

Bandas prohibidas gigantes en heteroestructuras fotónicas

R. Archuleta-García

*Programa de postgrado en Ciencias (Física) de la Universidad de Sonora,
Calle Rosales y Boulevard Luis Encinas, Hermosillo, Sonora 83000, México*

B. Manzanares-Martínez

*Unidad Regional Sur de la Universidad de Sonora,
Boulevard Lázaro Cárdenas No. 100, Navojoa, Sonora 85880, México.*

J. Manzanares-Martínez

*Centro de Investigación en Física de la Universidad de Sonora,
Apartado Postal 5-088, Hermosillo, Sonora 83190, Mexico*

Recibido el 2 de marzo de 2007; aceptado el 16 de agosto de 2007

En este trabajo mostramos que es posible diseñar bandas prohibidas gigantes en heteroestructuras fotónicas por medio del cálculo de la velocidad de grupo. Una heteroestructura fotónica está compuesta por la unión de dos o más cristales fotónicos distintos. Presentamos el cálculo de la estructura de bandas de la heteroestructura implementando la técnica de la supercelda en el método de onda plana. Se muestra que la estructura de bandas de una heteroestructura generalmente tiene una forma sumamente complicada. Sin embargo, es posible discriminar las regiones de frecuencia con baja (alta) propagación, realizando el cálculo de la velocidad de grupo. Por medio de la transmisión obtenida mediante el método de la matriz de transferencia, verificamos la existencia de regiones de energía prohibida (permitida) obtenidas a partir del cálculo de la velocidad de grupo de la heteroestructura.

Descriptores: Cristal fotónico; heteroestructura; supercelda.

In this work we show that it is possible to design giant photonic band gaps in heterostructures via the determination of the group velocity. A photonic heterostructure is composed by the union of two or more distinct photonic crystals. We present the calculation of the heterostructure band structure implementing the supercell technique in the Wave Plane Method. We show that even if the heterostructure present a very complicated photonic band diagram, it is possible to discriminate the regions of low (high) transmission obtaining the group velocity. We verify the existence of the forbidden (allowed) regions with the theoretical calculations of the light transmission.

Keywords: Photonic crystal; heterostructure; supercell.

PACS: 41.20.Jb; 42.25.Bs; 42.68.Ay

1. Introducción

En los últimos años los cristales fotónicos (CF) han atraído la atención de científicos e ingenieros a causa de sus interesantes características físicas y sus potencialidades tecnológicas [1]. Los CF son estructuras compuestas por una base de al menos dos materiales de diferentes constantes dieléctricas y una red periódica en una (1D), dos (2D) o tres dimensiones (3D). Los CF se caracterizan por la existencia de bandas prohibidas (BP) para las ondas electromagnéticas, de la misma forma que los semiconductores presentan bandas de energía electrónicas.

La más simple y común característica utilizada en el diseño de dispositivos ópticos es el fenómeno de reflexión total, es decir, la característica de espejo. Existen dos tipos principales de espejos: los metálicos y los basados en estructuras periódicas multicapas. Los espejos metálicos son buenos reflectores omnidireccionales, es decir, que reflejan luz a cualquier ángulo de incidencia. Sin embargo, se vuelven inoperantes en el infrarrojo a causa de la absorción. Por su parte, los espejos basados en CF-1D no presentan problemas debido a la absorción, ya que son dieléctricos, pero son altamente unidireccionales, ya que existe el ángulo de Brewster que los vuelve transparentes a cierto ángulo de incidencia [2].

