



BENEMÉRITA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE PUEBLA

INSTITUTO DE FÍSICA "LUIS RIVERA TERRAZAS"

"Estudio de ondas elásticas y oscilaciones de Bloch en multicapas de silicio poroso"

TESIS

QUE PARA OBTENER EL GRADO DE
DOCTOR EN CIENCIAS
(EN LA ESPECIALIDAD DE CIENCIA DE
MATERIALES)

PRESENTA:
ZORAYDA LAZCANO ORTIZ

ASESOR:
DR. J. JESÚS ARRIAGA RODRÍGUEZ

MAYO DE 2014

©2014 - Zorayda Lazcano Ortiz

Derechos Reservados

Agradecimientos

Agradezco principalmente a mi asesor el Dr. Jesús Arriaga por la orientación, el seguimiento y la supervisión continúa de este trabajo, ha sido una experiencia inigualable trabajar con él y aprender de él. Pero sobre todo le agradezco la confianza depositada en mí, la motivación y el apoyo recibido a lo largo de estos años y la amistad que me ha brindado.

Agradezco al Instituto de Física “Luis Rivera Terrazas” por todas las facilidades que he recibido durante mi estancia de maestría y doctorado, en particular a mis maestros, a quienes debo el gusto por la Ciencia; y los Doctores Miguel Gracia, Rutilo Silva y María Eugenia Mendoza por las facilidades, apoyo y acceso a los equipos de medición.

Agradezco también al Dr. Octavio Meza por su apoyo y colaboración, y por su amistad, y al Dr. Diosdado Villegas por el trabajo y el tiempo que compartimos.

De la misma forma agradezco a los Doctores Lilia Meza, Guillermo Monsivais, Victor Dossetti y Miguel Gracia por el seguimiento y tiempo dedicado a la revisión de este trabajo.

De manera especial, agradezco al Dr. Guillermo Monsivais por sus valiosas observaciones y sugerencias, y por su apoyo a lo largo del desarrollo de esta Tesis.

Un agradecimiento muy especial merece la comprensión, paciencia, el ánimo y el invaluable apoyo recibidos de mi familia y amigos, sobre todo de mis padres y hermanos.

El desarrollo de este trabajo fue posible gracias al apoyo económico del CONACyT.

A todos ellos, muchas gracias.

*Dedicado a mis hijos,
Fernanda Sofia y Emilio,
y a mis padres,
Abisai y Margarita.*

Estudio de ondas elásticas y oscilaciones de Bloch en multicapas de silicio poroso

Resumen

El objetivo de este trabajo es demostrar teórica y experimentalmente la aparición del fenómeno de las escaleras de Wannier-Stark y las oscilaciones de Bloch acústicas en sistemas de multicapas de silicio poroso. Con este propósito, primero se estudian las propiedades acústicas del silicio poroso, es decir, se determina la velocidad del sonido como función de la porosidad en muestras monocapas a través de la medición de la transmisión acústica y su análisis en el dominio temporal. También se investiga el procedimiento óptimo para fabricar sistemas de multicapas con capas individuales de espesores grandes, del orden de micras, manteniendo homogéneas la porosidad y la velocidad de crecimiento en cada capa. Para observar la aparición de las escaleras de Wannier-Stark, se proponen dos tipos de estructuras con gradientes lineales en las propiedades acústicas de las capas. Usando el método de la matriz de transferencia, se hacen cálculos teóricos de las respuestas, tanto óptica como acústica, de los sistemas considerados. Se calcula la reflectividad óptica de monocapas y sistemas periódicos, lo cual se utiliza como un método para determinar los índices de refracción efectivos de las capas porosas. También se calcula la transmitancia acústica y la distribución del campo de desplazamientos dentro de las estructuras como función de la frecuencia, así como la transmitancia e intensidad del campo de desplazamientos en resolución temporal de un pulso gaussiano propagándose en el sistema. Se diseñan y fabrican estructuras con los espesores y las porosidades adecuadas para obtener resonancias de Wannier-Stark en el dominio de la frecuencia y oscilaciones de Bloch en el dominio temporal. Para esto, se hacen mediciones experimentales de la transmisión acústica en frecuencias alrededor de 1 GHz para observar la formación de las escaleras de Wannier-Stark acústicas, y se calcula la evolución temporal de un pulso gaussiano para tener evidencia de las oscilaciones de Bloch correspondientes. Se observa que la posición de las resonancias y el periodo de las oscilaciones de Bloch pueden ser modulados variando los parámetros de las estructuras, por lo tanto, con las estructuras diseñadas y fabricadas aquí, es posible modular la propagación de ondas acústicas con frecuencias de GHz.

Study of elastic waves and Bloch oscillations in porous silicon multilayers

Abstract

The aim of this work is to demonstrate theoretically and experimentally the phenomenon of acoustic Wannier-Stark ladders and Bloch oscillations in multilayer systems based on porous silicon. For this purpose, first, the acoustic properties of single porous silicon layers were studied, i.e., the speed of sound as a function of the porosity is determined through the measurement of the acoustic transmission and its analysis in the time domain. The optimal procedure for manufacturing multilayers with large thicknesses, of the order of microns, with homogeneous porosity and thickness with respect to their depth, is investigated and established. To observe the appearance of acoustic Wannier-Stark ladders, two types of structures with linear gradients in the acoustic properties of the layers are proposed. Using the transfer matrix method, we calculate both, the optical and acoustical transmission of the considered systems. The optical reflectivity of monolayers and periodic systems is calculated and used as a method for determining the effective refractive index of the porous layers. We also calculated the acoustic transmission and field displacement within the structures as a function of the frequency. The transmission and the field displacement in temporal resolution of a Gaussian pulse propagating throughout the system is also calculated. On the other hand, it is possible to design structures with appropriate thicknesses and porosities to exhibit Wannier-Stark resonances in the frequency domain, and Bloch oscillations in the time domain. Acoustic transmission measurements at frequencies around 1 GHz were performed in order to observe the formation of acoustic Wannier-Stark ladders. Additionally, in order to put in evidence the acoustic Bloch oscillations, we calculated the time evolution of a Gaussian pulse propagating throughout the structures. We observed that frequencies of the resonances and the period of the Bloch oscillations can be modulated by varying the parameters of the structures, therefore, with the structures designed and fabricated here, it is possible to modulate the propagation of waves with frequencies in the range of GHz.

Contenido

Introducción: El sonido y los cristales fonónicos	1
1 Fundamentos teóricos	7
1.1 Ecuación de onda elástica	7
1.1.1 Ondas planas en un sólido elástico infinito	8
1.1.2 Ondas planas en un espacio bidimensional	9
1.1.3 Superposición de ondas planas en un sistema de multicapas 1D	10
1.2 Condiciones en la frontera del problema elástico	12
1.3 Método de la matriz de transferencia	13
1.4 Coeficientes de transmisión y reflexión	15
1.4.1 Incidencia Normal	15
1.4.2 Incidencia oblicua	16
1.5 El problema “ <i>fd</i> ”	16
2 Escaleras de Wannier-Stark y oscilaciones de Bloch	21
2.1 Origen del fenómeno	21
2.2 Dinámica de las oscilaciones de Bloch	23
2.3 Antecedentes	25
2.3.1 El caso electrónico en superredes semiconductoras	25
2.3.2 Caso óptico	29
2.3.3 Caso acústico	34
2.4 Estructuras propuestas	38
2.4.1 Estructuras periódicas	40
2.4.2 Caso con gradiente I	42
2.4.3 Caso con gradiente II	42
3 Silicio poroso	45
3.1 Historia del silicio poroso	45
3.2 Formación del silicio poroso	47
3.3 Características del silicio poroso: tamaño de poro y morfología	52
3.4 Influencia de los parámetros de formación	54
3.5 Parámetros elásticos del silicio poroso	58

4	Fabricación de silicio poroso	63
4.1	Arreglo experimental para la fabricación de silicio poroso	63
4.2	Calibración del sistema de ataque electroquímico	65
4.3	Efecto de la introducción de pausas de corriente durante el ataque	67
4.3.1	Efecto de la introducción de pausas de corriente en sistemas periódicos	72
5	Caracterización de monocapas y multicapas	79
5.1	Espesor y porosidad en monocapas	79
5.2	Perfilometría	81
5.3	Índice de refracción efectivo en monocapas de SP	82
5.4	Aproximaciones de medio efectivo	88
5.5	Caracterización óptica de multicapas de silicio poroso	90
5.6	Medición de la transmisión acústica en silicio poroso	93
5.6.1	Dependencia de la velocidad longitudinal con la porosidad	96
5.6.2	Medición de la transmisión acústica en multicapas de silicio poroso .	101
6	Resultados teóricos y experimentales: EWS y OB acústicas	107
6.1	Escaleras de Wannier-Stark: Caso I	107
6.2	Escaleras de Wannier-Stark: Caso II	112
	Conclusiones	121
A	Elementos de matriz	123
B	Método de la matriz global	125
	Bibliografía	129

Introducción: El sonido y los cristales fonónicos

Cuando un átomo en un sólido se desplaza de su posición de equilibrio, ejerce una fuerza sobre sus vecinos, haciendo que éstos se muevan. Estos átomos causan entonces que sus vecinos se muevan también, y el resultado final es la creación de un *fonón*, que es el cuanto de energía de la onda formada por la distorsión de la red que se propaga a través del sólido. En general, cuando estas ondas pasan a través de un gas o un líquido se conocen como *ondas acústicas*, mientras que si pasan a través de un sólido se llaman *ondas elásticas*.

Las ondas acústicas (o elásticas) difieren de las ondas de luz de varias maneras. Las ondas acústicas son ondas mecánicas, por lo que no pueden viajar a través del vacío, mientras que las ondas de luz son electromagnéticas y pueden viajar en el vacío. Hay otras diferencias importantes entre las ondas mecánicas y las electromagnéticas. Una onda de luz puede tener dos polarizaciones independientes, una onda elástica en un sólido homogéneo tiene tres polarizaciones independientes: dos de ellas son transversales (ondas de corte) y una es longitudinal (onda de compresión). Sin embargo, las ondas transversales no se propagan en los líquidos y gases, por lo que una onda acústica tiene sólo polarización longitudinal.

En esta tesis se estudia la propagación de vibraciones mecánicas en materiales sólidos conocidos como *cristales fonónicos* (CF's) o *cristales acústicos*, los cuales son arreglos periódicos de materiales con densidad de masa diferente. El caso más simple de un cristal fonónico, objeto de estudio en esta tesis, es la superred o multicapa, que es una estructura con periodicidad unidimensional (1D) formada por láminas alternadas de dos materiales con diferentes propiedades elásticas.

Un CF hace uso de las propiedades fundamentales de las ondas, tales como la dispersión y la interferencia, para crear una estructura de bandas con “bandas prohibidas”,

o regiones de frecuencia dentro de las cuales las ondas no pueden propagarse a través de la estructura [1]. Esto es análogo a los electrones propagándose en un semiconductor, el cual permite que los electrones ocupen ciertas bandas de energía, como en el caso de los denominados cristales fotónicos, que sólo permiten que luz de ciertas longitudes de onda pueda viajar a través de ellos [2].

