales fotónicos dieléctricos que tienen la capacidad de reflejar completamente la radiación electromagnética en un rango particular de frecuencias para todos los ángulos de incidencia posibles y cualquiera que sea la polarización. Los espejos omnidireccionales pueden lograr una mayor reflectancia y pérdidas de absorción insignificantes en su interior en una región espectral específica para todos los ángulos de incidencia y estados de polarización comparado con reflectores hechos a base de materiales metálicos y dispersivos. De manera similar se puede diseñar, optimizar, fabricar y caracterizar estructuras multicapa cuasi-omnidireccionales (rango angular de 0° - 60°) altamente reflectantes con un amplio rango espectral. [24]

Se puede obtener un ancho de banda fotónico omnidireccional dentro de un rango de frecuencia específico si un ancho de banda fotónico refleja una onda electromagnética incidente en cualquier ángulo de incidencia para las polarizaciones P y S. Si el ángulo de refracción máximo es menor que el ángulo de Brewster, la incidencia de la onda electromagnética desde el exterior no se podría acoplar a la región del ángulo de Brewster, lo que da como resultado la formación de una banda fotónica prohibida omnidireccional. [25, 26]

2.3.5. Microcavidades ópticas

A la estructura de un cristal fotónico, como un reflector de Bragg, se pueden introducir puntos de defecto, es decir, la introducción de una capa de defecto, o cavidad en la estructura llamado resonador

Fabry-Perot. Esta cavidad rompe la periodicidad de la estructura lo que puede generar modos de defecto localizados dentro del ancho de banda fotónico que hacen disminuir exponencialmente la reflectancia, lo que quiere decir que el ancho de banda no se ve afectado. Los sistemas multicapa a cada lado del defecto actúan como espejos para el modo de defecto, lo que causa que la luz quede confinada en la cavidad entre los dos espejos.

La calidad de un defecto se define como

$$Q_m = \frac{\lambda_m}{\Delta\lambda} \quad (2.13)$$

donde $\Delta\lambda$ es el ancho de banda fotónico del defecto medido con el criterio FWHM y λ_m es la longitud de onda correspondiente a la de mínima reflectancia dentro del ancho de banda fotónico. Entre mayor sea el valor de Q mayor es la calidad del defecto.

2.3.6. Cristales fotónicos modulados

Los cristales atómicos se pueden describir por medio de una celda unitaria y su posición en la red atómica. Por lo general la red atómica se genera por la traslación simple de la celda unitaria generando en el cristal un periodo constante, sin embargo, existe una amplia clase de estructuras, denominadas cristales aperiódicos, que exhiben un orden de largo alcance sin simetría de traslación en la red. Entre ellos encontramos cristales inconmensurables, cristales modulados y cuasicristales.

El término modulación refleja la variación de los sitios atómicos (posiciones y ocupaciones) con respecto a una estructura periódica promedio ideal (más formalmente, deriva del uso de funciones de modulación atómica en la descripción matemática de estas estructuras). [27] En el caso de un cristal fotónico, la modulación es introducida a través de la variación del camino óptico, es decir, se modifican los índices de refracción, los espesores, y/o la longitud de onda del centrado usando una función de modulación, a la modulación que se concentra en el centrado de longitud de onda se le llama variación espacial del centrado (chirp). Se ha demostrado que para maximizar el ancho de banda de la respuesta óptica en un reflector de Bragg una opción de modelo es suponer que los espejos de banda ancha de silicio poroso se pueden construir como una disposición discreta de subespejos de Bragg apilados donde cada uno se refleja alrededor de una longitud de onda central diferente y la superposición de subespejos cubre un amplio rango de frecuencias debido al aumento de la brecha de banda fotónica. Así mismo se comprobó que funciona en el rango del infrarrojo en el espectro electromagnético. También se ha mostrado que una modulación en el periodo de las capas puede resultar en un reflector omnidireccional de amplio espectro. [9, 12, 10, 13]

2.4. Teoría del medio efectivo

La teoría del medio efectivo define promedios representativos del sistema que sea una mezcla de dos o más componentes y que está conectado con mediciones experimentales. [28]

En el caso del silicio poroso, el silicio monocristalino ($\hat{\epsilon}_{Si}$) conforma un medio en bulto al cual se le hacen incrustaciones de un material, en este caso aire ($\hat{\epsilon}_{Aire}$), del cual se resulta una función dieléctrica de medio efectivo ($\hat{\epsilon}_{Ef}$) que es función de la proporción en la que se mezclan estos materiales. Dicha función dieléctrica nos permite describir la película delgada del silicio poroso.

Existen varias reglas de mezclado para obtener la función dieléctrica de una mezcla, en el presente trabajo se usa la regla de Landau-Looyenga-Lifshitz (LLL): Ec. (2.14), donde la fracción de volumen

del material de relleno está directamente relacionada con la porosidad, ya que se toma en cuenta que las incrustaciones de aire en el silicio tienen formas irregulares. [29]

$$\hat{\epsilon}_{Ef}^{1/3} = (1 - p)\hat{\epsilon}_{Si}^{1/3} + p\hat{\epsilon}_{Aire}^{1/3} \quad (2.14)$$

La Fig. (2.6) muestra el cambio en el índice de refracción del silicio poroso en función de la porosidad y la longitud de onda, en un rango desde 210 nm a 1100 nm, utilizando la regla de la Ec. (2.14).

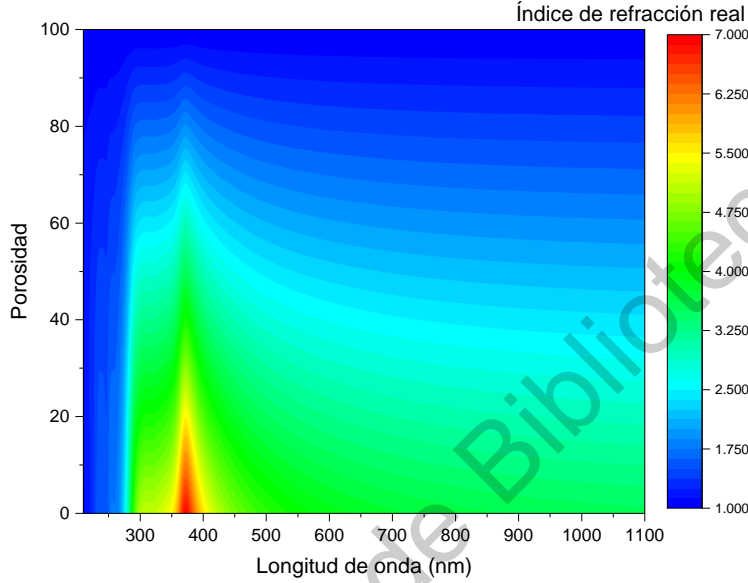


Fig. (2.6): Índice de refracción en función de la porosidad y la longitud de onda para el silicio poroso usando la regla de LLL.

2.5. Propagación de ondas electromagnéticas en películas delgadas

El método de la admitancia óptica [30] es válido en el caso de un régimen lineal, que es muy conveniente porque las constantes ópticas, o el índice de refracción complejo ($\hat{N} = \eta + i\kappa$), se pueden expresar con respecto a la constante dieléctrica del medio ($\hat{\epsilon} = \epsilon_1 + i\epsilon_2$) como:

$$\text{Re}(\hat{N}) = \eta = \sqrt{\frac{|\hat{\epsilon}| + \epsilon_1}{2}} \quad (2.15)$$

$$\text{Im}(\hat{N}) = \kappa = \sqrt{\frac{|\hat{\epsilon}| - \epsilon_1}{2}} \quad (2.16)$$

Las Ec. (2.15) y Ec. (2.16) son útiles porque la constante dieléctrica de los materiales de dos componentes (medio original y material de relleno) se puede expresar a través de la aproximación del medio efectivo como la Ec. (2.14). El método de admitancia óptica [30] introduce la matriz de transferencia (**S**) Ec. (2.17) del sistema completo

$$\mathbf{S} = \mathbf{W}_{01}\mathbf{U}_1\mathbf{W}_{12}\mathbf{1}_2 \dots \mathbf{W}_{N-1,N}\mathbf{U}_N\mathbf{W}_{N,N+1} = \begin{pmatrix} s_{11} & s_{12} \\ s_{21} & s_{22} \end{pmatrix} \quad (2.17)$$

Para un sistema de N capas y en el caso del silicio poroso el valor de las constantes de $N + 1$ corresponden a las mismas del silicio en bulto. En la Ec. (2.17) la matriz de fase (\mathbf{U}_i) Ec. (2.18) caracteriza a la capa de silicio poroso en función del espesor, el índice de refracción, el ángulo de incidencia y longitud de onda.

$$\mathbf{U}_i = \begin{pmatrix} \exp\left(\frac{2\pi i}{\lambda} \hat{N}_i d_i \cos(\theta_i)\right) & 0 \\ 0 & \exp\left(-\frac{2\pi i}{\lambda} \hat{N}_i d_i \cos(\theta_i)\right) \end{pmatrix} \quad (2.18)$$

la matriz de refracción ($\mathbf{W}_{i,j}$) Ec. (2.19) caracteriza el cambio de medio de la propagación de una onda electromagnética

$$\mathbf{W}_{i,j} = \frac{c_{i,j}}{t_{i,j}} \begin{pmatrix} 1 & r_{i,j} \\ r_{j,i} & t_{j,i}t_{i,j} - r_{j,i}r_{i,j} \end{pmatrix} \quad (2.19)$$

Donde $r_{i,j}$ y $t_{i,j}$ son los coeficientes modificados de Fresnel de reflexión Ec. (2.20) y transmisión Ec. (2.21) definidos como

$$r_{i,j} = r_{i,j}^{(0)} \exp\left[-2 \left(\frac{2\pi\sigma_i\eta_i \cos(\theta_i)}{\lambda}\right)^2\right] \quad (2.20)$$

$$t_{i,j} = t_{i,j}^{(0)} \exp\left[-\frac{1}{2} \left(\frac{2\pi\sigma_i}{\lambda}\right)^2 (\eta_j \cos(\theta_j) - \eta_i \cos(\theta_i))^2\right] \quad (2.21)$$

Donde σ introduce el valor RMS de la rugosidad en la interfaz y $r_{i,j}^{(0)}$ y $t_{i,j}^{(0)}$ son los coeficientes de Fresnel de reflexión Ec. (2.22) y transmisión Ec. (2.23) definidos como

$$r_{i,j}^{(0)} = \frac{\eta_i - \eta_j}{\eta_i + \eta_j} \quad (2.22)$$

$$t_{i,j}^{(0)} = \frac{2\eta_i}{\eta_i + \eta_j} \quad (2.23)$$

y el factor de polarización $c_{i,j}$ Ec. (2.24) que a su vez es función del ángulo.

$$c_{i,j} = \begin{cases} \frac{\cos(\theta_i)}{\cos(\theta_j)} & \text{tipo s} \\ 1 & \text{tipo p} \end{cases} \quad (2.24)$$

Entonces la reflectancia está determinada por:

$$R = \left(\frac{s_{21}}{s_{11}}\right) \left(\frac{s_{21}}{s_{11}}\right)^* \quad (2.25)$$

Esta notación indica que la i -ésima interfaz coincide con la i -ésima capa a la derecha de la interfaz. El sistema está representado como se muestra en la Fig. (2.7).