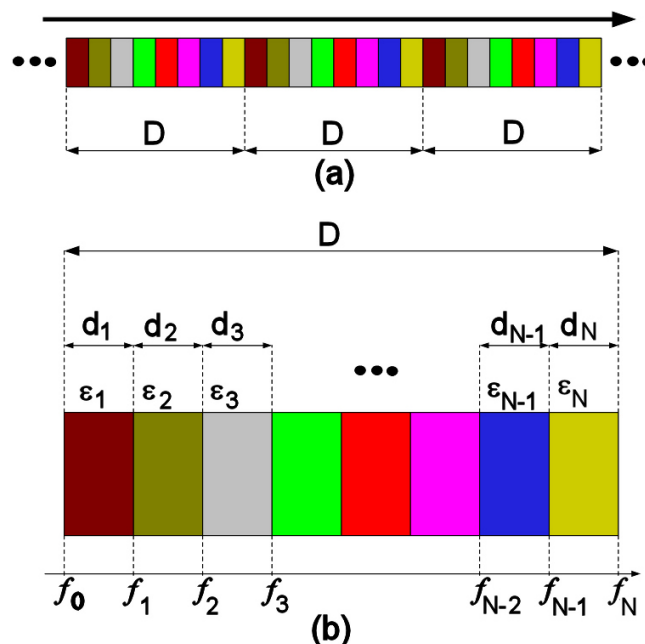


FIGURA 1. Geometría de una heteroestructura unidimensional. En (a) ilustramos el cristal infinito y en (b) ilustramos la supercelda.

Es necesario diseñar espejos omnidireccionales que tengan amplias BP y que no presenten absorción. Los cristales fotónicos basados en ópalo son estructuras 3D que han sido investigados como buenos candidatos para lograr BP omnidireccionales. Son especialmente interesantes porque su periodo es del orden de la longitud de onda de la luz, con lo cual se obtienen estructuras operantes en el visible [3]. Sin embargo, la presencia de desorden estructural ligado al método de fabricación destruye la BP [4].

Ha sido posible obtener espejos omnidireccionales utilizando CF-1D y el problema de la existencia del ángulo de Brewster ha sido resuelto considerando estructuras de alto contraste en el índice de refracción, para aumentar el rango de operación en la zona radiativa [5]. Sin embargo, en la práctica los materiales de alto índice de refracción son usualmente semiconductores y éstos tienen diversos mecanismos internos que dan lugar a una absorción óptica [6], la cual es una característica indeseable, como en el caso de los espejos metálicos. Sería deseable obtener espejos omnidireccionales a partir de materiales de bajo contraste dieléctrico, aprovechando el grado de control que recientemente ha sido obtenido por las técnicas experimentales de crecimiento de CF-1D, como por ejemplo las estructuras formadas por silicio poroso [7].

En este trabajo mostramos en forma teórica que la BP se puede hacer significativamente grande mediante la utilización de heteroestructuras. Una heteroestructura está compuesta por dos o más CF distintos. La estructura de bandas de la heteroestructura proviene de la combinación de las bandas de cada uno de los cristales. Los materiales constitutivos deben de ser escogidos cuidadosamente para que BP adyacentes, provenientes de distintos CF, se superpongan unas con otras. La BP de la heteroestructura la denominamos gigante debido a que resulta de la adición de las BP de distintos CF. Las estructuras con amplios rangos de BP tendrán muchas aplicaciones potenciales en optoelectrónica para dispositivos tales como cavidades [8], guías de onda [9], interruptores ópticos ultrarrápidos [10], etc. Además se abre la posibilidad de estudiar problemas fundamentales, tales como la inhibición de la emisión espontánea de átomos y moléculas. En particular, en este problema se busca el control de una emisión muy localizada en el tiempo, pero que al mismo tiempo radía en un amplio rango de frecuencias. Para lograr este control es necesario contar con CF con BP de considerable rango de operación [11].

La idea de optimizar las características ópticas de CF basados en heteroestructuras ha sido explorada para cristales 1D, 2D y 3D [12–16]. Todos los reportes teóricos explorados hasta el momento han sido basados en el cálculo de la transmisión de luz utilizando el método de la matriz de transferencia (MMT) para determinar la ausencia de transmisión. En este trabajo presentamos por primera vez la aplicación del método de ondas planas (MOP) en la optimización de heteroestructuras. Aunque hemos encontrado que el MOP entrega una estructura de bandas que es difícil de interpretar, muchas de estas bandas no implican propagación. Al calcular la velocidad de grupo (v_g) hemos relacionado a la transmisión de luz con valores significativos de v_g . La ventaja de utilizar el vector v_g para discriminar las regiones de BP es la direccionalidad. En efecto, los valores de v_g dependen de la dirección cristalográfica en la que se propaga el campo. Esto es especialmente importante para cristales en 2D y 3D. Por su parte, el cálculo de la densidad de estados es un escalar y entrega menos información, ya que es independiente de la dirección cristalográfica.