Un cristal fotónico es un material formado por arreglos periódicos de dos dieléctricos transparentes, y es la variación periódica en el índice de refracción lo que hace aparecer las bandas prohibidas. De manera análoga, en un cristal fonónico es la densidad de masa y por lo tanto las constantes elásticas de la estructura las que varían periódicamente. Esto hace que cambie la velocidad del sonido en el cristal y permite la formación de bandas prohibidas. En consecuencia, este fenómeno hace de los CF's un tema de interés tanto en la Física como en la Ingeniería de Materiales, debido a sus posibles aplicaciones que van desde el aislamiento acústico de edificios [3] hasta la medicina [4].

La manipulación del sonido es quizás la aplicación más obvia de los CF's. El sonido es inmensamente valioso en nuestra vida diaria para la comunicación y la transferencia de información, o simplemente por su valor estético en la música y los ritmos. Para el oído humano, el sonido se compone básicamente de ondas acústicas con frecuencias entre 20 Hz y 20 kHz, o longitudes de onda que van desde algunos metros hasta varias decenas de centímetros. Por lo tanto, se puede esperar que estructuras periódicas con constantes de red de este orden, inhiban el sonido y actúen como espejos sónicos.

Un gran ejemplo de las propiedades acústicas de una estructura periódica fue proporcionada por Francisco Meseguer *et al* en 1995. Este grupo estudió las características acústicas de una escultura de Eusebio Sempere (Fig. 0.1). Esta escultura minimalista se compone de una matriz cuadrada y periódica de cilindros huecos de acero. Meseguer y colaboradores encontraron que la escultura posee una banda prohibida acústica, ya que al medir la transmisión del sonido a través de la escultura como una función de la frecuencia y la dirección, encontraron que el sonido que viajaba en forma perpendicular a los ejes de los cilindros, se atenúa fuertemente a una frecuencia de 1670 Hz. Este resultado proporcionó la primera evidencia experimental de la existencia de bandas prohibidas fonónicas en estructuras periódicas [5].

Desafortunadamente, una estructura tiene que ser de varios metros de ancho para crear una banda prohibida fonónica en el régimen audible. Si bien esto podría no ser un problema para la acústica arquitectónica, es poco práctico para muchos otros dispositivos, como

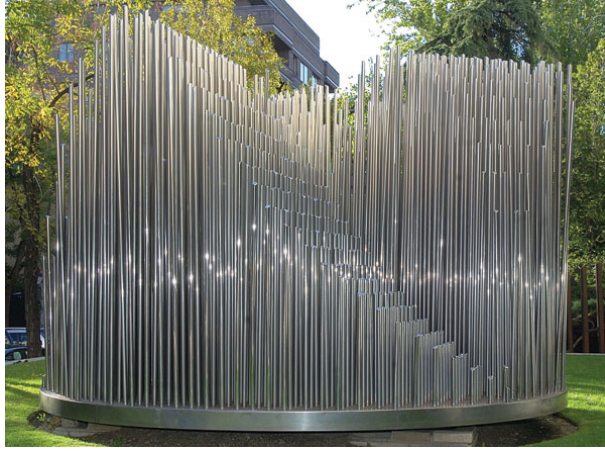


Figura 0.1: Obra de Eusebio Sempere (Órgano) en la que se descubrieron los cristales fonónicos. Fundación Juan March (Madrid).

auriculares y altavoces. Sin embargo, si nos movemos al régimen ultrasónico o hipersónico, las longitudes de onda correspondientes son mucho más cortas, por lo que los cristales fonónicos son también mucho más pequeños (del orden de milímetros y micrómetros). La posibilidad de trabajar a escalas más pequeñas, junto con la de diseñar sistemas con diferentes perfiles de densidad, da lugar a una amplia gama de aplicaciones para los CF's.

A pesar de que el estudio de la propagación de ondas en medios periódicos data desde 1887 con los trabajos de Lord Rayleigh [6], el campo de los cristales fonónicos tiene apenas un par de décadas investigándose y han sido varios los temas de interés, tanto en ciencia básica, como en sus posibles aplicaciones; por ejemplo, se trabaja en la búsqueda de una estructura fonónica con banda prohibida completa, es decir, una región de frecuencias en la que las ondas no se propaguen en ninguna dirección [7]. Además, con base en las investigaciones sobre las propiedades ópticas de los *metamateriales* y su uso en la construcción de las llamadas *superlentes*, que permiten la formación de imágenes ópticas de muy alta resolución, así como las *capas de invisibilidad* [8], se ha mostrado que los CF's pueden proporcionar el mismo nivel de control sobre el sonido, de manera análoga al que los espejos y las lentes proporcionan sobre la luz. Recientemente se ha demostrado que el mismo tipo de imágenes y dispositivos de camuflaje se podría hacer con el sonido en lugar de luz, usando metamateriales acústicos con índices de refracción negativos [9]. Esto permitirá la creación de imágenes de ultrasonido de alta resolución y dispositivos capaces de ocultar los barcos o submarinos de los sonares.

Otro tema de interés es la creación del SASER (del inglés, Sound Amplification by Stimulated Emission of Radiation), el análogo acústico del LASER (del inglés, Light

Amplification by Stimulated Emission of Radiation) [10, 11]. Un sáser es un dispositivo que emite ondas acústicas coherentes de la misma manera que un láser emite ondas de luz coherentes, y se han propuesto diferentes métodos para obtener emisión sáser. En 2010 se reportó la amplificación coherente de sonido (en frecuencias de THz) en una superred de semiconductores bajo la acción de un campo eléctrico externo, es decir, en una superred en donde aparecen los niveles de Wannier-Stark [12]. Un sáser en THz sería particularmente útil en la nanotecnología, ya que sus fonones tendrían una longitud de onda de alrededor de un nanómetro y podrían penetrar en las estructuras sólidas, abriendo la puerta a las imágenes de nanoestructuras en 3D; también podría utilizarse para crear interruptores muy rápidos o para generar la radiación electromagnética en el rango de THz.

Toda la investigación se basa en la manipulación del sonido en diferentes formas y con diferentes frecuencias. En este trabajo de tesis, se investiga la propagación de ondas elásticas con frecuencias en el orden de GHz (10^9 Hz) en CF's unidimensionales (1D) formados por capas de silicio poroso (SP). El SP permite fabricar sistemas de multicapas, con capas individuales cuyos espesores y densidades de masa se pueden modificar fácilmente, lo que da la posibilidad de sintonizar la respuesta acústica de los sistemas. El objetivo principal es mostrar, teórica y experimentalmente, la aparición del fenómeno de las escaleras de Wannier-Stark (EWS) y las oscilaciones de Bloch (OB) acústicas en sistemas basados en SP. Para demostrar este fenómeno se consideran sistemas con gradientes lineales en las propiedades elásticas de las capas de SP, esto permite tener un análogo mucho más estricto del efecto que tiene un campo eléctrico externo sobre el potencial periódico de un cristal semiconductor.

La tesis se encuentra estructurada de la siguiente manera: en el Capítulo 1 se presentan los fundamentos teóricos y el método que se utiliza para llevar a cabo los cálculos desarrollados en este trabajo. En el Capítulo 2, se hace un recorrido sobre los trabajos previos al nuestro, que demuestran teórica y/o experimentalmente las EWS y las OB, y que se toman como referencia para diseñar las estructuras propuestas aquí. El Capítulo 3 describe ampliamente el material de estudio de esta tesis: el SP, sus propiedades, características morfológicas, condiciones de fabricación y sus propiedades elásticas. En el Capítulo 4 se describe el método utilizado para fabricar los sistemas de SP, se investiga de forma sistemática el efecto de la introducción de pausas de corriente durante el crecimiento de las capas y se expone el procedimiento óptimo para fabricar capas individuales que mantienen homogéneas su porosidad y velocidad de crecimiento. En el Capítulo 5, se presenta la ca-

racterización de monocapas y multicapas, se describen los métodos utilizados para medir los espesores y para determinar la porosidad de las capas de SP, a través de la medición de su respuesta óptica y mediante el uso de la aproximación de medio efectivo de Bruggeman. Además, se describe el arreglo experimental utilizado para medir la transmisión acústica en nuestros sistemas, y se encuentra la dependencia de la velocidad longitudinal del sonido con la porosidad, utilizando la transmisión acústica de monocapas y haciendo un análisis temporal de la señal. En el Capítulo 6 se presentan los resultados teóricos y experimentales que muestran la presencia de EWS y OB acústicas en los dos casos que se consideran, y que representan una analogía mucho más estricta con respecto al caso electrónico que hasta ahora no se había considerado. Por último se dan algunas conclusiones generales y se plantean perspectivas de investigación futura sobre este tema.

Capítulo 1

Fundamentos teóricos

1.1 Ecuación de onda elástica

Todos los resultados teóricos que se presentan aquí, se obtienen mediante un tratamiento clásico. Esto restringe el rango de validez de los resultados a los casos en que las longitudes de onda involucradas son mucho mayores que las distancias interatómicas.

En cada punto \mathbf{r} , el medio se caracteriza por tres parámetros: densidad de masa $\rho(\mathbf{r})$, la velocidad longitudinal del sonido $v_L(\mathbf{r})$ y la velocidad transversal $v_T(\mathbf{r})$. Se considera la propagación de ondas elásticas que inciden con un ángulo arbitrario, en un sistema periódico 1D con capas de distinta porosidad, y por lo tanto, con distintos parámetros efectivos ρ , v_L y v_T . Para esto, es necesario resolver la ecuación de onda para la propagación de ondas elásticas en medios isotrópicos no-homogéneos.

Se puede escribir la segunda ley de Newton de forma general en ausencia de fuerzas externas como [13]:

$$\rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} = \frac{\partial \sigma_{ik}}{\partial x_k}, \quad (1.1)$$

la cual representa la ecuación básica de la elasticidad de medios continuos y está escrita en términos del *tensor de esfuerzos* σ_{ik} y la densidad de masa ρ , siendo u_i ($i=x,y,z$) las componentes del vector de desplazamientos $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$.

Cuando un cuerpo es deformado, en general, todo punto en él es desplazado. El vector $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$ expresa el cambio en un elemento de longitud cuando el cuerpo se somete a alguna deformación. Cuando ésta ocurre, el arreglo de los átomos cambia y el cuerpo deja de estar en su estado de equilibrio. Surgen entonces fuerzas que tienden a regresar al

cuerpo al equilibrio. Estas fuerzas internas, que ocurren cuando un cuerpo se deforma, son descritas por el tensor de esfuerzos σ_{ik} [13].

Para medios isotrópicos, la ley generalizada de Hooke establece que [13]

$$\sigma_{ik} = 2\rho v_T^2 u_{ik} + \rho(v_L^2 - 2v_T^2) u_{ll} \delta_{ik}, \quad (1.2)$$

donde

$$u_{ik} = \frac{1}{2} \left[\frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_i} \right], \quad (1.3)$$

es el *tensor de deformaciones*. Esta expresión está dentro de la aproximación de Cauchy, en donde se desprecian términos de segundo orden.