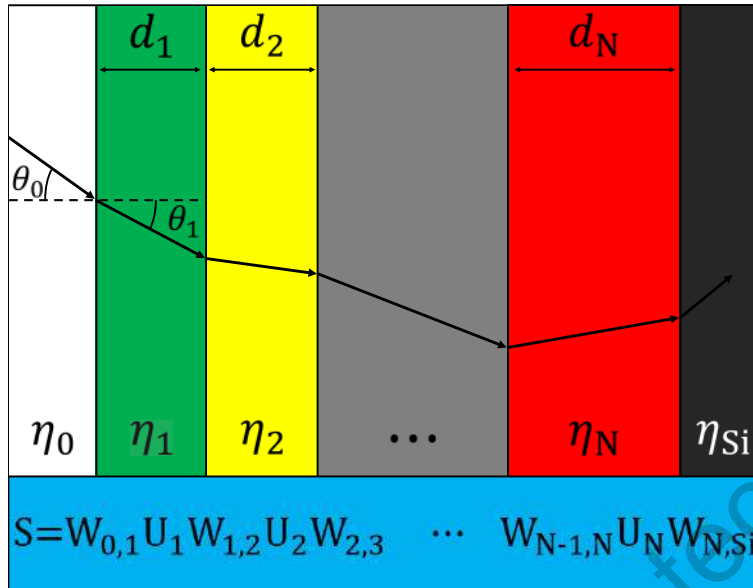


Fig. (2.7): Esquema del modelo para la admitancia óptica donde d_i es el espesor de cada capa, η_i es el índice de refracción de la capa y θ_i el ángulo de incidencia. [31]

2.5.1. Polarización por reflexión

La luz reflejada que pasa de un medio a otro no siempre está completamente polarizada y el grado de polarización de la luz reflejada depende del ángulo de incidencia. La luz reflejada se polariza más en un ángulo de incidencia específico que está determinado por los índices de refracción en ambos lados del límite reflectante. El ángulo en el que se produce esta condición se conoce como ángulo de Brewster o ángulo de polarización. Cuando la luz polarizada aleatoriamente incide sobre un material dieléctrico en el ángulo de polarización, la luz reflejada se polariza perpendicularmente al plano de incidencia, mientras que la luz refractada estará parcialmente polarizada. El ángulo entre los rayos de luz reflejados y refractados es igual a 90° de lo cual se puede deducir que

$$\tan \theta_B = \frac{\eta_1}{\eta_2} \quad (2.26)$$

Las oscilaciones de campo eléctrico paralelas al plano de incidencia a veces se denominan vibraciones P y las oscilaciones normales al plano de incidencia como vibraciones S. Para ángulos de incidencia muy pequeños, ambos componentes tienen la misma intensidad. La variación de intensidad de ambos componentes en función del ángulo de incidencia viene dada por las leyes de reflexión de Fresnel [32], [33].

2.6. Algoritmos genéticos

Los algoritmos genéticos son un tipo de método adaptativo utilizado para resolver problemas de búsqueda y optimización basado en el desarrollo de la selección natural y las ideas de la genética. Las generaciones poblacionales naturales evolucionan con los principios de la selección natural y la supervivencia del más apto, similarmente, los algoritmos genéticos utilizan técnicas como herencia, mutación, selección y cruzamiento para resolver problemas de optimización. Los algoritmos genéticos

son usados para buscar una solución en un gran espacio de estados o una superficie n-dimensional ya que es un modelo robusto. [34, 35]

Los algoritmos genéticos funcionan con el conjunto de soluciones posibles de un problema, representando al conjunto de individuos de una población. Se codifica la información o datos, llamados genes (genotipo), de cada solución en una cadena o vector, llamado individuo o cromosoma. Un conjunto de individuos evoluciona adaptándose a un problema a través de iteraciones con operadores genéticos transformando un conjunto de cromosomas en otro, a cada conjunto de cromosomas que se opera se le llama generación. En cada generación, los cromosomas son evaluados usando alguna medida de aptitud (fenotipo). Las siguientes generaciones (nuevos cromosomas), son generadas aplicando los operadores genéticos repetidamente, favoreciendo a los individuos con mejor aptitud, siendo estos los operadores de selección, cruzamiento, mutación y reemplazo. [36]

Los algoritmos genéticos pueden presentar variaciones dependiendo del método de reemplazo de los individuos para formar una población, pero en general el algoritmo genético consiste en los siguientes pasos:

Inicialización: Se genera aleatoriamente la población inicial, que está constituida por un conjunto de cromosomas los cuales representan las posibles soluciones del problema.

Evaluación: A cada uno de los cromosomas de esta población se le aplica la función de aptitud para evaluar la solución que se está codificando.

Condición de término: El algoritmo genético se debe detener cuando se alcance la solución óptima, pero esta generalmente se desconoce, por lo que se deben utilizar otros criterios de detención. Normalmente se usan dos criterios: iterar el algoritmo genético un número máximo de generaciones o detenerlo cuando no haya cambios en la población. Mientras no se cumpla la condición de término se hace lo siguiente:

Selección: Después de saber la aptitud de cada cromosoma se procede a elegir los cromosomas que serán cruzados en la siguiente generación. Los cromosomas con mejor aptitud tienen mayor probabilidad de ser seleccionados.

Cruzamiento: Es el principal operador genético, representa la reproducción, opera sobre los cromosomas para generar descendientes donde se combinan las características de los cromosomas padres.

Reemplazo: Una vez aplicados los operadores genéticos, se seleccionan los mejores individuos para conformar la población de la generación siguiente.

Mutación: Modifica al azar parte del cromosoma de los individuos permite alcanzar zonas del espacio de búsqueda que no estaban cubiertas por los individuos de la población actual.

Hipótesis y objetivos

3.1. Hipótesis

La respuesta óptica de un reflector fotónico unidimensional de silicio poroso puede ampliarse para un ancho de banda que comprenda todo el rango visible (de 400 nm a 800 nm) del espectro electromagnético modulando el camino óptico de la estructura multicapa y optimizando los parámetros de modulación a partir del uso de algoritmos genéticos.

3.2. Objetivos

Los objetivos de este proyecto son:

3.2.1. Objetivo general

Con el uso de algoritmos genéticos diseñar reflectores basados en cristales fotónicos modulados unidimensionales de silicio poroso que maximicen la reflexión en el rango visible del espectro electromagnético de 400 nm a 800 nm para posibles aplicaciones en concentradores de radiación solar.

3.2.2. Objetivos específicos

- Diseñar e implementar un programa de simulación que calcule la respuesta óptica de cristales fotónicos unidimensionales a través del formalismo de la matriz de transferencia con inclusiones de textura superficial.
- Implementar un programa de algoritmos genéticos que maximice la reflectancia de los cristales fotónicos de silicio poroso y determine los parámetros óptimos para la modulación.
- Hacer un análisis comparativo de la respuesta óptica de reflectores no modulados y modulados.

Metodología

4.1. Simulación de la respuesta óptica

El espectro de reflectancia es simulado como una función de las constantes ópticas y del espesor de las capas de la estructura. El modelo utilizado para simular la reflectancia es el método de la matriz de transferencia [30], implementado en el entorno Matlab[®]. Al inicio de la simulación se definen los valores de los siguientes parámetros de entrada: porosidad alta (P_H), porosidad baja (P_L), longitud de onda de centrado (λ_0), número de pares de capas (N_{pc}) o periodos, ángulo (θ) de incidencia de la radiación y la rugosidad RMS (σ). El índice de refracción del medio efectivo (aire/silicio) se determina en función de las porosidades, que se ajustan de acuerdo con la serie calibración para películas delgadas PSi reportadas en [8].

De acuerdo con la curva de calibración, la porosidad P_H y P_L se obtienen a partir del anodizado electroquímico de silicio a 60 mA/cm^2 y 5 mA/cm^2 , lo que resulta en porosidades de 0.45 ± 0.05 y 0.89 ± 0.05 respectivamente. Estas porosidades fueron elegidas para mantener la estabilidad mecánica de la estructura. Los espesores de las películas, determinados a partir de la Ec. (2.11), son función de la porosidad de la capa y de la longitud de onda de centrado, que deben satisfacer la condición de Bragg. El cálculo de la reflectancia con el uso de algoritmos genéticos se limitará a estructuras de interfaces idealmente suaves ($\sigma = 0$) y a incidencia normal ($\theta = 0$).

4.2. Cristales fotónicos modulados

En el caso de un reflector de Bragg no modulado (cristal fotónico periódico), todos los pares de capas (periodos) mantienen espesores constantes asociados a una única longitud de onda de centrado Ec. (2.11), es decir, la longitud de onda de centrado (λ_0) se mantiene constante, así como las porosidades en las capas, como consecuencia el ancho de banda de la estructura dependerá únicamente del contraste de índices de refracción.

Para el caso de un cristal fotónico modulado, la modulación es introducida a través de la variación de los índices de refracción, los espesores, o la longitud de onda del centrado usando una función de modulación. Sin embargo, es importante notar que las variables mencionadas no son independientes entre sí, por tanto la modulación de una de ellas implica la modulación de al menos una variable extra. La elección de modulación de alguna de las variables se limita a una decisión meramente experimental, es decir, si la variable es controlable y modulable experimentalmente. En este caso, los

índices de refracción del silicio poroso se mantienen constantes, y se modula la longitud de centrado del reflector, modificando los espesores de la estructura, usando la siguiente función genérica de modulación:

$$\lambda_i(z) = \lambda_0 + m(z), \quad (4.1)$$

donde z es un número entero entre 0 y N y representa el número de pares de capas o periodos y la función $\lambda_i(z)$ es una función discreta. El cristal modulado es simulado con una cantidad N de periodos, es decir, la estructura está conformada por un total de $2N$ películas delgadas individuales. Luego definimos el periodo (Λ_i) de cada par de capas en función de los espesores de las capas individuales, es decir, cada periodo es la suma del espesor de un par de películas de porosidades P_{Hi} y P_{Li} como sigue:

$$\Lambda_i = d_{Li} + d_{Hi}, \quad (4.2)$$

De tal manera que cada periodo representa a la celda unitaria de un reflector de Bragg centrado a una longitud de onda determinada por la Ec. (4.1) lo que determina los espesores de las capas con porosidades P_{Hi} y P_{Li} constantes a lo largo de la estructura como se muestra en la Fig. (4.1).

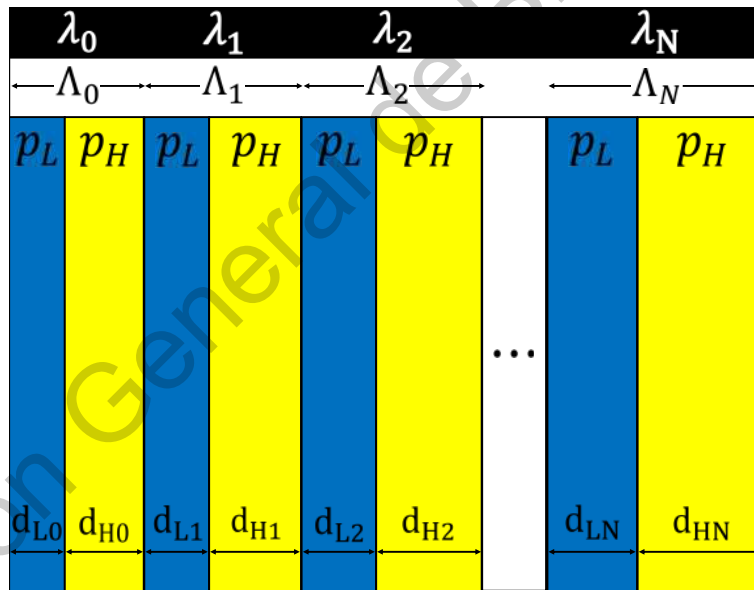


Fig. (4.1): Representación de la modulación de la longitud de onda de centrado en un cristal fotónico cuyo periodo no es constante. Se muestra que las porosidades son periódicas a lo largo del sistema mientras el centrado de longitud de onda y los espesores de las capas varían

Se utilizan 3 diferentes modulaciones para la Ec. (4.1) y se define un intervalo en las constantes de modulación con la intención de que $\lambda_i(z)$ este en el intervalo de 210 nm a 1100 nm. La modulación y las constantes de modulación están definidas en la Tabla (4.1).

Modulación ($m(z)$)	a_{min}	a_{max}	k_{min}	k_{max}	h_{min}	h_{max}
az^k	-1	10	0	2	-	-
$a \sin^2(kz + h)$	0	800	0	1.5	0	2π
$a \exp\left(-\frac{(z-k)^2}{2h^2}\right)$	0	600	0	30	0.002	0.2

Tabla (4.1): Funciones de modulación de la Ec. (4.1) (centrado de subespejos) y los intervalos de interés de estudio de las constantes de modulación.

4.3. Optimización de la reflectancia

La optimización de la reflectancia consiste en obtener los valores de las constantes de modulación que generan la configuración del cristal fotónico con variación espacial del centrado que más se asemeja a una respuesta óptica específica. Dicha respuesta óptica es la reflectancia objetivo ($R_0(\lambda)$), que es definida según la aplicación del dispositivo. En este caso, la reflectancia objetivo es un reflector perfecto en un rango de 400 nm a 800 nm, abarcando la zona visible del espectro electromagnético como muestra la Fig. (4.2).