2. Estructura de bandas de la heteroestructura

La estructura de bandas dentro del cristal fotónico se describe por medio de la ecuación de onda

$$\nabla \times (\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r})) = \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon(\mathbf{r}) \mu(\mathbf{r}) \mathbf{E}(\mathbf{r}). \tag{1}$$

En esta ecuación $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ es el campo eléctrico, $\varepsilon(\mathbf{r})$ y $\mu(\mathbf{r})$ son la función dieléctrica y la permeabilidad magnética, respectivamente. La frecuencia a la cual oscila la onda electromagnética es ω y la velocidad de la luz es c . Vamos a considerar estructuras no magnéticas, así que $\mu(\mathbf{r}) = 1$. Usando análisis de Fourier, es posible obtener la ecuación de onda [17]

$$[\mathbf{k} + \mathbf{G}] \times ([\mathbf{k} + \mathbf{G}] \times \mathbf{E}(\mathbf{G})) = -\frac{\omega^2}{c^2} \sum_{\mathbf{G}'} \varepsilon(\mathbf{G} - \mathbf{G}') \mathbf{E}(\mathbf{G}'), \tag{2}$$

en donde \mathbf{k} es el vector de onda y \mathbf{G} es un vector de la red recíproca. Esta ecuación es de la forma

$$\mathbf{A} \mathbf{x} = -\lambda^2 \sum_{\mathbf{G}'} \mathbf{B} \mathbf{x}, \tag{3}$$

donde

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} [(k_y + G_y)^2 + (k_z + G_z)^2] & -(k_y + G_y)(k_x + G_x) & -(k_z + G_z)(k_x + G_x) \\ -(k_x + G_x)(k_y + G_y) & [(k_x + G_x)^2 + (k_z + G_z)^2] & -(k_z + G_z)(k_y + G_y) \\ -(k_x + G_x)(k_z + G_z) & -(k_y + G_y)(k_z + G_z) & [(k_x + G_x)^2 + (k_y + G_y)^2] \end{bmatrix} \tag{4}$$

$$\mathbf{B} = \begin{bmatrix} \varepsilon(\mathbf{G} - \mathbf{G}') & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon(\mathbf{G} - \mathbf{G}') & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon(\mathbf{G} - \mathbf{G}') \end{bmatrix} \tag{5}$$

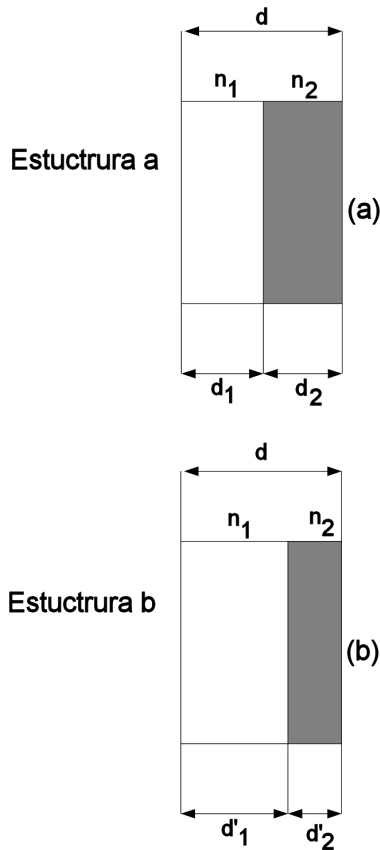


FIGURA 2. Celdas unitarias de las estructuras a y b.

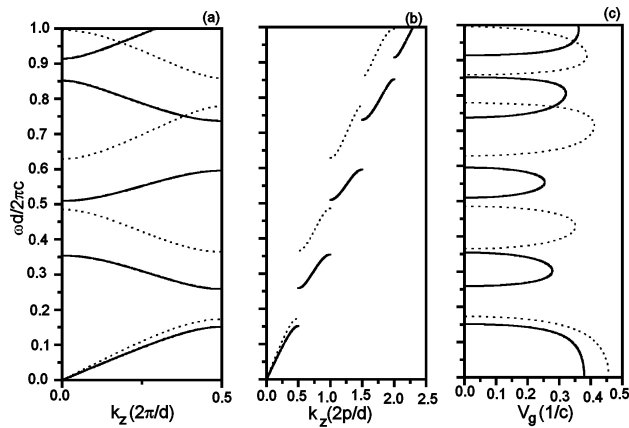


FIGURA 3. Bandas de energía en la zona reducida (a), en la zona extendida (b) y velocidad de grupo (c) para la estructura a (con líneas continuas) y la estructura b (con líneas a trazos).