Introduciendo las expresiones (1.2) y (1.3) en la expresión (1.1), se puede obtener la forma compacta de la ecuación de onda:

$$\rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} = \nabla \cdot (\rho v_T^2 \nabla u_i) + \nabla \cdot \left[\rho v_T^2 \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x_i} \right] + \frac{\partial}{\partial x_i} [(\rho v_L^2 - 2\rho v_T^2) \nabla \cdot \mathbf{u}]. \quad (1.4)$$

Ya que en este trabajo de tesis estamos interesados en superredes 1D, se considera que los parámetros del sistema dependen únicamente de la coordenada z .

1.1.1 Ondas planas en un sólido elástico infinito

La ecuación (1.4) no puede ser integrada directamente, así que debe proponerse una solución y verificar su validez por diferenciación y sustitución. La solución que se propone y que satisface la ecuación (1.4) es una onda plana homogénea. En una onda plana homogénea el frente de onda es un plano infinito normal a la dirección de propagación, de manera que todos los desplazamientos son uniformes sobre el plano del frente de onda, en cualquier posición a lo largo de la dirección de propagación y en cualquier instante de tiempo. Tales consideraciones llevan a dos soluciones posibles, una para ondas longitudinales y otra para ondas transversales (o de bulto).

En las ondas longitudinales, una partícula dada se mueve en la dirección de propagación, de tal forma que el movimiento de la onda consiste únicamente en un cambio de volumen (dilatación). En el caso de las ondas transversales, las partículas se desplazan en dirección normal a la dirección de propagación y el movimiento consiste en la rotación del medio sin cambio de volumen. Las soluciones a la ecuación de onda (1.4) se pueden escribir mediante el método denominado *Método de Helmholtz*, el cual consiste en escribir

la solución completa como la suma de una parte longitudinal (L), descrita por una función escalar ϕ , y una parte transversal (T), descrita por una función vectorial Ψ , cuya dirección es normal tanto a la dirección de propagación como a la dirección del desplazamiento de las partículas [14],

$$\phi = A_L \exp[i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)], \quad |\Psi| = A_T \exp[i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)], \quad (1.5)$$

donde A_L y A_T son las amplitudes de las ondas longitudinales y transversales, respectivamente, \mathbf{k} es el vector de onda y ω es la frecuencia angular. El vector de onda está en la dirección de propagación de la onda y a través de él pueden relacionarse la longitud de onda y su velocidad:

$$\text{longitud de onda} = \lambda = 2\pi/|\mathbf{k}|, \quad \text{velocidad} = v = \omega/\mathbf{k}. \quad (1.6)$$

Por otro lado, los campos de desplazamiento, longitudinal (u_L) y transversal (u_T), están dados por:

$$\mathbf{u}_L = \nabla\phi, \quad \mathbf{u}_T = \nabla \times \Psi. \quad (1.7)$$

Sustituyendo las ecuaciones dadas en (1.7) en la ecuación de movimiento (1.4) se obtienen las velocidades de la onda en términos de las propiedades del material en que se propaga:

$$v_L = \sqrt{(\lambda + 2\mu)/\rho}, \quad v_T = \sqrt{\mu/\rho}, \quad (1.8)$$

donde λ y μ son el primero y el segundo parámetro de Lamé (o módulo de corte), respectivamente. No confundir esta λ con la longitud de onda de la ecuación (1.6).

1.1.2 Ondas planas en un espacio bidimensional

Para los sistemas de multicapas 1D, como el que se muestra en la Fig. 1.1, se supone que las longitudes de onda son significativamente más pequeñas que los espesores de las capas y **que los campos de las ondas**, por lo tanto, es válido hacer un análisis de “deformación plana” (del inglés *plane strain*). En este análisis, el sistema de coordenadas puede reducirse al plano definido por la dirección de propagación de la vibración, es decir, el vector de onda, y la normal a las capas, es decir, al plano x - z . Cuando se considera deformación plana no hay variación de ninguna cantidad en la dirección y ($\partial/\partial y = 0$), por lo que este modelo se restringe a ondas para las cuales las partículas se muevan únicamente en el plano x - z ($u_y=0$).

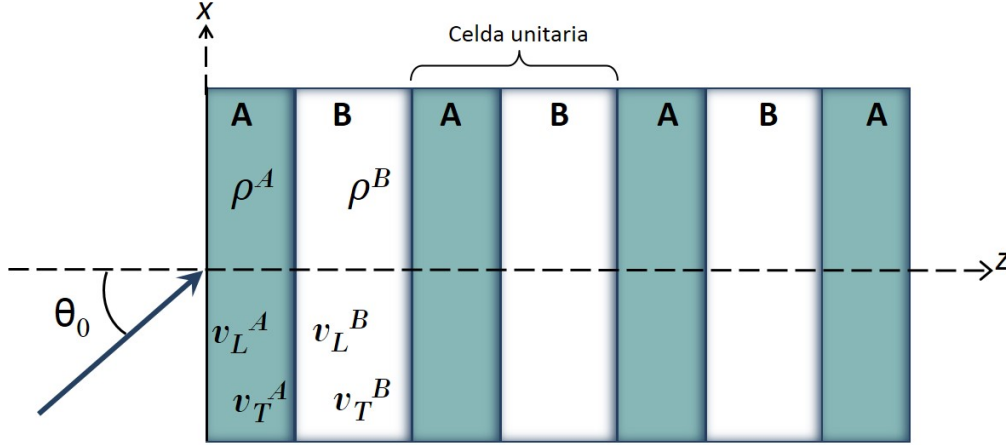


Figura 1.1: Representación esquemática de una onda incidiendo con un ángulo arbitrario θ_0 en un sistema periódico de capas alternadas A y B .

A partir de las Ecs. (1.5) y (1.7), se obtienen los desplazamientos de las ondas longitudinales y transversales:

$$\mathbf{u}_L = \nabla \phi = \begin{pmatrix} k_x \\ 0 \\ k_z \end{pmatrix} A_L \exp[i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)], \quad (1.9)$$

$$\mathbf{u}_T = \nabla \times \Psi = \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} 0 \\ \Psi_y \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} k_x \\ 0 \\ k_z \end{pmatrix} A_T \exp[i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)],$$

respectivamente, donde el potencial vectorial Ψ apunta en la dirección y , por lo que el movimiento de las partículas se encuentra en el plano x - z , como se mencionó anteriormente.

1.1.3 Superposición de ondas planas en un sistema de multicapas 1D

El modelo para describir el movimiento de ondas en sistemas de multicapas implica la superposición de ondas longitudinales y transversales, así como la imposición de condiciones de frontera en las interfaces entre las capas. En las soluciones de la ecuación (1.5) se deben considerar, en cada capa, las ondas longitudinales y transversales viajando de izquierda a derecha (L^+, T^+), y de derecha a izquierda (L^-, T^-), por lo tanto, en cada

interfaz habrá ocho ondas, como se muestra en la Fig. 1.2 [15].

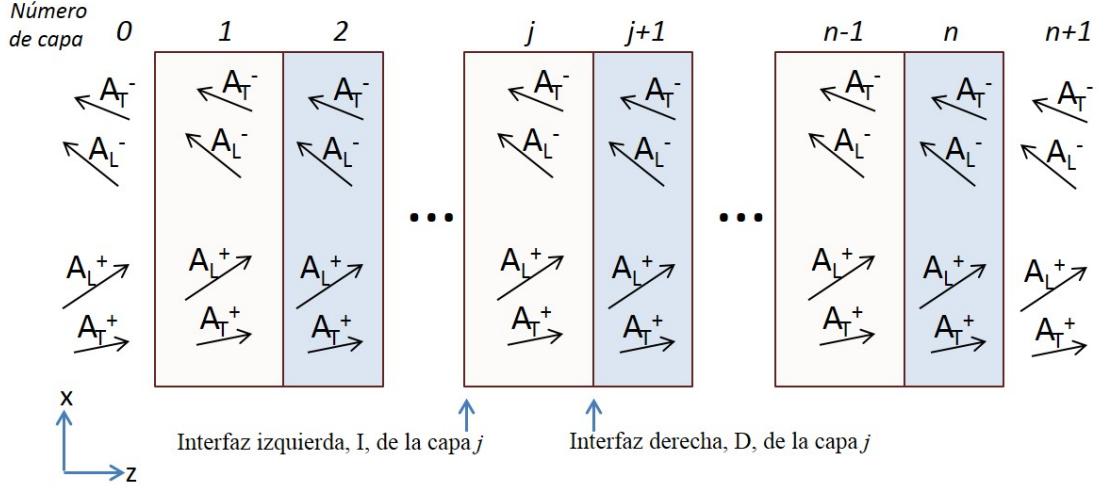


Figura 1.2: Sistema de multicapas considerado que se describe en el texto.

Como consecuencia de la continuidad de fase de la onda, en cada interfaz todas las ondas deben tener la misma frecuencia y las mismas propiedades espaciales en la dirección x , por lo tanto, todas las ecuaciones de esfuerzos y deformaciones tienen la misma ω y la misma componente del vector de onda k_x ; mientras que los ángulos de incidencia, transmisión y reflexión se encuentran definidos, según la ley de Snell, por la relación [13]:

$$\frac{k_x}{\omega} = \frac{1}{v_f} = \frac{\text{sen}\theta_L}{v_L} = \frac{\text{sen}\theta_T}{v_T}, \quad (1.10)$$

donde θ_L y θ_T son los ángulos con los que se propagan las ondas longitudinales y transversales con respecto a la normal a las capas (dirección z); v_f es la velocidad de fase y corresponde a la proyección de las velocidades de onda en la dirección x . Las componentes k_z de las ondas longitudinales y transversales en cada capa pueden escribirse en términos de la componente del vector de onda en la dirección x usando las Ecs. (1.6) y (1.8), de modo que las velocidades de onda en el material de la j -ésima capa son:

$$k_{zLj} = \sqrt{(\omega/v_{Lj})^2 - k_x^2}, \quad k_{zTj} = \sqrt{(\omega/v_{Tj})^2 - k_x^2}. \quad (1.11)$$

Si $(\omega/v_L)^2$ es mayor que k_x^2 , entonces k_{zL} es real por lo que la onda es homogénea y viaja a un ángulo diferente de cero con respecto a la dirección x . Si $(\omega/v_L)^2$ es menor que k_x^2 ,

entonces k_{zL} es imaginario y la onda es no-homogénea, o evanescente, la cual se propaga en la dirección x y decae en amplitud en la dirección z . Lo mismo ocurre para la onda transversal, cuando $(\omega/v_T)^2$ es mayor que k_x^2 , k_{zT} es real por lo que la onda es homogénea, pero si $(\omega/v_T)^2$ es menor que k_x^2 , entonces k_{zT} es imaginario y la onda es no-homogénea.