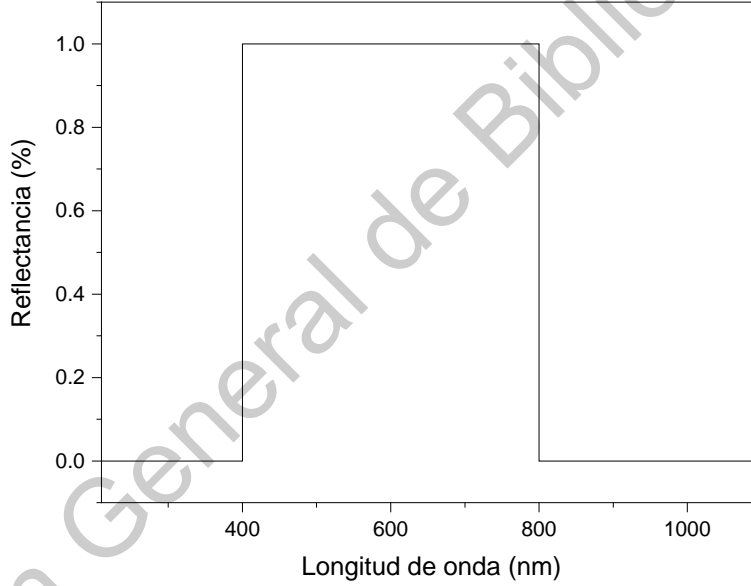


Fig. (4.2): Reflectancia objetivo para la optimización de la estructura de cristal fotónico en un rango de 400 nm a 800 nm

Para la optimización de la reflectancia, se usa un algoritmo de búsqueda basado en algoritmos genéticos [37, 38], donde se define un cromosoma de la siguiente forma:

$$\mathbf{V} = (\lambda_0, N_{cp}, a, k, h), \quad (4.3)$$

Los elementos del vector \mathbf{V} , denominados genes, hacen referencia a las constantes de las funciones de modulación de la Tabla (4.1), la longitud de onda de centrado del subespejo ($210 \leq \lambda_0 \leq 1100$) y la cantidad de celdas de la estructura ($5 \leq N_{cp} \leq 70$).

El algoritmo se inicializa con una cantidad P_{po} de individuos generados de manera aleatoria, que conformaran la población inicial y se reproducirán durante un número P_{ge} de generaciones o

hasta que el algoritmo converja a una solución que genere una función de error menor a la tolerancia definida por el usuario. Para todos los casos se toman poblaciones de P_{po} individuos que se reproducen durante P_{ge} generaciones para encontrar el individuo mejor adaptado que corresponde a la configuración de capas que optimiza la reflectancia de la estructura en el rango visible.

El esquema general del algoritmo genético es mostrado en la Fig. (4.3) y consiste en los siguientes pasos:

- **Crear población inicial aleatoria:** genera de manera aleatoria P_{po} individuos uniformemente distribuidos dentro del rango de cada gen. Las características y el número de la población dependen de las variables que se necesita para describir al sistema, por lo que un sistema con mayor número de genes debe tener una población mayor. Para todos los casos los genes corresponden a variables que deben poder ser representadas físicamente en un cristal fotónico.
- **Evaluación:** cada cromosoma es usado para simular la reflectancia de la estructura fotónica modulada ($R(\mathbf{V}, \lambda)$) usando el método de la matriz de transferencia Ec. (2.17). Se define la función de aptitud de un cromosoma como:

$$A_p(\mathbf{V}) = \sum_{\lambda_{min}}^{\lambda_{max}} \frac{R(\mathbf{V}, \lambda)}{(\lambda_{max} - \lambda_{min})R_O(\lambda)} \quad (4.4)$$

La Ec. (4.4) es una función que mide la reflectancia total integrada de un espejo en un rango específico, solo toma valores entre 0 y 1 o equivalentemente un porcentaje entre 0 y 100%. Un reflector se considera de mayor calidad si el valor de la Ec. (4.4) es cercano al 100% de reflectancia en el rango objetivo. Posteriormente la respuesta es evaluada con la función de ajuste (fitness function), que corresponde al error cuadrático medio, definida como:

$$F = \sqrt{\sum_{\lambda_{min}}^{\lambda_{max}} \frac{(R_O(\lambda) - R(\mathbf{V}, \lambda))^2}{(\lambda_{max} - \lambda_{min})}} \quad (4.5)$$

donde $\lambda_{min} = 400$ nm, $\lambda_{max} = 800$ nm, $R_O(\lambda)$ reflectancia objetivo, y $R(\mathbf{V}, \lambda)$ es la reflectancia simulada. Los individuos con el menor valor de F representan los individuos mejor adaptados. Un porcentaje de los individuos más aptos son utilizados para el proceso de reproducción. El número de individuos seleccionados debe ser par para garantizar el posterior proceso de emparejamiento y reproducción.

- **Reproducción y reemplazo:** la reproducción de los individuos para cada generación usa la reproducción sexual de dos individuos de la población, se selecciona un grupo de individuos mejor adaptados de manera aleatoria para formar las parejas que generan un par de hijos a través de cruce uniforme de genes. Los individuos no seleccionados para la reproducción son desechados.
- **Mutación y generación de nuevos genes:** con una probabilidad p_m , un gen, escogido de manera aleatoria de los individuos de la nueva generación, será mutado. La mutación corresponde a una fluctuación gaussiana al rededor del valor del gen mutado. Posteriormente, la población es completada por la introducción de nuevos individuos generados aleatoriamente que reponen a los individuos desechados de la generación anterior.

El procedimiento descrito anteriormente es esquematizado en la Fig. (4.3), el cual es repetido de manera sistemática por P_{ge} de generaciones o hasta que se encuentre una solución que genere una función de ajuste Ec. (4.5) menor a una tolerancia definida por el usuario.

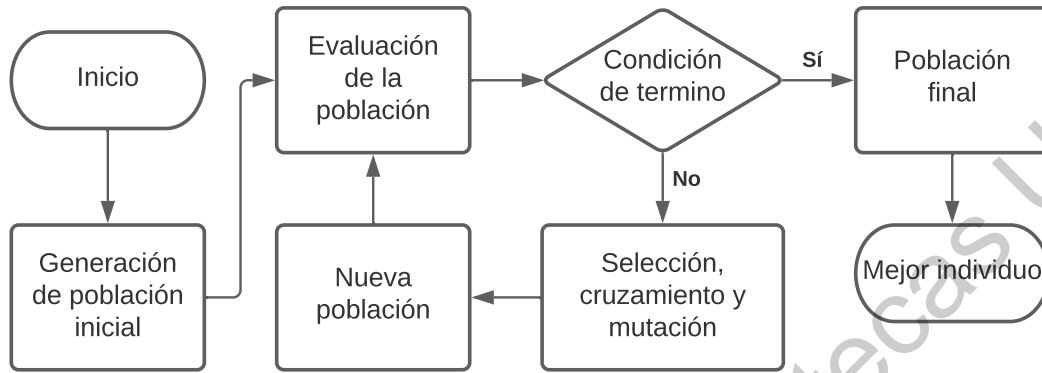


Fig. (4.3): Diagrama de flujo del algoritmo genético implementado. La reproducción del algoritmo genético es sexual de cruce uniforme heredando genes de ambos padres.

Resultados y discusión

5.1. Funcionamiento del algoritmo

Se aplica el algoritmo genético a la optimización de la reflectancia de los siguientes casos de cristales fotónicos en una dimensión:

- **Caso límite no modulado (Silicio/Aire):** Se simula la respuesta óptica de un cristal fotónico basado en silicio en bulto y aire, 100 % y 0 % de porosidad respectivamente. El centrado de la longitud de onda inicial (λ_0) de las capas está determinado por la Ec. (2.11) y el centrado no cambia respecto a la profundidad. El cromosoma usado para este caso contiene dos genes de la forma $\mathbf{V} = (\lambda_0, N_{pc})$.
- **Caso silicio poroso no modulado (PS_{45/89}):** Se simula la respuesta óptica de un cristal fotónico de silicio poroso con capas de 45 % y 89 % de porosidad, el centrado de la longitud de onda inicial de las capas está determinado por la Ec. (2.11) y el centrado no cambia respecto a la profundidad. El cromosoma es de la forma $\mathbf{V} = (\lambda_0, N_{pc})$.
- **Caso silicio poroso con modulación exponencial (PSE_{45/89}):** Se simula la respuesta óptica de un cristal fotónico de silicio poroso con capas de 45 % y 89 % de porosidad, el centrado de la longitud de onda inicial de las capas está determinado por la Ec. (2.11) y la variación espacial del centrado tiene la función de modulación:

$$\lambda_i(z) = \lambda_0 + az^k. \quad (5.1)$$

El cromosoma tiene cuatro genes de la forma $\mathbf{V} = (\lambda_0, N_{pc}, a, k)$.

- **Caso silicio poroso con modulación senoidal (PSS_{45/89}):** Se simula la respuesta óptica de un cristal fotónico de silicio poroso con capas de 45 % y 89 % de porosidad, el centrado de la longitud de onda inicial de las capas está determinado por la Ec. (2.11) y la variación espacial del centrado tiene la función de modulación:

$$\lambda_i(z) = \lambda_0 + a \sin^2(kz + h). \quad (5.2)$$

El cromosoma contiene cinco genes de la forma $\mathbf{V} = (\lambda_0, N_{pc}, a, k, h)$.

- **Caso silicio poroso con modulación gaussiana (PSG_{45/89}):** Se simula la respuesta óptica de un cristal fotónico de silicio poroso con capas de 45 % y 89 % de porosidad, el centrado de la longitud de onda inicial de las capas está determinado por la Ec. (2.11) y la variación espacial del centrado tiene la función de modulación:

$$\lambda_i(z) = \lambda_0 + a \exp\left(-\frac{(z-k)^2}{2h^2}\right). \quad (5.3)$$

El cromosoma es $\mathbf{V} = (\lambda_0, N_{pc}, a, k, h)$.

Se probó el algoritmo genético con el caso Silicio/Aire, cuyo cromosoma contiene dos genes, para $P_{po} = 20$ individuos durante $P_{ge} = 30, 50, 70$ y 100 generaciones para comprobar el correcto funcionamiento del algoritmo. Como se muestra en la Fig. (5.1), la aptitud del individuo con menor error de ajuste según la Ec. (4.5) de cada generación es graficada en función del número de generación. El algoritmo corre durante el número de generaciones definido por el usuario. El individuo mejor adaptado de la última generación evaluada será la solución buscada.

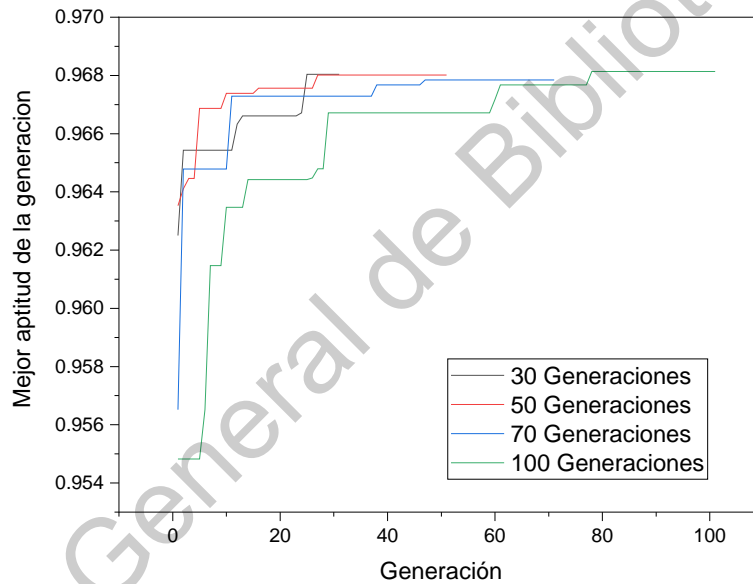


Fig. (5.1): Evolución de la población en función del número de generaciones donde cada iteración participan los algoritmos de reproducción, cruce y mutación. El programa genera la función de aptitud con el valor del mejor cromosoma de cada generación. Se hicieron las pruebas para $P_{ge} = 30, 50, 70$ y 100 generaciones con $P_{po} = 20$ individuos.

Se observa que a medida que pasan las generaciones la aptitud de los individuos aumenta. La mayor velocidad de crecimiento en la aptitud es desarrollada en las primeras 30 generaciones, alcanzado hasta un 96.7 % en promedio. Posteriormente el aumento de aptitud es poco significativo, acotando las corridas a un máximo de $P_{ge} = 100$ generaciones.

El tiempo que tardó el programa, desarrollado en Matlab[®], en hacer la prueba del algoritmo con el correspondiente número de generaciones es $t = 384$ s, 566 s, 748 s y 1037 s, el tiempo en cumplir la condición de término aumenta linealmente respecto al número de generaciones, en promedio la simulación de un cristal fotónico para un sistema periódico de silicio poroso es de 0.56 s. El tiempo

de simulación aumenta si la cantidad de capas en la estructura del cristal fotónico aumenta, ya que la matriz de transferencia (Ec. (2.17)) crece.

El número de individuos P_{po} y el número de generaciones P_{ge} que genera el menor valor de la Ec. (4.5), dependen de la complejidad del cromosoma. El número de genes que contiene el cromosoma o el tipo de variable del gen puede ampliar o disminuir significativamente el espacio de búsqueda.