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} E_{0x}(\mathbf{G}) \\ E_{0y}(\mathbf{G}) \\ E_{0z}(\mathbf{G}) \end{bmatrix} \tag{6}$$

$$\lambda^2 = \frac{\omega^2}{c^2} \tag{7}$$

Consideramos una estructura de periodicidad unidimensional en la dirección z , como lo ilustramos en la Fig. 1. En la Fig. 1a se muestra el cristal infinito y en la Fig. 1b ilustramos

la supercelda (SC). Si el campo eléctrico tiene una polarización paralela al eje x la ecuación de eigenvalores se reduce a

$$[k_z + G_z] \times ([k_z + G_z] \times E_x(G_z)) = -\frac{\omega^2}{c^2} \sum_{G'_z} \varepsilon(G_z - G'_z) E_x(G'_z). \tag{8}$$

La función dieléctrica en la SC es

$$\varepsilon(z) = \sum_{i=1}^{i=N} \varepsilon_i \{ \Theta [z - f_i] + \Theta [z - f_{i-1}] \}, \tag{9}$$

donde la función de Heaviside define $\Theta(x) = 1$ sólo cuando $x \geq 0$ y cero en cualquier otro valor. La función dieléctrica se describe en términos de la serie de Fourier como

$$\varepsilon(z) = \sum_{G_z} \varepsilon(G_z) e^{iG_z z}, \tag{10}$$

donde los coeficientes son obtenidos mediante

$$\varepsilon(G_z) = \frac{1}{D} \int_0^D \varepsilon(z) e^{-iG_z z} dz. \tag{11}$$

Integrando sobre la SC tenemos

$$\varepsilon(G_z) = \frac{1}{D} \left[\sum_{i=1}^{i=N} d_i \varepsilon_i \right] \delta_{G_z,0} - \frac{1}{D} \times \frac{1}{iG_z} \left[\sum_{i=1}^{i=N} \varepsilon_i (e^{-iG_z d_i} - e^{-iG_z d_{i-1}}) \right] (1 - \delta_{G_z,0}). \tag{12}$$

Este coeficiente de Fourier se introduce en la ecuación de eigenvalores para realizar el cálculo numérico de manera estandar [17].

3. Velocidad de grupo

El concepto de velocidad de grupo ha sido considerado de importancia fundamental para el estudio de diferentes fenómenos de interés tecnológico [1]. La velocidad de grupo se define mediante la relación

$$v_g(k, \omega) = \frac{d\omega}{dk}. \tag{13}$$

Es posible obtener $v_g(\omega)$ directamente de la relación de dispersión utilizando diferencias finitas

$$v_g(k_i, \omega_i) = \frac{\Delta\omega}{\Delta k} = \frac{\omega(k_{i+1}) - \omega(k_i)}{k_{i+1} - k_i} \tag{14}$$

Como un primer ejemplo consideramos la estructura de bandas para dos diferentes celdas unitarias (CU), ambas de un tamaño d . En la Fig. 2a mostramos la CU-a que está compuesta por los materiales $n_1 = 1.0$ y $n_2 = \sqrt{13}$, cuyos espesores son $d_1 = d_2 = d/2$. El factor de llenado de la CU es

f_{CU} y se define como el espacio ocupado por el material de alto índice de refracción sobre el espacio total, en este caso para la CU-a tenemos $f_{CU} = 0.5$. En la Fig. 2b mostramos la CU-b que está compuesta por los mismos materiales, pero en donde los espesores son diferentes. Ahora $d'_1 = 0.68d$ y $d'_2 = 0.32d$. El factor de llenado en este caso es $f_{CU} = 0.32$.