Las soluciones a las ecuaciones de movimiento pueden escribirse para la j -ésima capa como:

$$\phi_j(z_j, x_j, t) = [A_L^+ \exp(ik_{zLj}z_j) + A_L^- \exp(-ik_{zLj}z_j)] \exp(ik_x x_j - i\omega t), \quad (1.12)$$

$$\psi_j(z_j, x_j, t) = [A_T^+ \exp(ik_{zTj}z_j) + A_T^- \exp(-ik_{zTj}z_j)] \exp(ik_x x_j - i\omega t),$$

donde A_L^+ , A_L^- (A_T^+ , A_T^-) son los coeficientes desconocidos que corresponden a las amplitudes de la onda longitudinal (transversal) viajando a la derecha y a la izquierda en cada capa, respectivamente (ver Fig. 1.2. Si se considera una onda incidente con velocidad v_0 , que se propaga en la dirección arbitraria θ_0 , entonces $k_x = k_0 \text{sen} \theta_0$, con $k_0 = \omega/v_0$.

1.2 Condiciones en la frontera del problema elástico

Una onda elástica que se transmite a través de la interfaz que separa dos medios debe cumplir con las condiciones de conservación de momento y de energía. Las condiciones de frontera para ondas elásticas que se propagan a través de una interfaz entre dos materiales sólidos establecen la continuidad de los desplazamientos en x y z , así como la continuidad de las fuerzas internas descritas por los tensores de esfuerzo: normal σ_{zz} y transversal σ_{xz} , de modo que

$$\begin{aligned} (u_{\text{sólido1}})_z &= (u_{\text{sólido2}})_z, & (u_{\text{sólido1}})_x &= (u_{\text{sólido2}})_x, \\ (\sigma_{\text{sólido1}})_{zz} &= (\sigma_{\text{sólido2}})_{zz}, & (\sigma_{\text{sólido1}})_{xz} &= (\sigma_{\text{sólido2}})_{xz}. \end{aligned} \quad (1.13)$$

En un fluido ideal no se propagan ondas transversales, sólo longitudinales, por lo que pueden establecerse las siguientes condiciones de frontera para la interfaz sólido-fluido:

$$(u_{\text{sólido}})_z = (u_{\text{fluido}})_z, \quad (\sigma_{\text{sólido}})_{zz} = (\sigma_{\text{fluido}})_{zz}, \quad (\sigma_{\text{sólido}})_{xz} = 0. \quad (1.14)$$

Las componentes del desplazamiento, u_z y u_x , de acuerdo a la Ec. (1.3) y utilizando las definiciones en la Ec. (1.7), pueden escribirse como:

$$u_z = \frac{\partial \phi}{\partial z} + \frac{\partial \psi}{\partial x}, \quad u_x = \frac{\partial \phi}{\partial x} - \frac{\partial \psi}{\partial z}. \quad (1.15)$$

Mientras que las componentes de esfuerzo normal, σ_{zz} , y esfuerzo cortante o tangencial, σ_{xz} , pueden escribirse a partir de las Ecs. (1.2) y (1.7) como:

$$\sigma_{zz} = \lambda \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right) + 2\mu \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z \partial x} \right), \quad (1.16)$$

$$\sigma_{xz} = \mu \left(2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial z \partial x} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right).$$

Debido a que las condiciones en la frontera mezclan componentes tanto longitudinales como transversales, en el problema de la reflexión y transmisión de ondas elásticas en la interfaz ocurre el fenómeno de “conversión de modos”. Esto significa que una onda longitudinal incidente sobre una interfaz que separa dos medios materiales puede generar ondas reflejadas y transmitidas que contengan una componente de polarización transversal. De forma similar, una onda incidente de tipo transversal (con amplitud paralela al plano de propagación) puede dar lugar a ondas reflejadas y transmitidas longitudinales [14].

1.3 Método de la matriz de transferencia

Las ecuaciones (1.15) y (1.16) pueden escribirse para la j -ésima capa como:

$$\begin{Bmatrix} u_x \\ u_z \\ \sigma_{zz} \\ \sigma_{xz} \end{Bmatrix}_j = [\mathbf{D}]_j \cdot \begin{Bmatrix} A_L^+ \\ A_L^- \\ A_T^+ \\ A_T^- \end{Bmatrix}_j, \quad (1.17)$$

donde $[\mathbf{D}]_j$ es la matriz que describe las relaciones que hay entre las amplitudes de las ondas, los desplazamientos y los esfuerzos en cualquier posición de la capa j . Los elementos de la matriz $[\mathbf{D}]_j$ dependen de la posición z , de las propiedades del material de la capa en esa posición (v_L , v_T y ρ), de la frecuencia ω , y de la componente x del vector de onda k . Los elementos de la matriz $[\mathbf{D}]_j$ se dan en la ecuación (A.1) del Apéndice A.

Suponiendo que se conocen los desplazamientos y los esfuerzos en la primera interfaz, es decir entre el medio de incidencia y la superficie de la primera capa, las amplitudes de las cuatro ondas a la izquierda (I) de la primera capa pueden encontrarse invirtiendo la

matriz $[\mathbf{D}]_1$ de la ecuación (1.17):

$$\begin{Bmatrix} A_L^+ \\ A_L^- \\ A_T^+ \\ A_T^- \end{Bmatrix}_1 = [\mathbf{D}]_{1,I}^{-1} \begin{Bmatrix} u_x \\ u_z \\ \sigma_{zz} \\ \sigma_{xz} \end{Bmatrix}_{1,I}, \quad (1.18)$$

I denota que se evalúan las componentes de u y σ a la izquierda de la capa 1 ($z=0$). En la segunda interfaz, donde $z=d_1$ (d_1 es el espesor de la capa 1), los desplazamientos y los esfuerzos a la derecha (D) de la capa 1 pueden encontrarse a partir de las amplitudes de onda en la capa, según la Ec. (1.18):

$$\begin{Bmatrix} u_x \\ u_z \\ \sigma_{zz} \\ \sigma_{xz} \end{Bmatrix}_{1,D} = [\mathbf{D}]_{1,D} \begin{Bmatrix} A_L^+ \\ A_L^- \\ A_T^+ \\ A_T^- \end{Bmatrix}_1 = [\mathbf{D}]_{1,D} [\mathbf{D}]_{1,I}^{-1} \begin{Bmatrix} u_x \\ u_z \\ \sigma_{zz} \\ \sigma_{xz} \end{Bmatrix}_{1,I}. \quad (1.19)$$

El producto de matrices que aparece en la ecuación anterior relaciona los desplazamientos y los esfuerzos entre las superficies a la izquierda y a la derecha de una sola capa, por lo que puede llamarse “matriz de capa”, $[\mathbf{L}]$, que para la j -ésima capa se escribe como,

$$[\mathbf{L}]_j = [\mathbf{D}]_{j,D} [\mathbf{D}]_{j,I}^{-1}. \quad (1.20)$$

Los elementos de esta matriz de 4×4 se dan en la ecuación (A.3) del Apéndice A. Puesto que deben cumplirse las condiciones de contorno que establecen la continuidad de los desplazamientos y de los tensores de esfuerzo en las interfaces, se puede escribir (ver Fig. 1.2):

$$\begin{Bmatrix} u_x \\ u_z \\ \sigma_{zz} \\ \sigma_{xz} \end{Bmatrix}_{j+1,I} = \begin{Bmatrix} u_x \\ u_z \\ \sigma_{zz} \\ \sigma_{xz} \end{Bmatrix}_{j,D} = [\mathbf{L}]_j \begin{Bmatrix} u_x \\ u_z \\ \sigma_{zz} \\ \sigma_{xz} \end{Bmatrix}_{j,I}. \quad (1.21)$$

Claramente este proceso puede hacerse capa por capa para las n capas del sistema, lo que resulta en la ecuación:

$$\begin{Bmatrix} u_x \\ u_z \\ \sigma_{zz} \\ \sigma_{xz} \end{Bmatrix}_{n+1,I} = [\mathbf{S}] \begin{Bmatrix} u_x \\ u_z \\ \sigma_{zz} \\ \sigma_{xz} \end{Bmatrix}_{1,I}, \quad (1.22)$$

en donde $[\mathbf{S}]$ es el producto de todas las matrices de capa

$$[\mathbf{S}] = [\mathbf{L}]_1[\mathbf{L}]_2[\mathbf{L}]_3 \dots [\mathbf{L}]_n. \quad (1.23)$$

Finalmente, considerando que el sistema de multicapas se encuentra entre dos espacios semi-infinitos sólidos, en donde se propagan las ondas incidentes y las ondas transmitidas, se puede expresar la amplitud de las ondas del medio de transmisión ($n + 1$) en términos de la amplitud de las ondas del medio de incidencia (0) de la siguiente manera,

$$\begin{pmatrix} A_L^+ \\ A_L^- \\ A_T^+ \\ A_T^- \end{pmatrix}_{n+1} = [\mathbf{D}]_{n+1}^{-1} [\mathbf{S}] [\mathbf{D}]_0 \begin{pmatrix} A_L^+ \\ A_L^- \\ A_T^+ \\ A_T^- \end{pmatrix}_0. \quad (1.24)$$

Para el caso particular de incidencia normal, es decir, cuando $\theta_0=0$ ($k_x=0$), $A_T^+=A_T^-=0$ y $\psi=0$, la ecuación (1.17) se reduce a:

$$\begin{pmatrix} u_z \\ \sigma_{zz} \end{pmatrix}_j = [\mathbf{D}]_j \cdot \begin{pmatrix} A_L^+ \\ A_L^- \end{pmatrix}_j, \quad (1.25)$$

y la Ec. (1.24) a:

$$\begin{pmatrix} A_L^+ \\ A_L^- \end{pmatrix}_{n+1} = [\mathbf{D}]_{n+1}^{-1} [\mathbf{S}] [\mathbf{D}]_0 \begin{pmatrix} A_L^+ \\ A_L^- \end{pmatrix}_0, \quad (1.26)$$

donde las matrices $[\mathbf{D}]$ y $[\mathbf{S}]$ son matrices de 2×2 . Puede notarse que en este caso no existe conversión de modos, de tal forma que sólo se propagan ondas longitudinales.

1.4 Coeficientes de transmisión y reflexión

Para una estructura con espesor finito que se encuentra entre dos medios semi-infinitos, como la mostrada en la Fig. 1.2, se pueden calcular los coeficientes de reflexión y transmisión.

1.4.1 Incidencia Normal

Para el caso de incidencia normal $\theta_0=0$ ($k_x=0$), $A_T^+=A_T^-=0$ y $\psi=0$. A partir de la Ec. (1.26), considerando que $A_{L,n+1}^-=0$, es decir, que la única onda que entra al sistema es

la que viaja desde el medio 0 hacia la derecha, al dividir ambos lados de la ecuación entre la amplitud de la onda incidente $A_{L,0}^+$, la Ec. (1.26) se puede escribir como:

$$\begin{Bmatrix} T \\ 0 \end{Bmatrix}_{n+1} = [\mathbf{M}] \begin{Bmatrix} 1 \\ R \end{Bmatrix}_0, \quad (1.27)$$

donde $[\mathbf{M}] = [\mathbf{D}]_{n+1}^{-1}[\mathbf{S}][\mathbf{D}]_0$. $T = M_{11} - (M_{12}M_{21})/M_{22}$ y $R = -M_{21}/M_{22}$ son los coeficientes de transmisión en el medio $n + 1$ y de reflexión en el medio 0, respectivamente.