5.2. Cristales fotónicos periódicos

Los reflectores de los casos: límite no modulado (Silicio/Aire) y silicio poroso no modulado (PS_{45/89}) diseñados con periodo constante tienen, según la Ec. (4.1), una función de modulación de la forma $m(z) = 0$ lo que corresponde a una longitud de onda de centrado que no varía a lo largo de la estructura. Los cromosomas definidos en el algoritmo genético para resolver estos casos son de la forma $\mathbf{V} = (\lambda_0, N_{pc})$ donde λ_0 y N_{pc} son la longitud de onda de centrado inicial y el número de pares de capas.

El ancho de banda de un reflector de cristal fotónico con periodo constante es medido con el método FWMH para el caso del silicio poroso, en lugar de la Ec. (2.12) que se usa sólo para el caso de un cristal infinito, no absorbente y con índices de refracción constante. El cálculo del ancho de banda fotónico con el método FWMH corresponde a una aproximación al ancho de banda teórico calculado con la Ec. (2.12).

5.2.1. Cristal fotónico de silicio y aire: caso límite

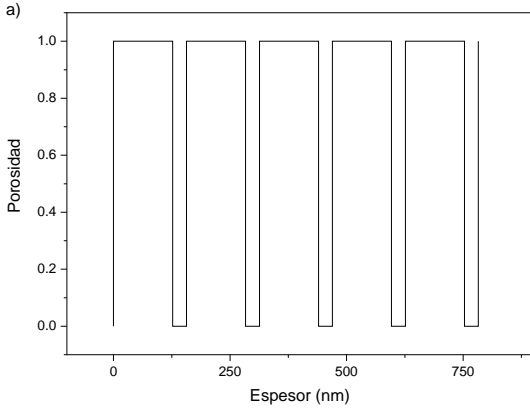
Para el reflector del caso límite, se toman los valores de porosidad que producen el mayor contraste de índice de refracción posible, esto es porosidad de $P_L = 0$ (silicio en bulto) y $P_H = 1$ (aire). Esto produce el máximo ancho de banda posible en una configuración ordenada de capas para una longitud de centrado fija.

La Fig. (5.2) muestra el perfil de la porosidad y la reflectancia resultante del uso del cromosoma $\mathbf{V} = (508, 5)$ que corresponden a la longitud de onda de centrado $\lambda_0 = 508$ nm y el número de pares de capas $N_{pc} = 5$, el cristal obtenido tiene un ancho de banda FWHM $\Delta\lambda = 420$ nm con un porcentaje de reflectancia del 96.83% de la reflectancia objetivo en el rango de 400 nm a 800 nm.

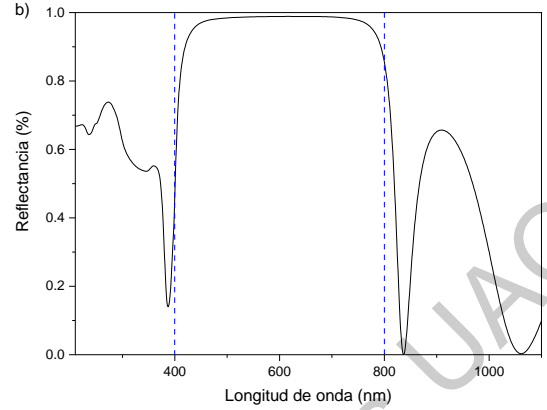
La Fig. (5.2a) es el perfil de porosidad simulado, que corresponde al valor de porosidad en función de la profundidad de la estructura, donde los espesores de las capas están determinados por la Ec. (2.11). La Fig. (5.2b) muestra la respuesta de reflectancia de la estructura optimizada obtenida con la Ec. (2.25), donde las líneas punteadas muestran la región espectral objetivo mostrada en la Fig. (4.2).

En este caso límite, se mantiene la configuración ordenada de un reflector de Bragg, en consecuencia el algoritmo genético solo itera la longitud de onda de centrado y la cantidad de bicapas (celdas), ambas variables enteras, para optimizar la respuesta óptica de la estructura y obtener un reflector de alta calidad específicamente en el rango de 400 - 800 nm (rango visible). A pesar de la poca cantidad de periodos, la estructura exhibe una brecha fotónica bien definida con una disminución en el nivel de interferencia comparado con una estructura con mayor número de capas, lo que hace que el algoritmo deseche las configuraciones con muchas capas.

La Fig. (5.3) muestra la representación gráfica de la reflectancia del sistema mostrado en la Fig. (5.2), basado en las especificaciones calculadas por el algoritmo de búsqueda a incidencia normal, en función de la longitud de onda de 210 nm a 1100 nm y el ángulo de incidencia del haz



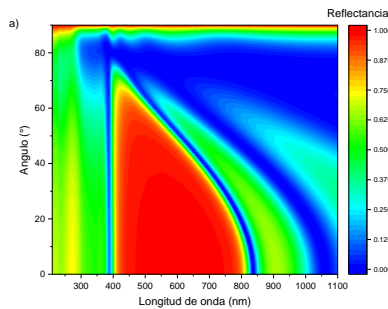
(a): Perfil de porosidad en función de la profundidad del cristal fotónico.



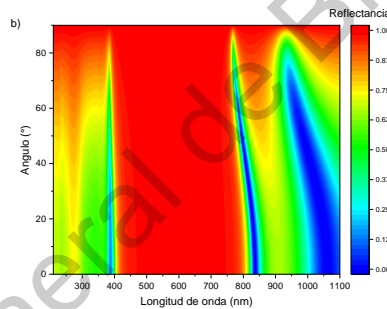
(b): Reflectancia a incidencia normal de luz no polarizada del reflector Silicio/Aire.

Fig. (5.2): Diseño y respuesta óptica del reflector del caso límite no modulado Silicio/Aire.

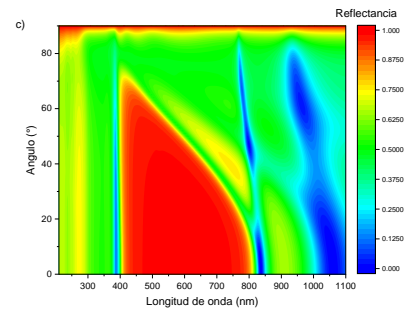
de luz de 0° a 90° para polarización tipo P (Fig. (5.3a)), S (Fig. (5.3b)) y la reflectancia promedio $R(\mathbf{V}, \lambda)$ (Fig. (5.3c)).



(a): Simulación de la reflectancia de la polarización tipo P.



(b): Simulación de la reflectancia de la polarización tipo S.



(c): Simulación de la reflectancia promedio $R(\mathbf{V}, \lambda)$.

Fig. (5.3): Respuesta óptica para polarización tipo P, S y la reflectancia promedio $R(\mathbf{V}, \lambda)$ de un reflector Silicio/Aire en función de la longitud de onda y el ángulo de incidencia del haz de luz.

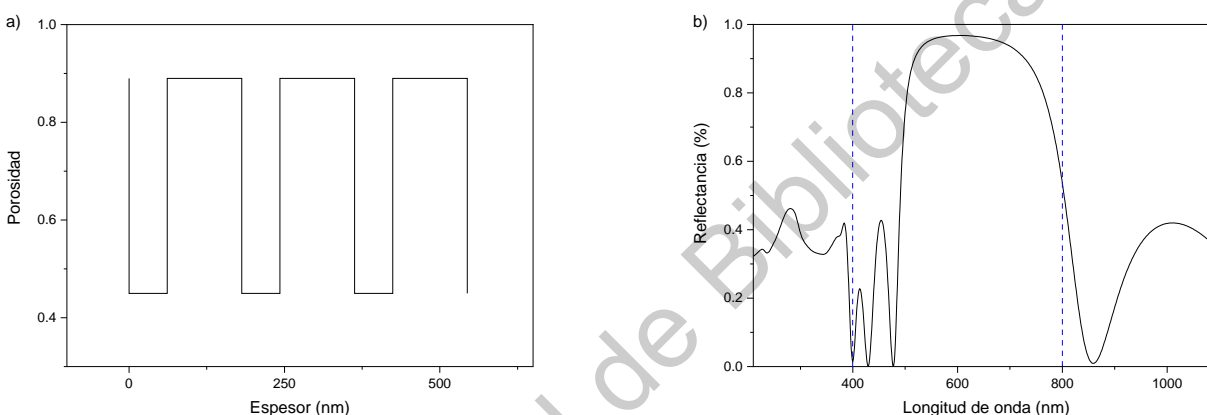
A incidencia no normal, la respuesta óptica (reflectancia) del cristal fotónico es dependiente de la polarización. Las Fig. (5.3b) y Fig. (5.3a) muestran la reflectancia de la estructura para polarización lineal S y P respectivamente. Se observa que para polarización P el ancho de banda fotónico se reduce alcanzando un mínimo en 78° de incidencia, reduciendo a 0.68 % de la reflectancia total integrada de la componente de polarización P reflejada, de manera análoga al ángulo de Brewster. Mientras tanto, el ancho de banda, para la polarización S no experimenta cambios significativos en función del ángulo de incidencia. Lo que indica que la estructura puede ser usada como un polarizador de reflexión. Finalmente, la respuesta total del cristal es calcula tomando el promedio de las dos polarizaciones en la Fig. (5.3c), mostrando que el ancho de banda fotónico se reduce, lo que indica que la estructura es iridiscente y además es un reflector no-omnidireccional, es decir, la intensidad total reflejada en una zona del espectro específica depende del ángulo de incidencia.

5.2.2. Silicio poroso con periodo constante

Para el reflector del caso silicio poroso no modulado se deciden los valores de porosidad, tomando en cuenta la estabilidad mecánica, que producen el mayor contraste de índice de refracción que pueden fabricarse en un laboratorio [8], esto es porosidad de $P_L = 0.45$ y $P_H = 0.89$ y el centrado de longitud de onda se queda fijo a lo largo de la estructura.

La Fig. (5.4) muestra el perfil de la porosidad y la reflectancia resultante del uso del cromosoma $\mathbf{V} = (602, 3)$ que corresponden a la longitud de onda de centrado $\lambda_0 = 602$ y el número de pares de capas $N_{pc} = 3$, el cristal obtenido tiene un ancho de banda FWHM $\Delta\lambda = 312$ nm con un porcentaje de reflectancia de 73.70 % respecto a la reflectancia objetivo en el rango de 400 nm a 800 nm.

La Fig. (5.4a) es el perfil de porosidad simulado, que corresponde al valor de porosidad en función de la profundidad de la estructura. La Fig. (5.4b) muestra la respuesta de reflectancia de la estructura optimizada, donde las líneas punteadas muestran la región espectral objetivo.



(a): Perfil de porosidad en función de la profundidad del cristal fotónico.

(b): Reflectancia a incidencia normal de luz no polarizada del reflector $PS_{45/89}$.

Fig. (5.4): Diseño y respuesta óptica del reflector del caso silicio poroso no modulado $PS_{45/89}$

Al igual que en el caso límite, el periodo del cristal fotónico permanece constante a lo largo de la estructura, y el algoritmo itera dos variables del sistema λ_0 y N_{pc} . También tiene un bajo número de capas, pero es el suficiente para formar un ancho de banda fotónico definido con una menor cantidad de interferencia. Este ancho de banda es menor que el del caso límite ya que el contraste entre índices de refracción es menor según la Ec. (2.12). Ya que el centrado es proporcional al ancho de banda el centrado es más cercano al rojo para poder maximizar la reflectancia relativa. Este reflector corresponde al reflector de más alta calidad, determinado por el algoritmo genético, con periodo constante y en el rango objetivo que se puede fabricar y que es mecánicamente estable.

Para los casos de un cristal fotónico con periodo constante la brecha fotónica no tiene defectos debido a su estructura ordenada, esta propiedad no se mantiene con una estructura que tiene variación en el periodo, causando pérdidas de reflectancia en zonas dentro del ancho de banda fotónico.

La Fig. (5.5) muestra la representación gráfica de la reflectancia del sistema mostrado en la Fig. (5.4), basado en las especificaciones calculadas por el algoritmo de búsqueda a incidencia normal, en función de la longitud de onda de 210 nm a 1100 nm y el ángulo de incidencia del haz de luz de 0° a 90° para polarización tipo P (Fig. (5.5a)), S (Fig. (5.5b)) y la reflectancia promedio

$R(\mathbf{V}, \lambda)$ (Fig. (5.5c)).