En la Fig. 3 presentamos estructuras de bandas y velocidad de grupo para la CU-a (con líneas) y para la CU-b (con puntos). En la Fig. 3a se muestra la estructura de bandas en la zona reducida (EBZR). La estructura a presenta 5 bandas en el rango de la gráfica. La estructura b, por su parte, presenta 4. En la Fig. 3b presentamos la estructura de bandas en la zona extendida (EBZE). La primera banda de las estructuras a y b es similar. A continuación de una región de energía en donde existe una ausencia de estados para ambas estructuras, existen estados permitidos para una o para otra estructura. En la Fig. 3c mostramos la $v_g(\omega)$ para cada estructura.

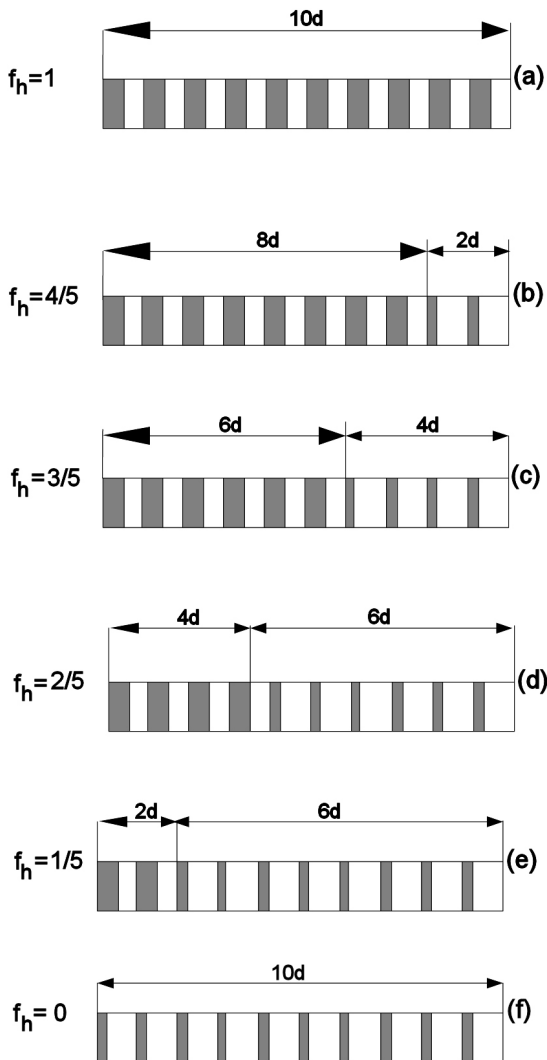


FIGURA 4. Supercelda de la heteroestructura para diferentes factores de llenado f_H .

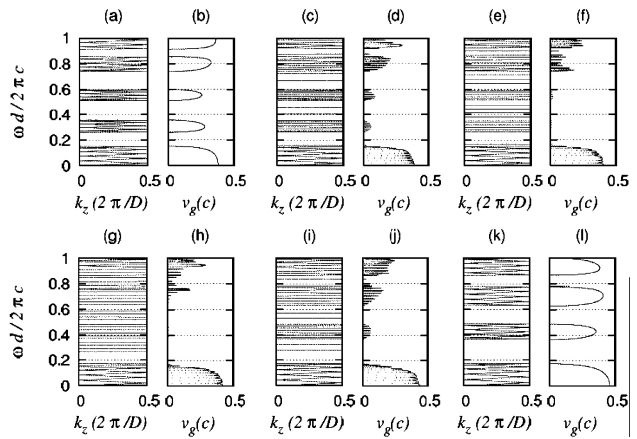


FIGURA 5. Estructura de Bandas en la Zona Reducida de la Supercelda y $v_g(\omega)$ para diferentes f_H .

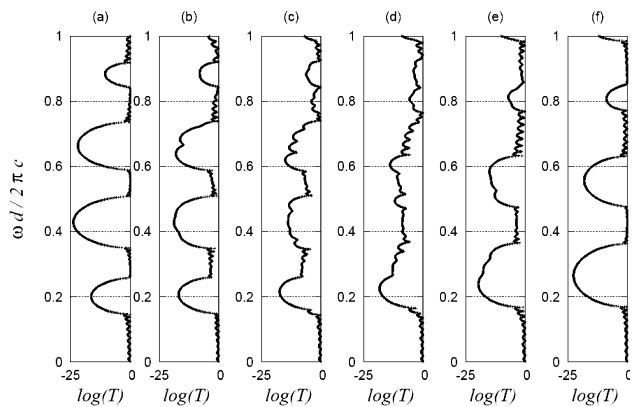


FIGURA 6. Transmisión de luz para diferentes factores de llenado.