1.4.2 Incidencia oblicua

Para el caso en que el ángulo de incidencia $\theta_0 \neq 0$, existen ondas tanto de tipo longitudinal como transversal propagándose por el sistema. Si se considera que sólo inciden ondas del lado izquierdo, es decir, $A_{L,n+1}^- = 0$ y $A_{T,n+1}^- = 0$, y que además la onda incidente es sólo de tipo longitudinal por lo que $A_{T,0}^+ = 0$, entonces se pueden dividir ambos lados de la ecuación (1.23) entre la amplitud de la onda incidente A_0 y escribir:

$$\begin{Bmatrix} T_L \\ 0 \\ T_T \\ 0 \end{Bmatrix}_{n+1} = [\mathbf{M}] \begin{Bmatrix} 1 \\ R_L \\ 0 \\ R_T \end{Bmatrix}_0, \quad (1.28)$$

donde $[\mathbf{M}]$ (la matriz de transferencia) tiene el mismo significado que en la Ec. (1.27), pero ahora es una matriz de 4 x 4. Los coeficientes de reflexión longitudinal, R_L , reflexión transversal, R_T , transmisión longitudinal, T_L y transmisión transversal, T_T , son las incógnitas del sistema de cuatro ecuaciones y pueden obtenerse fácilmente, ver Apéndice A.

1.5 El problema “*fd*”

El problema de grandes valores en el producto *frecuencia·espesor* conocido como problema “*fd*”, que suele encontrarse en el método de la matriz de transferencia (MMT), fue observado por primera vez por Dunkin [16]. Existen diversas propuestas para solucionarlo [17, 18]. En el Apéndice B se describe una de estas propuestas: el método de la Matriz Global (MMG) [19]. El problema *fd* no se relaciona con la derivación del método, sino con su implementación numérica, y se manifiesta como divergencia numérica durante la

solución. La dificultad proviene del requerimiento de que los desplazamientos y esfuerzos en cada interfaz sean expresados en términos de sus valores en la siguiente interfaz, como lo expresa la ecuación (1.21). La matriz $[\mathbf{L}]$, que relaciona los desplazamientos y esfuerzos a la izquierda de la capa con los del lado derecho, está dada por la multiplicación entre $[\mathbf{D}]$ y $[\mathbf{D}^{-1}]$, por lo que sus elementos contienen términos del tipo $\exp(ik_z z) \pm \exp(-ik_z z)$, cuyos exponentes son imaginarios para ondas homogéneas y reales para ondas no-homogéneas. Cuando los argumentos de los términos exponenciales son imaginarios no existe ningún problema para evaluar los elementos de $[\mathbf{L}]$. Sin embargo, si alguno de los argumentos es real, se tendrá la suma o diferencia de un término exponencial real positivo y un término exponencial real negativo. Si los exponentes tienen valores razonablemente cercanos, no habrá problema alguno, pero si los exponentes son muy grandes o muy pequeños, entonces se tendrá la suma o diferencia de un número muy grande y uno muy pequeño. Claramente la matriz se vuelve “mal-condicionada” si los exponentes son muy grandes, además de que el problema no puede resolverse con simple escalamiento debido a la presencia tanto de términos grandes como pequeños.

La condición para que los términos exponenciales sean reales es que k_x^2 sea mayor que ω^2/v_L^2 o que ω^2/v_T^2 , la cual corresponde a la condición de una onda no-homogénea. Cuando se conocen las constantes v_L y v_T de un material, el exponente también puede ser visto en la siguiente ecuación como linealmente dependiente del producto de la frecuencia por la distancia z , desde el extremo izquierdo de la capa:

$$\exp(\pm ik_z z) = \exp(\pm i(\omega^2/v_L^2 - k_x^2)^{1/2} z). \quad (1.29)$$

Físicamente, puede verse que el problema está asociado con grandes decaimientos exponenciales de ondas no-homogéneas a través del espesor de la capa. Los términos exponenciales pequeños corresponden a ondas no-homogéneas cercanas a la interfaz izquierda de la capa. Para una capa gruesa o para altas frecuencias, la profundidad de penetración de estas ondas es pequeña comparada con el espesor de la capa, por lo tanto, las ondas tienen poca influencia en los desplazamientos y esfuerzos del lado derecho de la capa y los términos deben ser pequeños. En el límite de valores grandes del producto frecuencia-espesor, estas ondas no tienen influencia en el lado derecho de la capa por lo que el término debe desaparecer.

Por otro lado, los términos exponenciales grandes corresponden a ondas no-homogéneas cercanas a la interfaz derecha de la capa. Para valores grandes del producto

frecuencia-espesor, estas ondas tienen poca influencia sobre los desplazamientos y esfuerzos en el lado derecho de la capa. Sin embargo, como la ecuación (1.21) describe las condiciones de la interfaz a la derecha con respecto a las condiciones a la izquierda, los valores de los términos en los elementos de $[\mathbf{L}]$ aumentan con el incremento del producto frecuencia-espesor. En el límite de valores grandes del producto frecuencia-espesor, donde las ondas a la derecha de la capa no tienen influencia sobre las del lado izquierdo, el término debe ser infinito.

En la Fig. 1.3 se han reproducido los resultados de la referencia [20] para un sistema periódico ($n=18$) formado por dos materiales, plomo (A) y epoxi (B); los parámetros elásticos y velocidades de onda empleados en los cálculos son: $\rho_A = 11400$, $\rho_B = 12000$ kg/m^3 , $v_{LA} = 2160$, $v_{LB} = 2830$, $v_{TA} = 860$ y $v_{TB} = 1160$ m/s , respectivamente. Del lado izquierdo se grafica la transmitancia para el caso en que una onda longitudinal incide con un ángulo de 40° respecto a la normal a las capas y del lado derecho para un ángulo de incidencia de 48° . Ambos cálculos se han llevado a cabo utilizando el MMT tal como se presenta en la sección 2.3. En la figura de la izquierda ($\theta_0=40^\circ$) se observa inconsistencia en los resultados, pues se obtienen valores mayores que 1 para la transmitancia a bajas frecuencias. Cuando el ángulo de incidencia se cambia a 48° (Fig. 1.3) aparecen inconsistencias mayores alrededor $\omega d_A/v_{LA} = 3$. En la referencia [20] sólo se presentan los resultados para 40° con las mismas inconsistencias, que no se aclaran ni se resuelven.

En la Fig. 1.4 se muestran los resultados de la transmitancia para el mismo sistema que en la Fig. 1.3 a un ángulo de incidencia de 48° utilizando el MMG (descrito en el Apéndice B), y se compara con la transmitancia calculada por el MMT. Se observa que con el MMG se resuelven las inconsistencias obtenidas con el MMT, sin embargo, en los cálculos que se han llevado a cabo hasta el momento utilizando el MMT para los sistemas investigados, en donde se considera únicamente incidencia normal y propagación de ondas longitudinales, no se ha encontrado el problema fd , por lo que no ha sido necesario utilizar el MMG. Los espectros teóricos de transmitancia que se presentan en los siguientes capítulos se han calculado utilizando el MMT para el caso de incidencia normal, descrito anteriormente, debido a que el arreglo experimental sólo permite hacer mediciones con ángulo de incidencia cero.

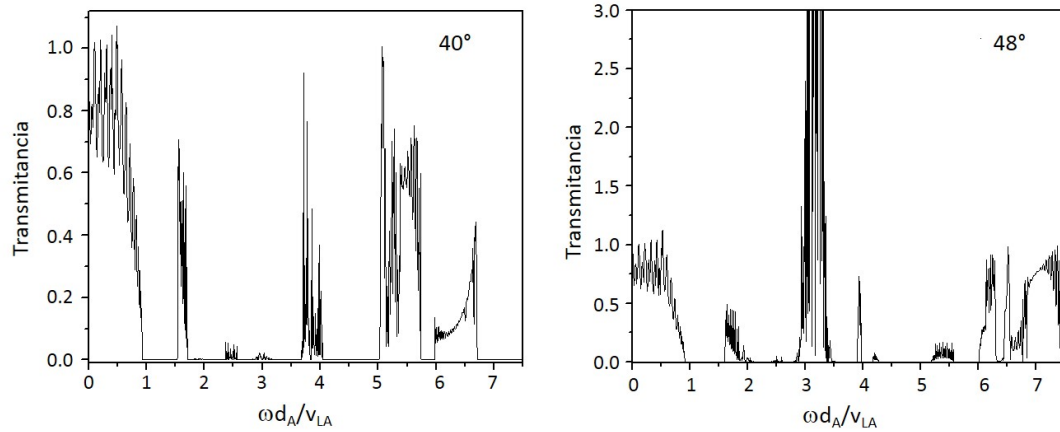


Figura 1.3: Cálculos de la transmitancia para un sistema periódico utilizando el método de la matriz de transferencia, con ángulos de incidencia de 40° y 48° , como se indica en la figura. (Resultados reproducidos de la referencia [20]).

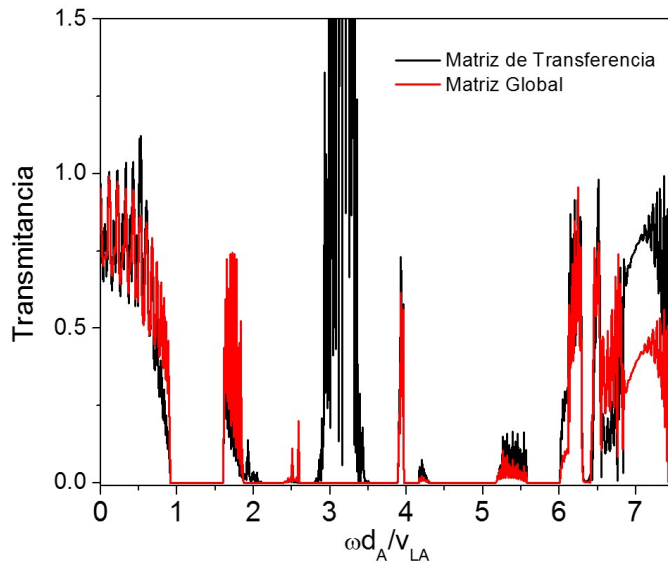


Figura 1.4: Cálculos de la transmitancia acústica para un sistema periódico utilizando el método de la matriz de transferencia (línea negra) y el método de la matriz global (línea roja).