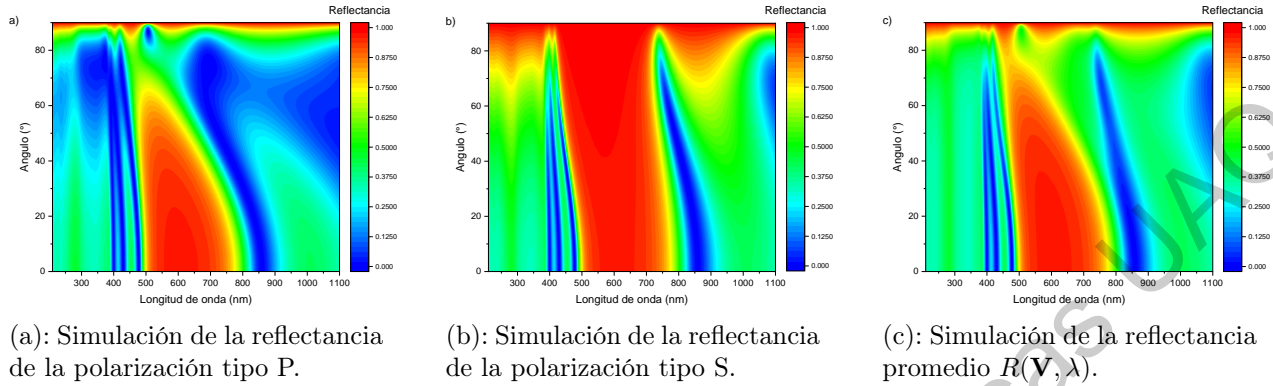


Fig. (5.5): Respuesta óptica para polarización tipo P, S y la reflectancia promedio $R(\mathbf{V}, \lambda)$ de un reflector $PS_{45/89}$ en función de la longitud de onda y el ángulo de incidencia del haz de luz.

Las Fig. (5.5a) y Fig. (5.5b) muestran la reflectancia de la estructura para polarización P y S respectivamente. Se observa que para polarización P el ancho de banda fotónico se reduce alcanzando un mínimo en 73° de incidencia, reduciendo a 24.55% la reflectancia integrada de la componente de polarización P reflejada, comparado con el caso (Silicio/Aire), el caso $PS_{45/89}$ no presenta una disminución completa de la luz con polarización P, como consecuencia el ancho de banda fotónico para luz no polarizada seguirá reflejando un porcentaje considerable de la radiación incluso en grandes ángulos de incidencia. El ancho de banda, para la polarización S no experimenta cambios significativos en función del ángulo de incidencia. La respuesta total del cristal Fig. (5.5c) muestra que el ancho de banda fotónico se cierra dando como resultado un reflector no-omnidireccional, pero a diferencia del caso Silicio/Aire, el ancho de banda no disminuye de manera drástica ya que el contraste de índices de refracción y el número de periodos es menor.

5.3. Cristales fotónicos aperiódicos

Para los reflectores denominados: silicio poroso con modulación exponencial ($PSE_{45/89}$), silicio poroso con modulación senoidal ($PSS_{45/89}$) y silicio poroso con modulación gaussiana ($PSG_{45/89}$), se eligen los valores de porosidad que producen el mayor contraste de índice de refracción posible que pueden fabricarse en un laboratorio, tomando en cuenta la estabilidad mecánica, esto es porosidad de $P_L = 0.45$ y $P_H = 0.89$. Estos casos son diseñados variando el centrado de longitud de onda espacialmente de manera que los espesores de las capas se modifican a lo largo de la estructura, cada una con su modulación particular. Los cromosomas definidos en el algoritmo genético para resolver estos casos son de la forma $\mathbf{V} = (\lambda_0, N_{pc}, a, k)$ para $PSE_{45/89}$ y $\mathbf{V} = (\lambda_0, N_{pc}, a, k, h)$ para $PSS_{45/89}$ y $PSG_{45/89}$, donde λ_0 son la longitud de onda de centrado inicial, N_{pc} el número de pares de capas y a , k y h son las constantes de modulación de la función $m(z)$ como muestra la Tabla (4.1).

5.3.1. Silicio poroso con modulación exponencial

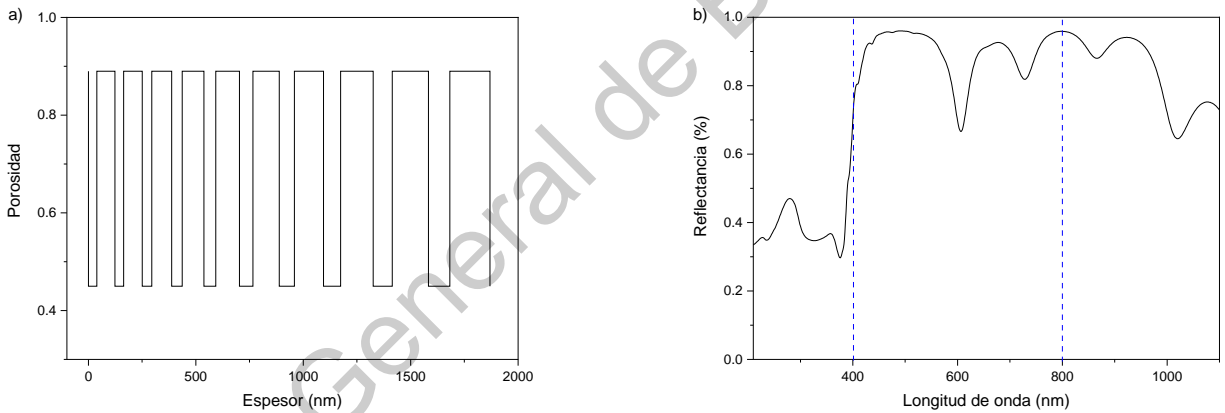
Para el reflector del caso silicio poroso con modulación exponencial, el centrado de longitud de onda según la Ec. (4.1) corresponde a una función de modulación de la forma

$$m(z) = az^k, \quad (5.4)$$

por lo que el centrado varía espacialmente a lo largo de la estructura, modificando el periodo de esta.

La Fig. (5.6) muestra el perfil de la porosidad, la reflectancia resultante y la modulación de la longitud de onda de centrado del uso del cromosoma $\mathbf{V} = (444, 10, 9.9019, 1.7616)$, que corresponden a la longitud de onda de centrado $\lambda_0 = 444$ nm, el número de pares de capas $N_{pc} = 10$ y las constantes de modulación de la Ec. (5.4) $a = 9.9019$ y $k = 1.7616$, generado con el uso del algoritmo genético con $P_{po} = 40$ y $P_{ge} = 300$ y genera un valor de 89.68 % de reflectancia en el rango de 400 nm a 800 nm.

La Fig. (5.6a) es el perfil de porosidad simulado, que corresponde al valor de porosidad en función de la profundidad de la estructura, donde los espesores de las capas están determinados con λ_i por la Ec. (2.11) con la modulación de la Ec. (5.1). La Fig. (5.6b) muestra la respuesta de reflectancia de la estructura optimizada obtenida con la Ec. (2.25), donde las líneas punteadas muestran la región espectral objetivo y los puntos muestran las microcavidades dentro de la zona objetivo mostrada en la Fig. (4.2).



(a): Perfil de porosidad en función de la profundidad del cristal fotónico.

(b): Reflectancia a incidencia normal de luz no polarizada del reflector $PSE_{45/89}$.

Fig. (5.6): Diseño y respuesta óptica del reflector del caso silicio poroso con modulación exponencial $PSE_{45/89}$.

La configuración ordenada de un reflector de Bragg ya no se mantiene, en consecuencia el algoritmo genético debe iterar las constantes de modulación, además de la longitud de onda de centrado y la cantidad de bicapas para optimizar la respuesta óptica de la estructura y obtener un reflector de alta calidad en el rango de 400-800 nm.

Aun cuando se logra un 89.68 % de la reflectancia objetivo, la configuración de la estructura genera una brecha fotónica que produce una reflectancia adicional de 84.35 %, tomando en cuenta una región de 800 nm a 1100 nm dado que la modulación de la longitud de onda de centrado aumenta hasta la zona del infrarrojo en las capas más profundas.

Dentro de la zona espectral objetivo se generan 2 defectos de tipo microcavidad debido a que la modulación rompe la periodicidad del cristal fotónico, donde los primeros subespejos, que son los más cercanos a la superficie, en conjunto son de un tamaño comparable a las longitudes onda del infrarrojo, por lo cual se comportan de manera efectiva como una capa que satisface las condiciones de interferencia. Los defectos dentro de la zona objetivo se observan centrados en $\lambda_{c1} = 606$ nm y $\lambda_{c2} = 728$ nm con un factor de calidad $Q_1 = 16.8333$ y $Q_2 = 16.9302$.

La Fig. (5.7) muestra la representación gráfica de la reflectancia del sistema mostrado en la Fig. (5.6), basado en las especificaciones calculadas por el algoritmo de búsqueda a incidencia normal, en función de la longitud de onda de 210 nm a 1100 nm y el ángulo de incidencia del haz de luz de 0° a 90° para polarización tipo P (Fig. (5.7a)), S (Fig. (5.7b)) y la reflectancia promedio $R(\mathbf{V}, \lambda)$ (Fig. (5.7c)).

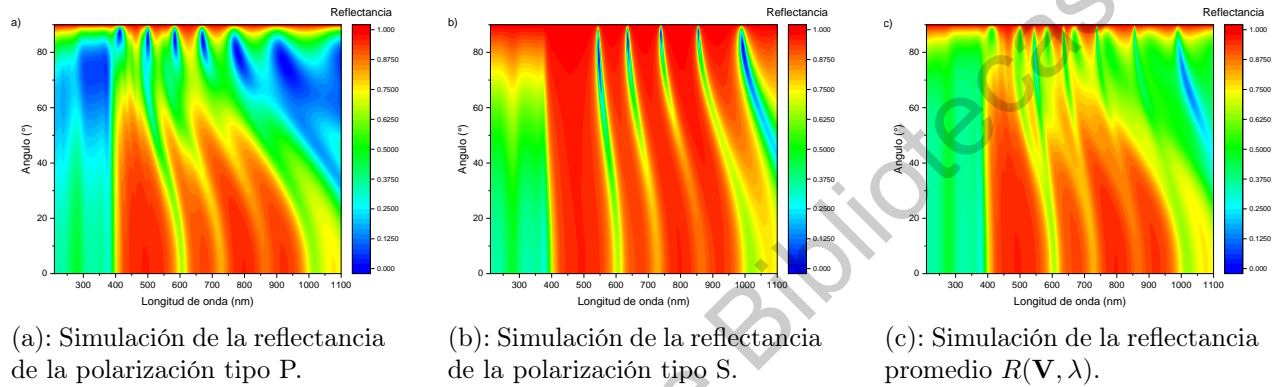
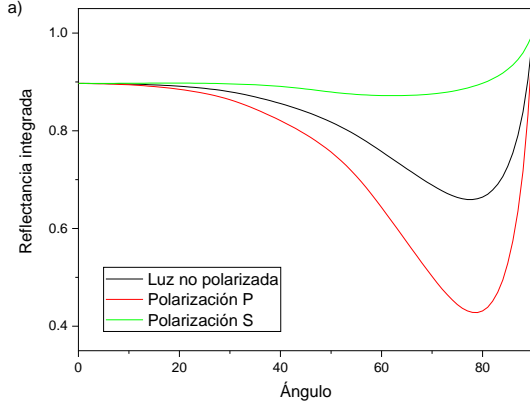


Fig. (5.7): Respuesta óptica para polarización tipo P, S y la reflectancia promedio $R(\mathbf{V}, \lambda)$ de un reflector PSE_{45/89} en función de la longitud de onda y el ángulo de incidencia del haz de luz.

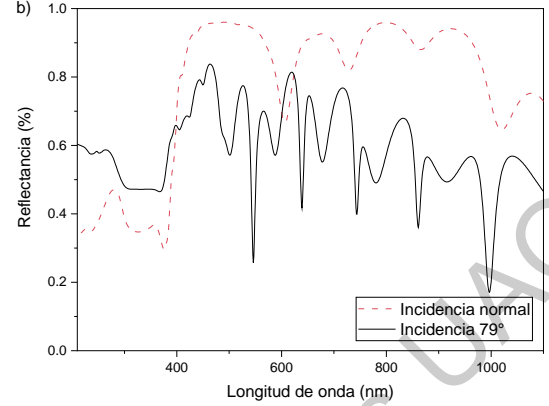
Para la polarización P hay una disminución en la reflectancia integrada y observamos que la localización de los defectos en el ancho de banda es en una longitud de onda menor a medida que el ángulo de incidencia aumenta, lo que hace que el ancho de banda en dicha polarización disminuya. En la polarización tipo S se observa un desplazamiento hacia longitudes de onda menores en la localización de los defectos con respecto a la localización a un ángulo de incidencia normal pero en menor medida que el desplazamiento que presenta en la polarización P. Finalmente, se observa que los efectos en la luz no polarizada corresponden a la disminución de la reflectancia total y el aumento del número de defectos dentro de la zona objetivo conforme aumenta el ángulo de incidencia.