4. Heteroestructuras

En la Fig. 4 mostramos varias superceldas correspondientes a heteroestructuras compuestas por CU-a y CU-b. El factor de llenado de la superestructura (f_H) lo definimos como el espacio ocupado por las CU-a sobre el espacio total de la supercelda (SC), $D = 10d$. En la Fig. 4(a) tenemos que toda la superestructura está compuesta por CU-a, así que el factor de llenado es $f_H = 1$. En la Fig. (b) existen dos CU-b, de manera que $f_H = 4/5$. Los paneles (c) y (d) ilustran los factores de llenado $f_H = 3/5$ y $f_H = 2/5$, respectivamente. En la Fig. 4 (e) sólo existen dos CU-a así que $f_H = 1/5$. Por último, el panel (f) muestra una heteroestructura compuesta únicamente de CU-b, cuyo factor de llenado es entonces $f_H = 0$.

En la Fig. 5 mostramos la estructura de bandas en la zona reducida de la supercelda (EBZRSC) y la $v_g(\omega)$ para diferentes f_H . En los paneles (a)-(b), (c)-(d), (e)-(f), (g)-(h), (i)-(j) y (k)-(l) presentamos nuestros resultados para $f_H = 1, 4/5, 3/5, 2/5, 1/5$ y 0 , respectivamente. Se observa que partiendo de una SC con $f_H = 1$ [panel (a)] compuesta en su totalidad de CU-a, al incrementarse el número de CU-b la EBZRSC y la $v_g(\omega)$ se modifican.

Al observar la Fig. 5a pareciera que estuviera construida *doblando* 10 veces la línea sólida de la Fig. 3(a). Esto es de esperarse, dado que ambas gráficas representan la relación de dispersión de un mismo sistema físico. El efecto señalado es debido a la definición de celda unitaria en cada caso, para la Fig. 3a el bloque unitario se conforma por una CU-a [ver Fig. 2a], mientras que en la otra figura la SC está construida con 10 de estos bloques [Fig. 4a]. El resultado es que la zona reducida se hace 10 veces más pequeña, compactando la representación. Lo mismo puede afirmarse acerca de la Fig. 5k y la relación de dispersión representada por la línea punteada de la Fig. 3a, la base en esta última es una CU-b mientras que la SC en la Fig. 5k se compone por 10 de estos bloques unitarios [Fig. 4f].

Las bandas de las heteroestructuras mixtas [páneos (c),(e), (g) e (i) de la Fig. 5] muestran una pendiente bastante plana, esto se debe a que corresponden a modos muy confinados. Por ejemplo, la Fig. 5c pertenece a una SC conformada por 8 CU-a y 2 CU-b, la mayor parte de las bandas son de poca pendiente entre 0.2 y 0.6. Éstas corresponden a modos que oscilan en CU-a pero decaen en CU-b. Esta falta de conectividad provoca una degeneración de los modos de oscilación, aplanando la banda y disminuyendo la velocidad de grupo [Fig. 5d]. Éste comportamiento se acentúa en los páneos (e) y (g), cambiando paulatinamente su carácter conforme disminuye f_H hasta que en la Fig. 5i la mayor parte de las bandas planas entre 0.38 y 0.8 corresponden a modos que oscilan en CU-b y decaen en CU-a. Finalmente en la Fig. 5k, cuando $f_H = 0$ la relación de dispersión corresponde totalmente a oscilaciones en celdas de tipo CU-b.