Capítulo 2

Escaleras de Wannier-Stark y oscilaciones de Bloch

2.1 Origen del fenómeno

Un campo eléctrico estático homogéneo aplicado a un cristal semiconductor induce un movimiento oscilatorio en los electrones, lo que constituye uno de los resultados más sorprendentes y contraintuitivos de los efectos cuánticos en sólidos: las oscilaciones de Bloch (OB) electrónicas [21, 22]. Este fenómeno se demostró experimentalmente 60 años después de la predicción teórica original, con el surgimiento consecuente de las superredes semiconductoras [23]. La contraparte en frecuencia de las OB son las denominadas escaleras de Wannier-Stark (EWS); una serie de niveles de energía separados por un valor constante [24]. Durante los últimos años se han demostrado las OB y las EWS en átomos ultrafríos [25, 26], en condensados de Bose-Einstein [27], en plasmones [28], para fotones [29, 30], y también para el sonido [31–33], proponiendo diferentes formas de imitar el efecto que tiene un campo eléctrico sobre el potencial periódico de un cristal semiconductor. Recientemente, se ha demostrado teórica y experimentalmente la existencia de OB y EWS nanofonónicas en el rango de GHz a THz [34–36] en sistemas formados por una serie de nanocavidades acústicas acopladas [37, 38].

Desde un punto de vista semiclásico el cuasimomento de un estado de Bloch varía en el tiempo en forma proporcional al campo eléctrico aplicado [21, 22]; sin embargo, cuando el electrón alcanza el borde de la primera zona de Brillouin es reflejado cambiando el signo de

su cuasimomento, por lo que se induce un movimiento oscilatorio en el espacio real conocido como oscilaciones de Bloch, cuyo periodo, τ_B , es llamado *periodo de Bloch*. Este problema también puede ser analizado en el dominio espectral, ya que la presencia de un campo eléctrico produce una localización de las funciones de onda y el espectro continuo de una banda se reemplaza por una serie de estados equiespaciados energéticamente denominada escalera de Wannier-Stark (EWS) [24]. En este contexto los estados de Wannier-Stark son el equivalente a las OB en el dominio temporal. A pesar de su sencillez, por muchos años el tema fue polémico y no fue sino hasta muy recientemente que la existencia de OB electrónicas fue establecida de forma definitiva.

La condición de existencia para las OB es que el tiempo de coherencia de un electrón sea mayor que el período de una oscilación. La observación experimental de las oscilaciones de Bloch electrónicas ha resultado hasta el momento imposible en materiales en bulto, debido a que los distintos mecanismos de relajación no permiten una aceleración de los electrones hasta el borde de la zona de Brillouin [39]. En 1992, Feldmann *et al* [40] observaron por primera vez las OB en una superred de materiales semiconductores. El tamaño de la supercelda hace que la primera zona de Brillouin sea más pequeña, y por lo tanto el tiempo de observación del fenómeno también resulta menor que en el bulto. Cada vez que un electrón cumple con la condición de Bragg, se refleja cambiando su dirección de propagación. En el caso de OB electrónicas, esto se logra mediante la aceleración de los electrones usando el campo eléctrico, cambiando de este modo la longitud de onda de los electrones. Un resultado análogo podría lograrse cambiando el parámetro de red de la estructura como una función de la posición, mientras se mantiene constante la longitud de onda de los electrones. Tomando ventaja de esta alternativa, ha sido posible extender el fenómeno de las OB al caso de las ondas electromagnéticas y acústicas.

La ecuación de onda que satisfacen la luz propagándose en un medio dieléctrico es semejante a la ecuación de Schrödinger, como consecuencia, es posible predecir la existencia de OB y EWS de ondas electromagnéticas. En 2004 se observaron experimentalmente OB de fotones en estructuras basadas en microcavidades ópticas [29, 30]. Las cavidades generan estados fotónicos discretos que pueden acoplarse a través de espejos de Bragg que las separan. Introduciendo un gradiente en el parámetro nd de las cavidades es posible *inclinarse* las bandas fotónicas y de esta manera simular el efecto de un campo eléctrico en una superred. La energía de las distintas cavidades puede entonces sintonizarse cambiando el camino óptico, nd , ya sea a través del índice de refracción o del espesor de las mismas.

Los mecanismos de relajación para fotones son menos eficientes que los electrónicos, facilitando la observación de las OB. Por otro lado, los estudios previos fueron realizados en la región visible del espectro electromagnético, donde existen los elementos de óptica necesarios y las estructuras resultan del orden de varios micrómetros, accesibles por diversas técnicas de crecimiento. El estudio de las oscilaciones de Bloch fotónicas se realiza en el dominio espectral, dado que el dominio temporal resulta altamente complejo debido a las frecuencias involucradas.

Por otro lado, el sonido obedece a una ecuación de onda similar a la de las ondas electromagnéticas, en donde los parámetros importantes son la velocidad del sonido y la densidad de masa de los distintos medios involucrados. Los conceptos que se aplican a los electrones y fotones, también pueden extenderse a estructuras fonónicas, y por lo tanto es posible predecir la existencia de EWS y OB para ondas acústicas [34,35]. Por ejemplo, se han reportado las EWS en el espectro de fonones en composites piezoeléctricos [33]. También se ha propuesto la aparición de OB en estructuras de multicapas de semiconductores basadas en microcavidades acústicas [35] y se han demostrado experimentalmente en frecuencias del orden de THz, en donde se observa una dinámica similar a las OB electrónicas [36]. En estos sistemas, un conjunto de cavidades acopladas forma una minibanda (equivalente a las minibandas electrónicas de conducción en superredes), y variando la energía de los modos en forma lineal con la posición, es posible *inclinarse* dicha minibanda. De esta manera el efecto es semejante al que se produce en un sólido cuando se aplica un campo eléctrico constante.

En esta tesis se parte del hecho de que es posible establecer un paralelismo entre el potencial atractivo para los electrones de los átomos individuales y la respuesta acústica de sistemas con gradientes en sus propiedades elásticas. Esto confinará el sonido tanto espectral como espacialmente, con el fin de evidenciar la presencia de OB acústicas (OBA).

2.2 Dinámica de las oscilaciones de Bloch

La dinámica de una partícula en un potencial periódico unidimensional bajo la influencia de una fuerza estática externa, está descrita por el hamiltoniano,

$$H_W = H_0 + Fx = \frac{p^2}{2m} + V(x) + Fx, \quad V(x+d) = V(x), \quad (2.1)$$

donde F representa la fuerza estática inducida por el campo externo. Claramente, el campo externo destruye la simetría de translación del hamiltoniano sin campo eléctrico aplicado, $H_0 = p^2/2m + V(x)$. En lugar de ello, a partir de un estado propio arbitrario con $H_W\Psi = E_0\Psi$, por una traslación de n periodos, d , uno puede construir toda una escalera de eigenestados con energías de $E_n = E_0 + nFd$, la llamada escalera de Wannier-Stark.

La dinámica es no-intuitiva: en lugar del movimiento acelerado esperado hacia el infinito, se observa una oscilación coherente. Cualquier superposición de estados de la EWS tiene una evolución oscilatoria con un período de tiempo:

$$\tau_B = \frac{2\pi\hbar}{Fd}, \quad (2.2)$$

conocido como *periodo de Bloch*. Una explicación simple puede ser dada por la invariancia bajo una traslación combinada en el espacio por un período de la red d y un cambio de energía $\delta E = Fd$, lo cual conduce a un cambio de fase $\delta Et/\hbar$, es decir, en un tiempo τ_B este cambio de fase es igual a 2π . Suponiendo además que las bandas de Bloch están inclinadas con una pendiente F , el intervalo disponible para el movimiento en la dirección x se reduce a

$$L = \Delta/F, \quad (2.3)$$

donde Δ es el ancho de banda. Esta sencilla imagen de banda inclinada es útil para entender las características dinámicas del sistema. En esencia, las mismas ideas aparecen en el contexto del “*teorema de aceleración*”, donde el punto de partida es otra vez, la imagen de las bandas de Bloch. El cuasimomento K cambia linealmente con el tiempo, $K(t) = K(0) - Ft/\hbar$, hasta que alcanza el límite de la banda de Bloch, donde es reflejado por la condición de Bragg [21, 22].

Si se aplica el campo eléctrico externo, la α -ésima banda del hamiltoniano H_0 forma la EWS con las energías cuantizadas

$$\varepsilon_{\alpha,n} = \varepsilon_\alpha + nFd, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (2.4)$$

donde ε_α es la energía promedio de la α -ésima banda y n los peldaños equidistantes de la escalera.

Por otra parte, los estados propios correspondientes, los estados Wannier-Stark $\Psi_{\alpha,n}$, son estados de resonancia y las energías en la Ec. (2.4) son números complejos, donde la parte imaginaria de ε_α corresponde al tiempo de vida. La Fig. 2.1 muestra una ilustración

esquemática del potencial $\cos x + Fx$ para un campo relativamente fuerte, con una pendiente $F = 0.05$. Las posiciones de los tres primeros niveles de la escalera de Wannier-Stark están marcadas por líneas cuyo espesor denota la anchura creciente (o disminución) del tiempo de vida).

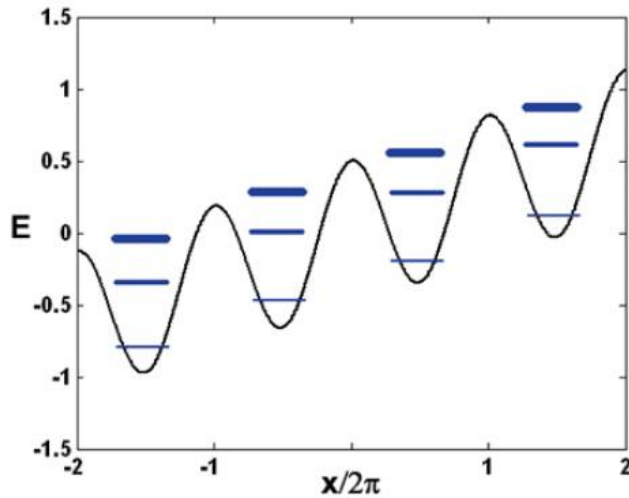


Figura 2.1: Ilustración esquemática de las resonancias de la escalera de Wannier-Stark. La intensidad de las líneas indica el ancho de los niveles, es decir, su inestabilidad.

2.3 Antecedentes

2.3.1 El caso electrónico en superredes semiconductoras

En el caso ideal, incluso un campo eléctrico infinitesimalmente pequeño sería suficiente para producir OB, aunque de muy baja frecuencia. Para un semiconductor típico con constante de red de 5 \AA y un ancho de banda de conducción de 1 eV , un campo eléctrico de 100 V/cm localizaría a los electrones en una región de $100 \text{ }\mu\text{m}$ y los haría oscilar con una frecuencia de 1 GHz . En una situación realista, en la que se toman en cuenta los procesos de dispersión, se requiere un campo eléctrico mínimo para que los electrones alcancen la parte superior de la banda de energía. Este campo es inversamente proporcional al tiempo de dispersión y al periodo del potencial de la red, por lo que debe ser del orden de 10^6 V/cm [23]. A campos tan altos, se pone en duda la validez de la aproximación semiclásica para describir el movimiento de los electrones. Sin embargo, se ha demostrado que en presencia de un campo eléctrico constante, el continuo de estados se desdobra en una serie de niveles con una energía de separación equidistante proporcional al campo apli-

cado. Wannier demostró que si una función de onda $\psi(z)$ es una solución de la ecuación de Schrödinger con energía E_0 , entonces $\psi(z + nd)$ también es solución de la ecuación, con energía $E_0 + nFd$ [24]. Estas soluciones constituyen los niveles de energía de las EWS, cuya separación $\Delta E = Fd$ puede ser escrita en términos del periodo de Bloch, $\Delta E = \hbar/\tau_B$. Las funciones de onda, $\psi(z)$, se extienden por el sólido periódico en ausencia de un campo eléctrico (Fig. 2.2(a)) pero, en su presencia, se localizan en una región cuya dimensión, en una aproximación semiclásica disminuye con el aumento del campo (Fig. 2.2(b)). En el límite de campos altos, la localización es extrema, con el electrón confinado en un sitio atómico. En este formalismo, las OB son la contraparte temporal de las EWS en el dominio de la energía. La descripción mecánico-cuántica de eigenestados es válida cuando la energía de separación entre los estados es mayor que el ensanchamiento Γ inducido por la dispersión. En el dominio del tiempo, la condición de cuantización puede escribirse como $\omega_B \mathcal{T} > 1$, donde \mathcal{T} es el tiempo característico de colisión igual a \hbar/Γ y $\omega_B = 2\pi/\tau_B$ es la frecuencia de Bloch. Esta desigualdad establece únicamente el requerimiento de que el electrón debe completar al menos un periodo de Bloch antes de dispersarse.