La Fig. (5.8) muestra el comportamiento de la reflectancia en función del ángulo. La Fig. (5.8a) muestra la reflectancia total integrada determinada por la Ec. (4.4) en un rango de 400 nm a 800 nm con luz con polarización P, S y luz no polarizada en función del ángulo de incidencia de 0° a 90° . La Fig. (5.8b) muestra la comparación entre los espectros de reflectancia para incidencia normal e incidencia a 79° que corresponde a los valores máximo y mínimo de la reflectancia total integrada.

En la Fig. (5.8a) se observa una gráfica con un comportamiento similar al de la reflexión en función del ángulo descrito para una interfaz simple. A incidencia normal la reflexión integrada es igual para ambas polarizaciones y se observa una disminución gradual hasta un punto de mínima reflectancia similar al ángulo de Brewster, después la reflectancia aumenta hasta llegar a una asíntota en 90° . La polarización tipo S se mantiene aproximadamente constante, mientras que en la polarización P la disminución de la reflectancia es cuantiosa. Mientras tanto, en la Fig. (5.8b) muestra a mayor detalle la deformación del espectro de reflectancia y la formación de defectos, en



(a): Reflectancia total integrada en función del ángulo de incidencia para polarización tipo P y S.



(b): Reflectancia a incidencia normal y a incidencia de 79° de luz no polarizada del reflector PSE_{45/89}.

Fig. (5.8): Reflectancia total integrada en el rango objetivo en función del ángulo de incidencia y respuesta óptica del reflector PSE_{45/89} a incidencia normal y a incidencia de 79° de luz no polarizada.

específico se generan 2 defectos por cada defecto en el espectro a incidencia normal debido a efecto de polarización. Adicionalmente, ambos defectos se encuentran centrados a una longitud de onda más pequeña que el defecto a incidencia normal.

5.3.2. Silicio poroso con modulación senoidal

Para el reflector del caso silicio poroso con modulación senoidal, el centrado de longitud de onda según la Ec. (4.1) corresponde a una función de modulación de la forma

$$m(z) = a \sin^2(kz + h), \quad (5.5)$$

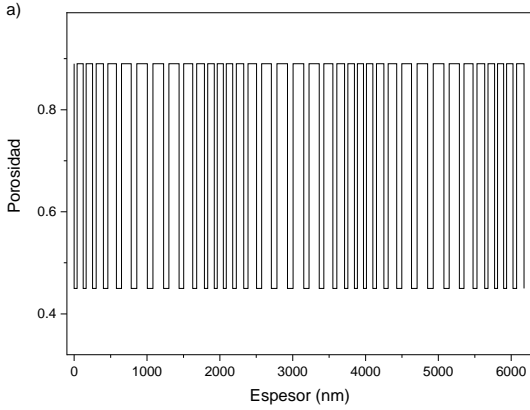
por lo que el centrado varía espacialmente a lo largo de la estructura, modificando el periodo de esta.

La Fig. (5.9) muestra el perfil de la porosidad, la reflectancia resultante y la modulación de la longitud de onda de centrado del uso del cromosoma $\mathbf{V} = (443, 36, 288.1109, 0.2856, 0.0557)$, que corresponden a la longitud de onda de centrado $\lambda_0 = 443$ nm, el número de pares de capas $N_{pc} = 36$ y las constantes de modulación de la Ec. (5.5) $a = 288.1109$, $k = 0.2856$ y $h = 0.0557$, generado con el uso del algoritmo genético con $P_{po} = 60$ y $P_{ge} = 200$ y genera un valor de 91.67% de reflectancia en el rango de 400 nm a 800 nm.

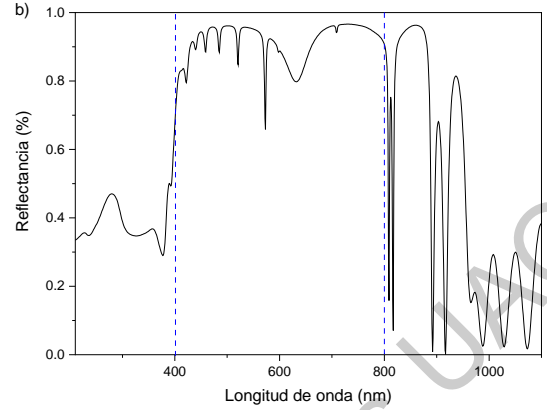
La Fig. (5.9a) es el perfil de porosidad simulado, que corresponde al valor de porosidad en función de la profundidad de la estructura, donde los espesores de las capas están determinados con λ_i por la Ec. (2.11) con la modulación de la Ec. (5.2). La Fig. (5.9b) muestra la respuesta de reflectancia de la estructura optimizada, donde las líneas punteadas muestran la región espectral objetivo y los puntos muestran las microcavidades dentro de la zona objetivo.

Para esta configuración el algoritmo itera 5 genes diferentes por cada cromosoma, 2 genes pertenecen a los números enteros y 3 son números reales, por lo que el campo de búsqueda para los casos PSS_{45/89} y PSS_{45/89} corresponde al más extenso en este trabajo.

En este caso se tiene una función de modulación periódica completando 3 periodos de la función $m(z)$, el periodo más pequeño es $\Lambda_{1,12,23,24} = 123.3440$ nm y el periodo más grande es



(a): Perfil de porosidad en función de la profundidad del cristal fotónico.

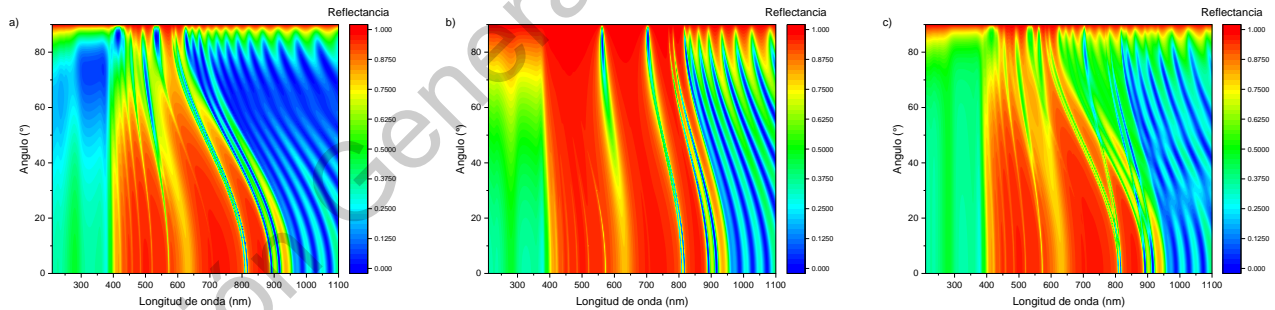


(b): Reflectancia a incidencia normal de luz no polarizada del reflector PSS_{45/89}.

Fig. (5.9): Diseño y respuesta óptica del reflector del caso silicio poroso con modulación senoidal PSS_{45/89}.

$\Lambda_{7,18,29} = 223.9181$ nm. Se considera a este caso un reflector de alta calidad y tiene 8 defectos de tipo microcavidad dentro de la zona objetivo, de los cuales los más significativos están centrados en $\lambda_{c1} = 573$ nm y $\lambda_{c2} = 632$ nm con un factor de calidad $Q_1 = 191$ y $Q_2 = 12.1538$.

La Fig. (5.10) muestra la representación gráfica de la reflectancia del sistema mostrado en la Fig. (5.9), basado en las especificaciones calculadas por el algoritmo de búsqueda a incidencia normal, en función de la longitud de onda de 210 nm a 1100 nm y el ángulo de incidencia del haz de luz de 0° a 90° para polarización tipo P (Fig. (5.10a)), S (Fig. (5.10b)) y la reflectancia promedio $R(\mathbf{V}, \lambda)$ (Fig. (5.10c)).



(a): Simulación de la reflectancia de la polarización tipo P.

(b): Simulación de la reflectancia de la polarización tipo S.

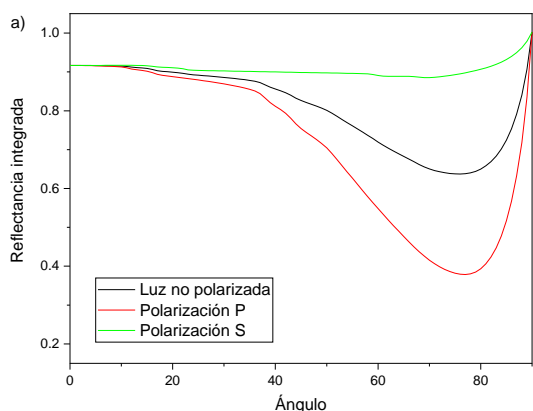
(c): Simulación de la reflectancia promedio $R(\mathbf{V}, \lambda)$.

Fig. (5.10): Respuesta óptica para polarización tipo P, S y la reflectancia promedio $R(\mathbf{V}, \lambda)$ de un reflector PSS_{45/89} en función de la longitud de onda y el ángulo de incidencia del haz de luz.

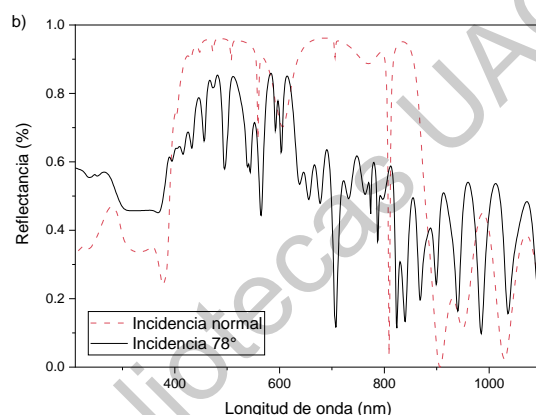
La intensidad de la luz disminuye de manera considerable para la polarización P, mientras que en la polarización S el valor de la reflectancia se mantiene similar para todos los ángulos, ambas polarizaciones hacen que los defectos tipo microcavidad se corran al azul, pero en diferentes proporciones dependiendo el tipo de polarización, lo que hace que la respuesta final tenga múltiples defectos en grandes ángulos de incidencia lo que provoca una gran disminución de la reflectancia

del cristal fotónico.

La Fig. (5.11) muestra el comportamiento de la reflectancia en función del ángulo. La Fig. (5.11a) muestra la reflectancia total integrada en el intervalo 400 nm a 800 nm de con luz con polarización P, S y luz no polarizada en función del ángulo de incidencia de 0° a 90°. La Fig. (5.11b) muestra la comparación entre los espectros de reflectancia para incidencia normal e incidencia a 78° que corresponde a los valores máximo y mínimo de la reflectancia total integrada.



(a): Reflectancia total integrada en función del ángulo de incidencia para polarización tipo P y S.



(b): Reflectancia a incidencia normal y a incidencia de 78° de luz no polarizada del reflector PSS_{45/89}.

Fig. (5.11): Reflectancia total integrada en el rango objetivo en función del ángulo de incidencia y respuesta óptica del reflector PSS_{45/89} a incidencia normal y a incidencia de 78° de luz no polarizada.

En la Fig. (5.8a) se observa que a incidencia normal la reflexión integrada es igual para ambas polarizaciones, la polarización tipo S mantiene un valor de reflectancia aproximadamente constante para todos los ángulos de incidencia, mientras que en la polarización P tiene una disminución significativa a partir de 40° con un mínimo en 78°, luego la reflectancia aumenta asintóticamente hasta 90°. Mientras tanto, en la Fig. (5.8b) se observa la deformación del espectro de reflectancia y la formación de más defectos generados por efecto de la polarización.