La disminución de la velocidad de grupo en las bandas planas de los casos $f_H = 4/5, 3/5, 2/5, 1/5$ y la falta de conectividad de estos modos de oscilación tienen por consecuencia que sean frecuencias ineficientes para el transporte de energía y además de difícil excitación. Nuestra propuesta es que mediante la identificación de las regiones donde $v_g(\omega)$ sea pequeña o cero, podamos identificar las regiones

en donde no exista transmisión de luz. De particular importancia es el par de páneos (e)-(f) y (g)-(h), correspondientes a $f_H = 3/5$ y $f_H = 2/5$. En estas figuras se ilustra la situación en donde a pesar de que la estructura de bandas [páneos (e) y (g)] muestran una buena cantidad de estados de energía permitidos, la velocidad de grupo en los páneos (f) y (h) predice una región de banda de energía prohibida desde $\omega d/2\pi c = 0.195$ a $\omega d/2\pi c = 0.78$.

Para comprobar la baja transmisión que presentan las bandas planas en las heteroestructuras mixtas, en la Fig. 6 mostramos la transmisión de luz calculada con el método de matriz de transferencia (MMT) para $f_H = 1, 4/5, 3/5, 2/5, 1/5$ y 0 en los páneos (a)-(f), respectivamente. En todos los casos la luz se transmite a través de una SC, es decir, recorre una distancia $10d$, siendo el medio de incidencia y transmisión el aire. Se observa que la superestructura mixta con factores de llenado $f_H = 3/5$ y $f_H = 2/5$ correspondientes a los páneos (c) y (d) presentan la más baja transmisión, como es predicho con el cálculo de la velocidad de grupo.

5. Conclusiones

Hemos presentado una forma novedosa de identificar bandas prohibidas gigantes en heteroestructuras a partir del cálculo de la velocidad de grupo. Esta estrategia de unir cristales fotónicos de modestas propiedades ópticas para lograr espejos de rangos gigantes abre el camino para la utilización tecnológica de estructuras de bajo índice de refracción.

Agradecimientos

Este trabajo fue apoyado por los Proyectos CONACYT-44066 y CONACYT-60897. RAG agradece una Beca-Tesis de Maestría. Agradecemos a PROMEP'2005 por financiamiento especial.

1. K. Yasumoto y Y.Y., *Electromagnetic Theory and Applications for Photonic Crystals* (CRC Press, New York, 2005).
2. B. Manzanares-Martínez y F. Ramos-Mendieta, *Phys. Rev. B* **61** (2000) 12877.
3. S.G. Romanov *et al.*, *Phys. Rev. E* **63** (2001) 056603.
4. M.A. Kaliteevski, J. Manzanares-Martínez, D. Cassagne y J.P. Albert, *Phys. Rev. B* **66** (2002) 113101.
5. D.N. Chigrin, A.V. Lavrinenko, D.A. Rarotsky y S.V. Gaponenko, *Appl. Phys. A* **68** (1999) 25.
6. J. Manzanares-Martínez, F. Ramos-Mendieta y P. Halevi, *Phys. Rev. B* **72** (2005) 35336.
7. V. Agarwal y J.A. del Río, *Appl. Phys. Lett.* **82** (2003) 1512.
8. K.M. Chen *et al.*, *Appl. Phys. Lett.* **75** (1999) 3805.
9. B. Temelkuran y E. Ozbay, *Appl. Phys. Lett.* **47** (1999) 486.
10. M. Scalora, J.P. Dowling, C.M. Bowden y M.J. Boemer, *Phys. Rev. Lett.* **73** (1994) 1368.
11. M.D. Tocci, M. Scalora, M.J. Bloemer, J.P. Dowling y C.M. Bowden, *Phys. Rev. A* **53** (1996) 2799.
12. J. Zi, J. Wan y C. Zhang, *Appl. Phys. Lett.* **75** (1998) 2084.
13. P.M.E. Bardosova, M., I.M. Povey, R.H. Tredgold y D.E. Whitehead, *Appl. Phys. Lett.* **89** (2006) 93116.
14. A. Bruyant, G. Lerondel, P.A. Reece y M. Gal, *Appl. Phys. Lett.* **82** (2003) 3227.
15. E. Xifre-Pérez, L.F. Marsal, J. Pallares y J. Ferre-Borull, *J. Appl. Phys. Lett.* **97** (2005) 64503.
16. H. Lee y G. Nam, *J. Appl. Phys. Lett.* **100** (2006) 83501.
17. F. Ramos-Mendieta y P. Halevi, *Phys. Rev. B* **59** (1999) 15112.