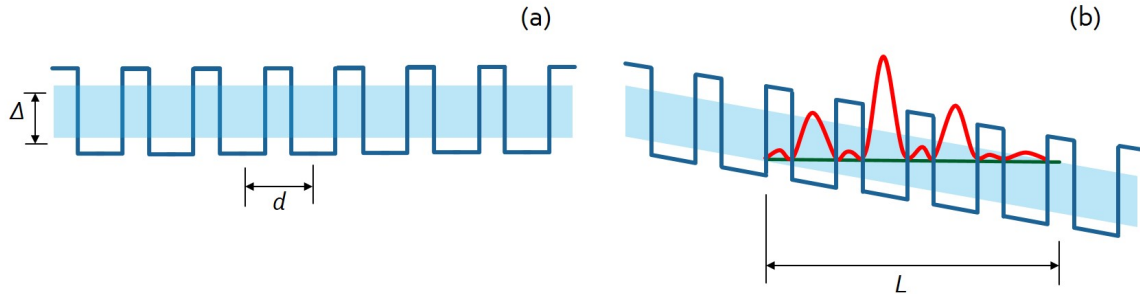


Figura 2.2: Representación esquemática de (a) una banda de ancho Δ , con estados extendidos por todo el sólido y (b) la localización de estados en una región de ancho L cuando es aplicado un campo eléctrico constante.

La existencia de los niveles de las EWS se mantuvo en controversia por mucho tiempo, incluso como un concepto, debido a que el tratamiento original se hizo basado en la suposición de una sola banda de conducción, excluyendo así la posibilidad de tunelamiento interbanda (efecto túnel). Se hicieron muchos experimentos ópticos y de transporte electrónico para tratar de evidenciar las EWS, sin embargo, no fueron concluyentes debido a que los efectos observados eran muy pequeños. Esto no es sorprendente, ya que en un semiconductor

en bulto el espaciamiento entre niveles que se lograría, aplicando un campo de 100 kV/cm sería de unos pocos mili-electronvolts. En contraste, en una superred semiconductora, para la cual el periodo es de 50-100 Å, ese espaciamiento es un orden de magnitud mayor. Este incremento permitió observar las EWS, incluso a temperatura ambiente [23].

Una superred semiconductora puede verse como una serie de pozos acoplados. La Fig. 2.3 muestra los perfiles de potencial, los niveles de energía y las envolventes de las probabilidades de las funciones de onda para (a) un solo pozo cuántico, (b) para un par de pozos cuánticos acoplados y (c) para una superred de semiconductores. El perfil en la superred es generado por las bandas de conducción y de valencia de los semiconductores que forman la estructura de multicapas (GaAs y GaAlAs, en este caso). El GaAs actúa como un pozo cuántico para los electrones y el GaAlAs como una barrera de potencial [41]. En la Fig. 2.4 se puede apreciar el efecto que el campo eléctrico tiene sobre una superred de GaAs-GaAlAs. Cada periodo de la superred es desplazado por una energía Fd con respecto a su vecino. El desacoplamiento parcial entre los pozos, producido por el campo, reduce la coherencia espacial de las funciones de onda, definida con su extensión espacial a través de la superred. Por otra parte, el cuasicontinuo de estados se divide en un conjunto de niveles discretos igualmente espaciados en energía por una cantidad Fd . En el límite de campos altos, es decir, cuando Fd es comparable con el ancho de energía de la minibanda Δ , la coherencia espacial se limita a unos cuantos pozos (y eventualmente a uno), como si los pozos consecutivos estuvieran completamente aislados uno del otro.

Las transiciones interbanda entre los estados de las bandas de conducción y de valencia dan lugar a una serie de líneas en el espectro de absorción o emisión que están igualmente separados en energía: las escaleras de Wannier-Stark. Los resultados experimentales para la medición de la absorción óptica en esta superred se muestran en la Fig. 2.5, donde se ha medido la fotocorriente utilizando diferentes intensidades del campo eléctrico. A campos muy bajos el espectro es similar al observado para campo cero. A campos intermedios los picos corresponden a las transiciones interbanda entre los estados totalmente localizados de la banda de valencia y los estados en la banda de conducción que están sólo parcialmente localizados. Se puede observar claramente que la separación de los picos está en función del campo eléctrico aplicado. A campos muy altos, los pozos cuánticos están aislados y los picos en el espectro de fotocorriente son idénticos a los de un pozo cuántico [41].

Asimismo, las OB fueron observadas en el espacio temporal a través de métodos ópticos. En la Fig. 2.6 se observan los resultados de la señal difractada en función del tiempo

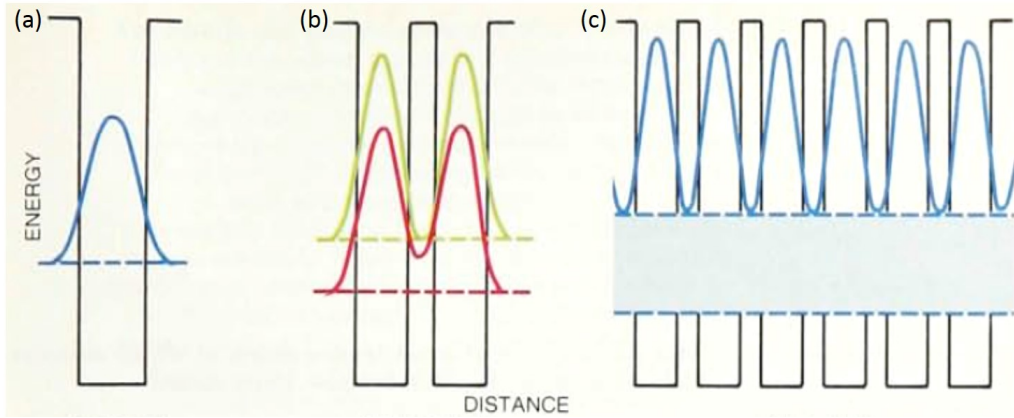


Figura 2.3: Perfiles de potencial (pozos cuadrados), niveles de energía (líneas horizontales a trazos) y envolventes de las probabilidades de las funciones de onda (curvas) para (a) un sólo pozo cuántico, (b) para un par de pozos cuánticos acoplados y (c) para una superred semiconductor (Tomado de [41]).

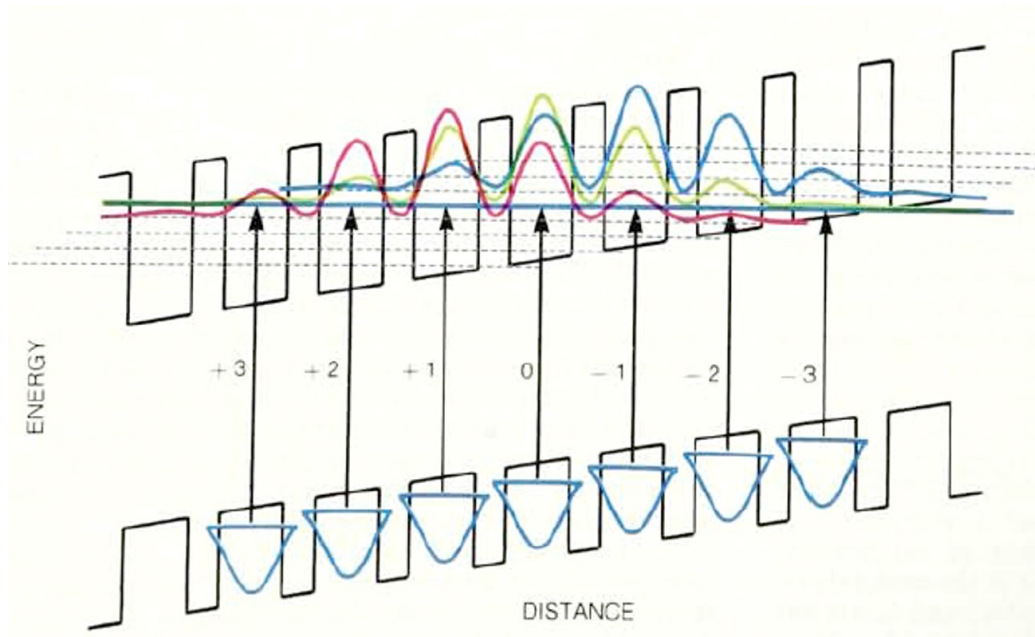


Figura 2.4: Localización parcial de la envolvente de las funciones de onda para la banda de conducción de una superred de GaAs-GaAlAs cuando está sometida a un campo eléctrico constante (Tomado de [41]).

de retardo entre dos haces incidentes sobre una superred de 100 y 17 Å; de GaAs y AlGaAs sujeta a diferentes intensidades de campo eléctrico. La señal óptica muestra oscilaciones y

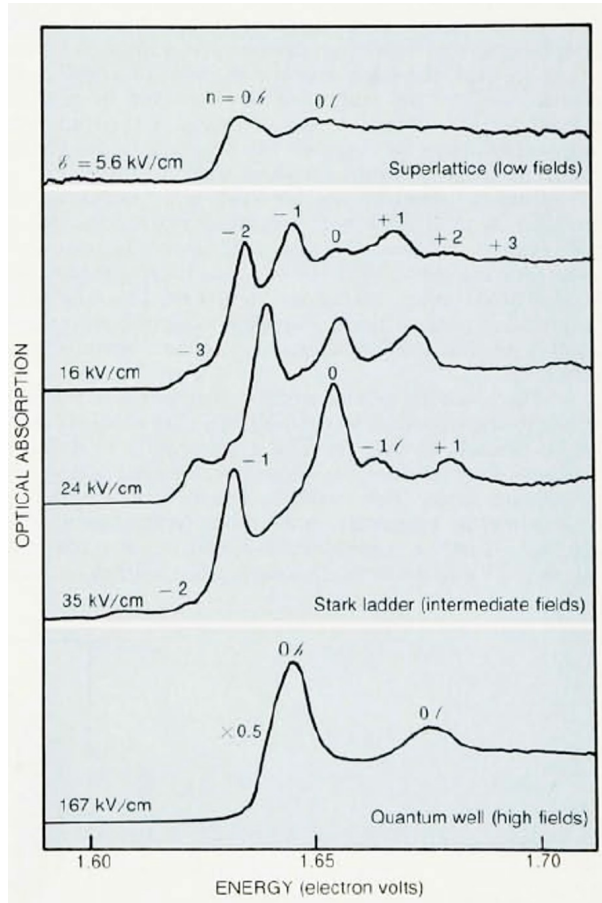


Figura 2.5: Espectro de fotocorriente en tres regímenes de campo eléctrico, para una superred de $40\text{\AA}-20\text{\AA}$ GaAs- $\text{Ga}_{0.65}\text{Al}_{0.35}\text{As}$. Las etiquetas de los picos corresponden al número n de la ecuación (2.4) (Tomado de [41]).

la frecuencia incrementa casi linealmente con el campo, lo que se interpreta como evidencia de las OB [41].