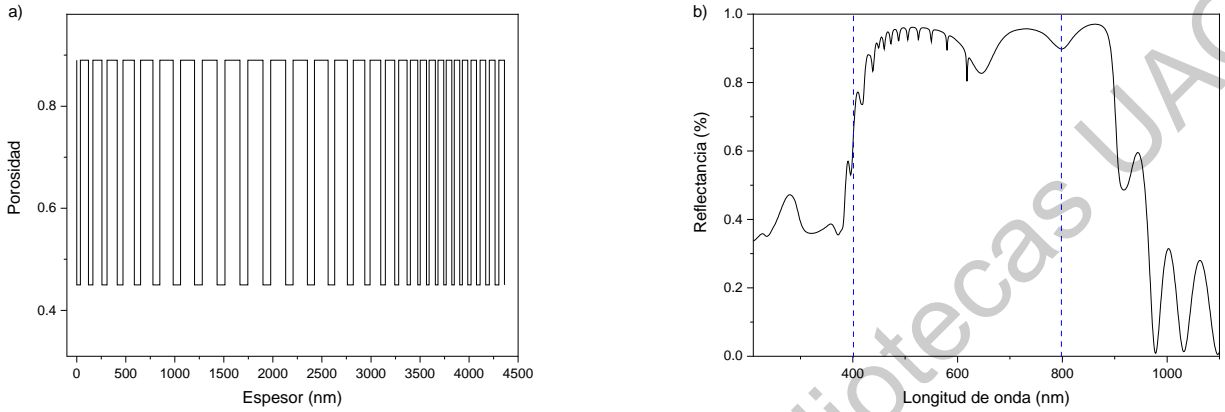
5.3.3. Silicio poroso con modulación gaussiana

Para el caso del reflector denominado caso silicio poroso con modulación gaussiana PSG_{45/89}, el centrado de longitud de onda según la Ec. (4.1) corresponde a una función de modulación de la forma

$$m(z) = a \exp\left(-\frac{(z-k)^2}{2h^2}\right). \quad (5.6)$$

La Fig. (5.12) muestra el perfil de la porosidad, la reflectancia resultante y la modulación de la longitud de onda de centrado del uso del cromosoma $\mathbf{V} = (270, 29, 491.8094, 8.6650, 0.1698)$, que corresponden a la longitud de onda de centrado $\lambda_0 = 270$ nm, el número de pares de capas $N_{pc} = 29$ y las constantes de modulación de la Ec. (5.5) $a = 491.8094$, $k = 8.6650$ y $h = 0.1698$, generado con el uso del algoritmo genético con $P_{po} = 60$ y $P_{ge} = 200$ y genera un valor de 91.25 % de reflectancia en el rango de 400 nm a 800 nm.

La Fig. (5.12a) es el perfil de porosidad simulado, que corresponde al valor de porosidad en función de la profundidad de la estructura, donde los espesores de las capas están determinados con λ_i por la Ec. (2.11) con la modulación de la Ec. (5.3). La Fig. (5.12b) muestra la respuesta de reflectancia de la estructura optimizada, donde las líneas punteadas muestran la región espectral objetivo y los puntos muestran las microcavidades dentro de la zona objetivo.



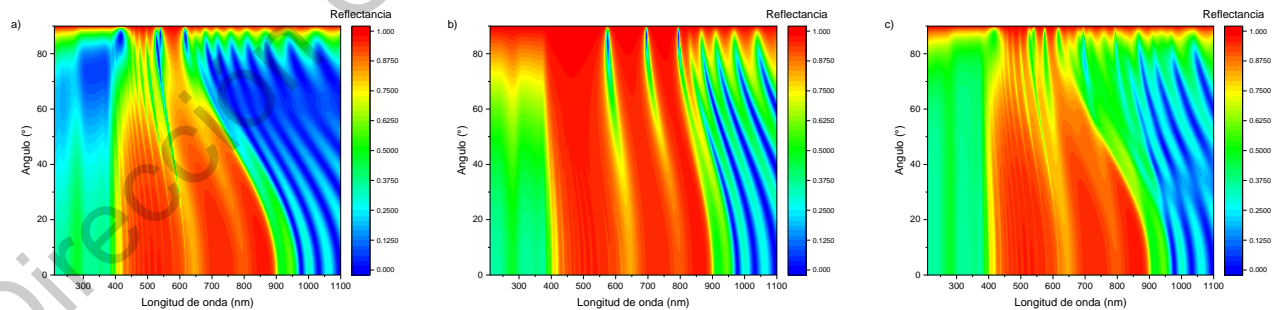
(a): Perfil de porosidad en función de la profundidad del cristal fotónico.

(b): Reflectancia a incidencia normal de luz no polarizada del reflector $PSG_{45/89}$.

Fig. (5.12): Diseño y respuesta óptica del reflector del caso silicio poroso con modulación gaussiana $PSG_{45/89}$.

La estructura tiene un periodo máximo $\Lambda_{10} = 234.5404$ nm. El reflector se considera de alta calidad pese al alto número de defectos en la zona objetivo, ya que estos defectos no son significativos con excepción del defecto centrado en $\lambda_c = 645$ nm con un factor de calidad $Q = 10.5737$.

La Fig. (5.13) muestra la representación gráfica de la reflectancia del sistema mostrado en la Fig. (5.12), basado en las especificaciones calculadas por el algoritmo de búsqueda a incidencia normal, en función de la longitud de onda de 210 nm a 1100 nm y el ángulo de incidencia del haz de luz de 0° a 90° para polarización tipo P (Fig. (5.13a)), S (Fig. (5.13b)) y la reflectancia promedio $R(\mathbf{V}, \lambda)$ (Fig. (5.13c)).



(a): Simulación de la reflectancia de la polarización tipo P.

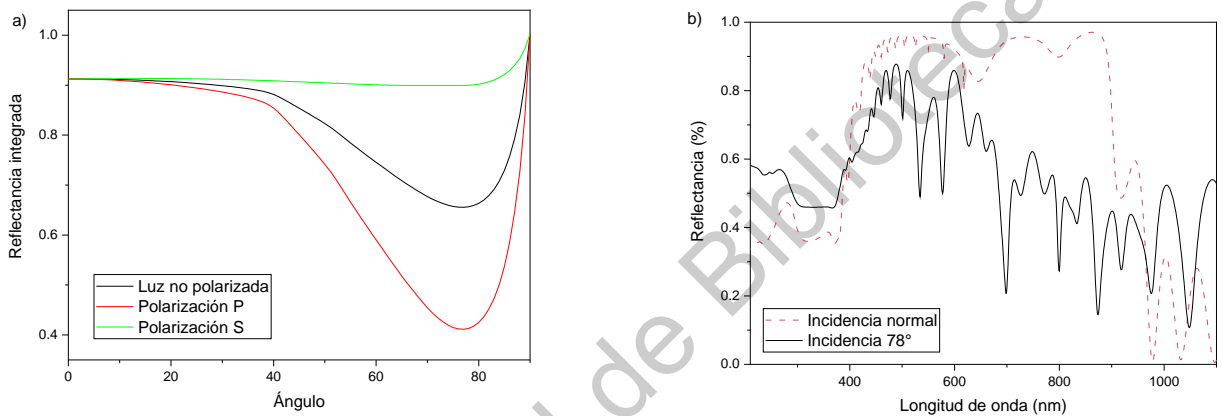
(b): Simulación de la reflectancia de la polarización tipo S.

(c): Simulación de la reflectancia promedio $R(\mathbf{V}, \lambda)$.

Fig. (5.13): Respuesta óptica para polarización tipo P, S y la reflectancia promedio $R(\mathbf{V}, \lambda)$ de un reflector $PSG_{45/89}$ en función de la longitud de onda y el ángulo de incidencia del haz de luz.

Lo defectos vistos en el espectro de reflectancia a incidencia normal se acentúan en la polarización P causando una pérdida importante de la radiación reflejada, mientras que en la polarización S los defectos más pequeños disminuyen su profundidad y el defecto más significativo dentro del rango objetivo aumenta su calidad. Para ambas polarizaciones los defectos se corren al azul. En la reflectancia no polarizada, aunque no aumenta el número de defectos, ya que se desvanecen algunos por contribución de la polarización S, existen defectos que se corren desde el infrarrojo a la zona del rango objetivo que representan una gran pérdida en la reflectancia integrada en ángulos grandes.

La Fig. (5.14) muestra el comportamiento de la reflectancia en función del ángulo. La Fig. (5.14a) muestra la reflectancia total integrada en el intervalo de 400 nm a 800 nm con luz con polarización P, S y luz no polarizada en función del ángulo de incidencia de 0° a 90° . La Fig. (5.14b) muestra la comparación entre los espectros de reflectancia para incidencia normal e incidencia a 78° que corresponde a los valores máximo y mínimo de la reflectancia total integrada.



(a): Reflectancia total integrada en función del ángulo de incidencia para polarización tipo P y S.

(b): Reflectancia a incidencia normal y a incidencia de 78° de luz no polarizada del reflector $PSG_{45/89}$.

Fig. (5.14): Reflectancia total integrada en el rango objetivo en función del ángulo de incidencia y respuesta óptica del reflector $PSG_{45/89}$ a incidencia normal y a incidencia de 78° de luz no polarizada.

Para este caso, el comportamiento de la reflexión en función del ángulo no cambia respecto a los otros, en 40° empieza un descenso en la reflectancia integrada llegando a un mínimo en 78° con un valor de 65.55 %. En la Fig. (5.8b) se observa la deformación del espectro de reflectancia, también los defectos se profundizan haciendo que el ancho de banda sea menor y con menor intensidad.

Finalmente la Tabla (5.1) muestra el resultado de la reflectancia a incidencia normal (fenotipo) y los cromosomas que caracterizan al sistema (genotipo) de los casos cuya optimización se hizo con la ayuda de algoritmos genéticos. El caso con la mayor reflectancia es el caso límite, que refleja casi toda la radiación de la zona visible del espectro y ya que es una estructura periódica no hay formación de defectos en el ancho de banda pero, ya que es un caso hipotético, esta estructura no puede usarse como un reflector. El caso $PS_{45/89}$ optimiza la reflectancia de una estructura periódica con propiedades que pueden fabricarse en un laboratorio, pero la pérdida de luz en la reflexión hace que no sea el reflector óptimo para aplicaciones solares. Con la introducción de las modulaciones, la reflectancia aumenta entre el 16 % y el 18 % comparado con la estructura periódica que genera el valor más alto de reflectancia siendo la que mejor respuesta obtiene el caso $PSS_{45/89}$.

Estructura	Reflectancia incidencia normal	Cromosoma				
		λ_0	N_{pc}	a	k	h
Silicio/Aire	96.83 %	508	5	-	-	-
PS _{45/89}	73.70 %	602	3	-	-	-
PSE _{45/89}	89.68 %	444	10	9.9019	1.7616	-
PSS _{45/89}	91.67 %	443	36	288.1109	0.2856	0.0557
PSG _{45/89}	91.25 %	270	29	491.8094	8.6650	0.1698

Tabla (5.1): Reflectancia a incidencia normal y cromosomas de los reflectores optimizados con algoritmos genéticos

5.4. Colorimetría

Se puede transformar el espectro de reflectancia de un cristal fotónico a coordenadas RGB con un programa automatizado, que toma los valores de la reflectancia de 390 nm hasta 830 nm con un intervalo de 5 nm y devuelve los valores en coordenadas RGB según el espacio de trabajo NTSC RGB en un intervalo de 0 a 255. [39]

La Fig. (5.15) muestra la representación gráfica de una muestra de silicio poroso con las características encontradas por el algoritmo genético, los rectángulos grises representan una muestra de silicio monocristalino mientras los círculos dentro representan el color que tendría la película de silicio poroso fabricada. Las mediciones de colorimetría se hicieron a incidencia normal y a 78°

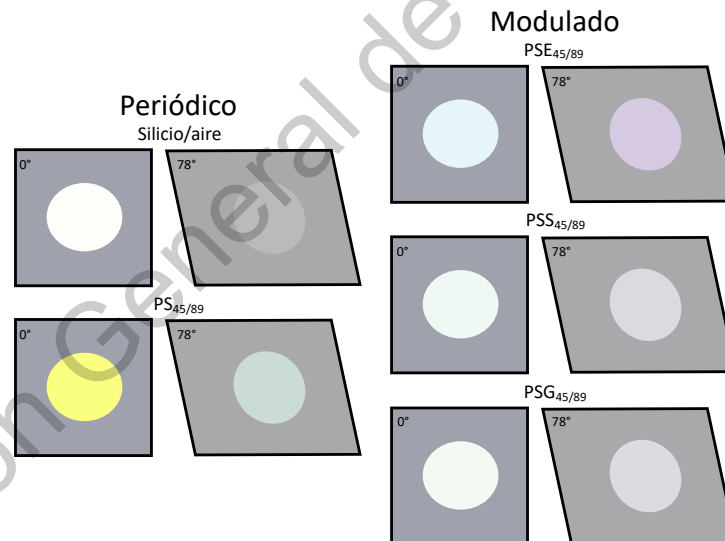


Fig. (5.15): Representación gráfica del color de silicio poroso en las muestras de silicio monocristalino para los casos presentados en la Tabla (5.1).

Conclusión

Se desarrolló e implementó un algoritmo basado en Matriz de transferencia y algoritmos genéticos para optimizar la reflectancia de cristales fotónicos en el rango visible (400 nm - 800 nm). El cual fue aplicado en el diseño de estructura multicapas de silicio poroso ordenadas y moduladas.

El caso límite de estudio indica que la máxima reflectancia físicamente posible con el contraste de índices de refracción del silicio puro y aire es del 96.83 %. Este caso se denomina límite, porque representa un escenario que experimentalmente es complejo de lograr debido a que las capas de Si no tendrían sustentación mecánica. La reflectancia máxima teórica es la obtenida a través de la configuración del caso límite.

Se realizó la simulación de una estructura fotónica periódica y ordenada usando un contraste de porosidad que permite la estabilidad mecánica de la estructura de silicio poroso, donde se obtiene una reflectancia de 73.67 %. Este caso representa la mayor reflectancia en el rango visible que se puede obtener con una configuración ordenada. El espectro de reflectancia no tiene defectos al ser una estructura periódica pero, existe interferencia en longitudes de onda cercanas al azul.

A partir de la inclusión de modulaciones en la variación espacial del centrado, el espacio de búsqueda para la estructura óptima y el tiempo de convergencia de la solución crecen a medida que los genes del cromosoma aumentan de tamaño y complejidad.

Se simularon y optimizaron estructuras fotónicas con modulación exponencial, senoidal y gaussiana obteniendo reflectancias en el rango visible como muestra la Tabla (5.1). La modulación aumenta la reflexión entre 16 % y 18 % comparada con la configuración ordenada que produce la reflectancia máxima posible. Las modulaciones que generan la mayor reflectancia son PSS_{45/89} y PSG_{45/89} siendo PSS_{45/89} mayor por una diferencia de 0.42 %, seguidos de PSE_{45/89} con una diferencia de 1.57 % respecto a PSG_{45/89}.

Los espejos estructurales obtenidos no son omnidireccionales, en general la reflectancia total empieza a reducirse al llegar a 40° de manera acelerada, principalmente con la reducción de la componente P de la polarización, mientras que la S permanece aproximadamente constante hasta llegar a un mínimo de reflectancia en 78° - 79° para después aumentar de forma asintótica hasta 90°.

Los espejos estructurales disminuyen la reflectancia ya que se forman más defectos que muestran un corrimiento al azul y una mayor disminución de la reflectancia respecto a un ángulo de incidencia normal. Por lo tanto, si una estructura tiene defectos o interferencia a incidencia normal en el infrarrojo, a alto ángulos de incidencia se corren hacia la zona objetivo (visible). El corrimiento al azul del centrado de los defectos se explica debido al cambio del camino óptico en función del ángulo

de incidencia ($n_i d_i \cos(\theta_i)$), que es una función decreciente con su máximo en 0° .

Las estructuras obtenidas tienen una calidad superior al 90 % con espesores de capa individual en rango experimentalmente admisibles (mayores a 40 nm) y con un espesor total de la estructura menor $6 \mu\text{m}$. Esto representa una ventaja en la tecnología de recubrimientos, dado que el espesor es pequeño comparado con otras estructuras reflectoras de óxidos semiconductores o metálicos.

Dirección General de Bibliotecas UAQ

Bibliografía

- [1] J M González Santaló. «La generación eléctrica a partir de combustibles fósiles». En: *Boletín IIE* (2009), págs. 143-151.
- [2] Nadarajah Kannan y Divagar Vakeesan. «Solar energy for future world:-A review». En: *Renewable and Sustainable Energy Reviews* 62 (2016), págs. 1092-1105. DOI: [10.1016/j.rser.2016.05.022](https://doi.org/10.1016/j.rser.2016.05.022).
- [3] John D Joannopoulos y col. *Photonic crystals*. Princeton university press, 2011.
- [4] A Cable. *PF40-03-P01 - Ø4"Protected Silver Mirror*, 2009. URL: <https://www.thorlabs.com/thorproduct.cfm?partnumber=PF40-03-P01> (visitado 28-06-2021).
- [5] V Torres-Costa y RJ Martin-Palma. «Application of nanostructured porous silicon in the field of optics. A review». En: *Journal of materials science* 45.11 (2010), págs. 2823-2838. DOI: [10.1007/s10853-010-4251-8](https://doi.org/10.1007/s10853-010-4251-8).
- [6] Michael J Sailor. *Porous silicon in practice: preparation, characterization and applications*. John Wiley & Sons, 2012.
- [7] Ulrike Grüning y Arthur Yelon. «Capillary and Van der Waals forces and mechanical stability of porous silicon». En: *Thin Solid Films* 255.1-2 (1995), págs. 135-138. DOI: [10.1016/0040-6090\(94\)05638-T](https://doi.org/10.1016/0040-6090(94)05638-T).
- [8] C F Ramirez-Gutierrez y col. «Design, fabrication, and optical characterization of one dimensional photonic crystals based on porous silicon assisted by in-situ photoacoustics». En: *Scientific reports* 9.1 (2019), págs. 1-15. DOI: [10.1038/s41598-019-51200-1](https://doi.org/10.1038/s41598-019-51200-1).
- [9] A David Ariza-Flores, L M Gaggero-Sager y V Agarwal. «White metal-like omnidirectional mirror from porous silicon dielectric multilayers». En: *Applied Physics Letters* 101.3 (2012), pág. 031119. DOI: [10.1063/1.4738765](https://doi.org/10.1063/1.4738765).
- [10] D Estrada-Wiese y col. «Staggered Padé wavelength distribution for multi-Bragg photonic mirrors». En: *Solar Energy Materials and Solar Cells* 141 (2015), págs. 315-321. DOI: [10.1016/j.solmat.2015.05.048](https://doi.org/10.1016/j.solmat.2015.05.048).
- [11] American Society for Testing, Materials. Committee G03 on Weathering y Durability. *Standard tables for reference solar spectral irradiances: direct normal and hemispherical on 37° tilted surface*. ASTM international, 2003.
- [12] B A Chavez-Castillo y col. «A wide band porous silicon omnidirectional mirror for the near infrared range». En: *Journal of Applied Physics* 127.20 (2020), pág. 203106. DOI: [10.1063/1.5144621](https://doi.org/10.1063/1.5144621).

- [13] E Xifré-Pérez y col. «Low refractive index contrast porous silicon omnidirectional reflectors». En: *Applied Physics B* 95.1 (2009), págs. 169-172. DOI: [10.1007/s00340-009-3416-0](https://doi.org/10.1007/s00340-009-3416-0).
- [14] Jorge Arranz de la Peña y Antonio Parra Truyol. «Algoritmos genéticos». En: *Barcelona: Universidad Carlos III* (2007).
- [15] C Klein. *Mineral*. 2019. URL: <https://www.britannica.com/science/mineral-chemical-compound> (visitado 28-06-2021).
- [16] C W Lan y col. «Grain control in directional solidification of photovoltaic silicon». En: *Journal of Crystal Growth* 360 (2012), págs. 68-75. DOI: [10.1016/j.jcrysgro.2012.01.007](https://doi.org/10.1016/j.jcrysgro.2012.01.007).
- [17] Bahram Jalali y Sasan Fathpour. «Silicon Photonics». En: *Journal of Lightwave Technology* 24.12 (2006), págs. 4600-4615. DOI: [10.1109/JLT.2006.885782](https://doi.org/10.1109/JLT.2006.885782).
- [18] Martin A Green. «Self-consistent optical parameters of intrinsic silicon at 300 K including temperature coefficients». En: *Solar Energy Materials and Solar Cells* 92.11 (2008), págs. 1305-1310. DOI: [10.1016/j.solmat.2008.06.009](https://doi.org/10.1016/j.solmat.2008.06.009).
- [19] A Uhler Jr. «Electrolytic Shaping of Germanium and Silicon». En: *Bell System Technical Journal* 35.2 (1956), págs. 333-347. DOI: [10.1002/j.1538-7305.1956.tb02385.x](https://doi.org/10.1002/j.1538-7305.1956.tb02385.x).
- [20] L T Canham y col. «Progress towards silicon optoelectronics using porous silicon technology». En: *Applied Surface Science* 102 (1996), págs. 436-441. DOI: [10.1016/0169-4332\(96\)00094-3](https://doi.org/10.1016/0169-4332(96)00094-3).
- [21] R L Smith y S D Collins. «Porous silicon formation mechanisms». En: *Journal of Applied Physics* 71.8 (1992), R1-R22. DOI: [10.1063/1.350839](https://doi.org/10.1063/1.350839).
- [22] W A Cady y M Varadarajan. «RCA Clean Replacement». En: *Journal of The Electrochemical Society* 143.6 (1996), págs. 2064-2067. DOI: [10.1149/1.1836950](https://doi.org/10.1149/1.1836950).
- [23] CF Ramirez-Gutierrez, Jorge David Castaño-Yepes y ME Rodriguez-Garcia. «In situ photoacoustic characterization for porous silicon growing: Detection principles». En: *Journal of Applied Physics* 119.18 (2016), pág. 185103. DOI: [10.1063/1.4948946](https://doi.org/10.1063/1.4948946).
- [24] V Castillo-Gallardo y col. «Optimization of wide-band quasi-omnidirectional 1-D photonic structures». En: *Optical Materials* 117 (2021), pág. 111202. DOI: [10.1016/j.optmat.2021.111202](https://doi.org/10.1016/j.optmat.2021.111202).
- [25] Aurélien Bruyant y col. «All-silicon omnidirectional mirrors based on one-dimensional photonic crystals». En: *Applied physics letters* 82.19 (2003), págs. 3227-3229. DOI: [10.1063/1.1574403](https://doi.org/10.1063/1.1574403).
- [26] Farideh Sadat Saeidi y Mehrdad Moradi. «A new route to designing a one-dimensional multiperiodic photonic crystal with adjustable photonic band gap and enhanced electric field localization». En: *Optics Communications* 493 (2021), pág. 126999. DOI: [10.1016/J.OPTCOM.2021.126999](https://doi.org/10.1016/J.OPTCOM.2021.126999).
- [27] Sander Van Smaalen. «An elementary introduction to superspace crystallography». En: *Zeitschrift für Kristallographie-Crystalline Materials* 219.11 (2004), págs. 681-691. DOI: [10.1524/zkri.219.11.681.52429](https://doi.org/10.1524/zkri.219.11.681.52429).
- [28] Tuck C Choy. *Effective medium theory: principles and applications*. Vol. 165. Oxford University Press, 2015.
- [29] H Looyenga. «Dielectric constants of heterogeneous mixtures». En: *Physica* 31.3 (1965), págs. 401-406. DOI: [10.1016/0031-8914\(65\)90045-5](https://doi.org/10.1016/0031-8914(65)90045-5).

- [30] C L Mitsas y D I Siapkas. «Generalized matrix method for analysis of coherent and incoherent reflectance and transmittance of multilayer structures with rough surfaces, interfaces, and finite substrates». En: *Appl. Opt.* 34.10 (1995), págs. 1678-1683. DOI: [10.1364/AO.34.001678](https://doi.org/10.1364/AO.34.001678).
- [31] C F Ramirez-Gutierrez, J D Castaño-Yepes y M E Rodriguez-Garcia. «Porosity and roughness determination of porous silicon thin films by genetic algorithms». En: *Optik* 173 (2018), págs. 271-278. DOI: [10.1016/j.ijleo.2018.08.019](https://doi.org/10.1016/j.ijleo.2018.08.019).
- [32] H F Mahlein. «Generalized Brewster-angle conditions for quarter-wave multilayers at non-normal incidence». En: *Journal of the Optical Society of America* 64.5 (1974), págs. 647-653. DOI: [10.1364/JOSA.64.000647](https://doi.org/10.1364/JOSA.64.000647).
- [33] P J Ouseph, Kevin Driver y John Conklin. «Polarization of light by reflection and the Brewster angle». En: *American Journal of Physics* 69.11 (2001), págs. 1166-1168. DOI: [10.1119/1.1397457](https://doi.org/10.1119/1.1397457).
- [34] M Gestal y col. *Introducción a los algoritmos genéticos y la programación genética*. Universidade da Coruña, 2010.
- [35] S N Sivanandam y S N Deepa. *Introduction to genetic algorithms*. Springer, 2008.
- [36] John Henry Holland. *Adaptation in natural and artificial systems: an introductory analysis with applications to biology, control, and artificial intelligence*. MIT press, 1992.
- [37] David Beasley, David R Bull y Ralph Robert Martin. «An overview of genetic algorithms: Part 1, fundamentals». En: *University computing* 15.2 (1993), págs. 56-69.
- [38] Pushpendra Kumar Yadav y N L Prajapati. «An overview of genetic algorithm and modeling». En: *International Journal of Scientific and Research Publications* 2.9 (2012), págs. 1-4.
- [39] B. J. Lindbloom. *Useful Color Calculators and Spreadsheets*. 2001. URL: <http://www.brucelindbloom.com> (visitado 01-10-2021).