2.3.2 Caso óptico

Existen muchas analogías entre el transporte de electrones en semiconductores y la transmisión de ondas electromagnéticas en estructuras dieléctricas [42]. Los sistemas dieléctricos ordenados (periódicos), es decir, los cristales fotónicos, pueden exhibir una banda prohibida fotónica en analogía con la banda prohibida electrónica en semiconductores [43]. Los sistemas dieléctricos cuasiperiódicos como los cuasicristales de Fibonacci [44], también exhiben interesantes propiedades de transporte en resolución temporal [45]. Adicionalmente, en la contraparte óptica han sido observados fenómenos como la localización débil [46], la localización de Anderson [47], las correlaciones de corto y largo alcance [48], y

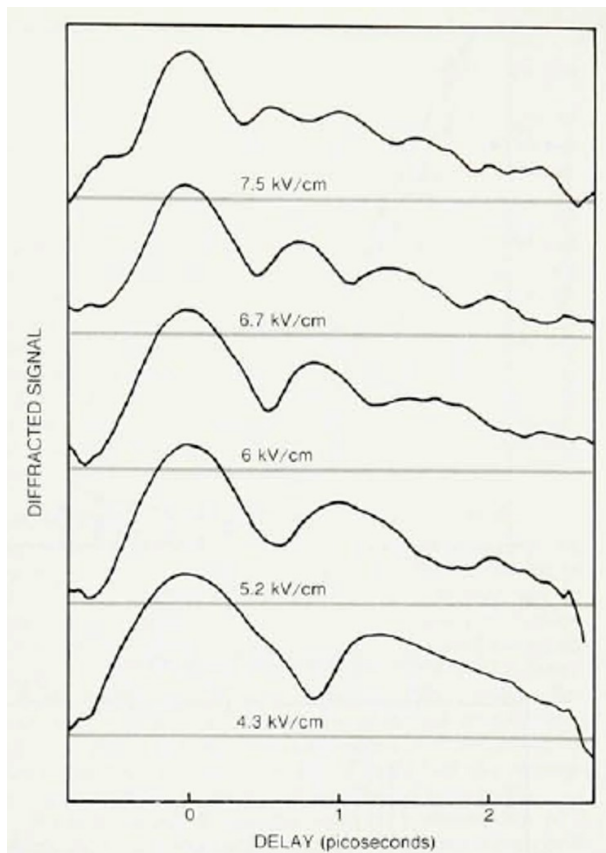


Figura 2.6: Señal difractada como función del tiempo de retardo entre dos haces incidentes sobre una superred. Las oscilaciones observadas se atribuyen a las OB (Tomado de [41]).

las fluctuaciones de conductancia universales [49]. Éstos son ejemplos de fenómenos ondulatorios, donde los efectos de interferencia desempeñan un papel crucial tanto en la óptica y como en los casos electrónicos. Estos procesos son más fáciles de estudiar con luz debido a que el tiempo de coherencia de un paquete de ondas ópticas es, por lo general, mucho más largo que el de un paquete de ondas electrónicas. Naturalmente, esto plantea la cuestión de si es posible imitar el efecto de un campo eléctrico en sistemas fotónicos y observar la contraparte óptica de las OB electrónicas.

El equivalente óptico de las EWS se ha discutido teóricamente [50], y se han propuesto diferentes sistemas fotónicos para observar oscilaciones de Bloch de ondas electromagnéticas [51, 52].

En 1990, Monsivais *et al* plantearon teóricamente la existencia de las EWS ópticas [50]. Para el caso electromagnético, el sistema en estudio corresponde a un medio con una función dieléctrica, $\epsilon(z)$, la cual, para una frecuencia ω dada, sólo depende de z , la dirección de propagación de las ondas, y puede ser expresada como la suma de una función periódica

de periodo p más un término lineal dependiente g . De esta forma, $\epsilon(z)$ satisface la relación

$$\epsilon(z + np) = \epsilon(z) + gnp. \quad (2.5)$$

La propagación de ondas electromagnéticas transversales en este sistema está descrita por:

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial z^2} + \epsilon(z)k^2 \right] F(z) = Q^2 F(z), \quad (2.6)$$

donde $F(z)$ es cualquier componente del campo electromagnético, $Q^2 = k_x^2 + k_y^2$, y $k = \omega/c$, siendo c la velocidad de la luz. Esta ecuación es similar a la ecuación de Schrödinger, donde Q^2 corresponde a la energía y $\epsilon(z)$ al potencial. Si se reemplaza z por $z - np$ en la Ec. (2.6), se obtiene

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial z^2} + \epsilon(z)k^2 \right] F'(z) = (Q^2 + gnpk^2)F'(z), \quad (2.7)$$

donde $F'(z) = F(z - np)$. Las ecuaciones (2.6) y (2.7) son similares, excepto por el término que se suma a Q^2 . Esta ecuación tiene una familia de soluciones, las EWS ópticas. La separación entre dos soluciones adyacentes (medida en unidades de k^2) es gp . El sistema que corresponde al caso descrito se muestra en la Fig. 2.7(a) y los resultados teóricos del coeficiente de transmisión en función de q^2 para un sistema con 201 capas y $gp = 0.1$, se presentan en la Fig. 2.7(b). Se consideran diferentes valores de la altura h y $q^2 = sen^2\theta$, donde θ es el ángulo de incidencia. Se observa la aparición de picos igualmente espaciados, correspondientes a las EWS ópticas.

En 2000, Malpuech *et al* propusieron teóricamente superredes ópticas basadas en microcavidades acopladas como un sistema ideal para observar OB ópticas, usando un gradiente en el índice de refracción paralelo a la dirección de propagación de la luz como el equivalente óptico de una fuerza externa (el campo eléctrico estático en el caso de electrones) [53]. Más tarde se llevaron a cabo experimentos que mostraron la aparición de EWS y OB ópticas en estructuras de silicio poroso (SP) [29, 30]. La gran ventaja del SP es que permite la fabricación de estructuras de multicapas en las que el índice de refracción puede modularse mediante la porosidad. Por ejemplo, en la Ref. [29] se utilizan multicapas de SP que consisten en una serie de microcavidades acopladas a través de espejos de Bragg, cuyo espectro se caracteriza por estados discretos confinados. Se introduce un gradiente lineal en el espesor óptico que proporciona confinamiento longitudinal al paquete de ondas ópticas debido a la inclinación de la estructura de bandas fotónicas, en analogía directa con el caso de electrones. Se confirma experimentalmente que el período de oscilación depende

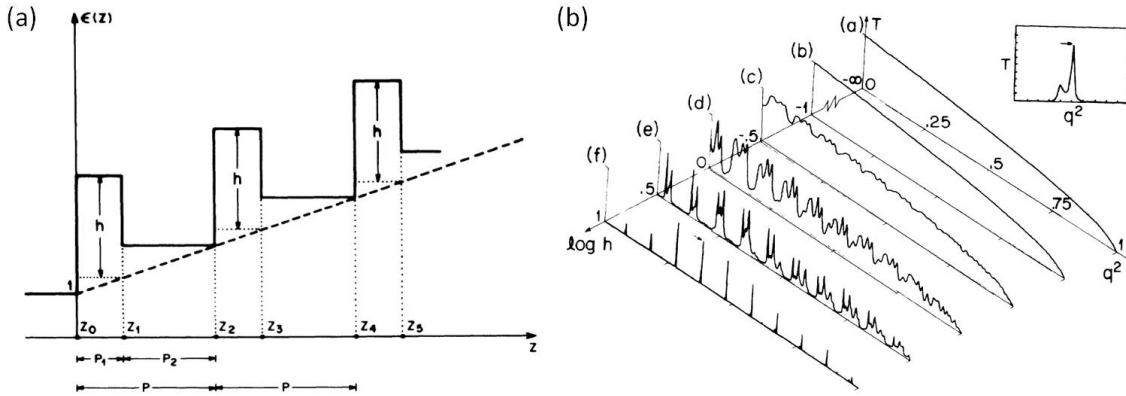


Figura 2.7: (a) Perfil de $\epsilon(z)$ en función de z considerado para observar la contraparte óptica de las EWS. (b) Resultados teóricos del coeficiente de transmisión, se observa la aparición de picos igualmente espaciados, correspondientes a las EWS ópticas (Tomado de la Ref. [50]).

linealmente del gradiente en el espesor óptico. La estructura propuesta consiste de una serie de M microcavidades $(AA)_M$ acopladas a través de subestructuras $BABABABAB$ que funcionan como reflectores de Bragg. Los índices de refracción de las capas A y B , son $n_A=1.4$ y $n_B=2.1$, para obtener un buen contraste óptico entre las capas. El espesor físico de cada capa se elige de modo que el espesor óptico $\delta = nd$, con n el índice de refracción y d el espesor físico de la capa, sea igual a $\lambda/4$, como se describió antes. De esta manera, cada cavidad, para ser resonante, tiene el espesor mínimo requerido de $\lambda/2$. Un esquema de las estructuras propuestas se muestra en la parte superior de las Figuras 2.8(a) y (b).

Para obtener oscilaciones de Bloch, debe romperse la simetría de traslación unidimensional del sistema. Esto se realiza mediante la introducción de un gradiente en el espesor óptico de las capas, dada por $\Delta\delta = (\delta_{z_N} - \delta_{z_1})/\delta_{z_1}$. Este gradiente es la contraparte óptica del campo eléctrico externo que se utiliza para generar el gradiente en las superredes del caso electrónico. El gradiente cambia ligeramente la resonancia de cada microcavidad, que se traduce en una inclinación espacial de las minibandas y las bandas prohibidas fotónicas. De esta manera, los estados fotónicos extendidos se convierten en una secuencia discreta de niveles de energía espaciados ΔE_B , que es el equivalente óptico de las EWS.

En la parte izquierda de la Fig. 2.8 se muestran cálculos teóricos del espectro de la distribución de energía para una superred de diez microcavidades acopladas. El caso (a) corresponde al caso sin gradiente ($\Delta\delta = 0$), mientras que el caso (b) corresponde al caso

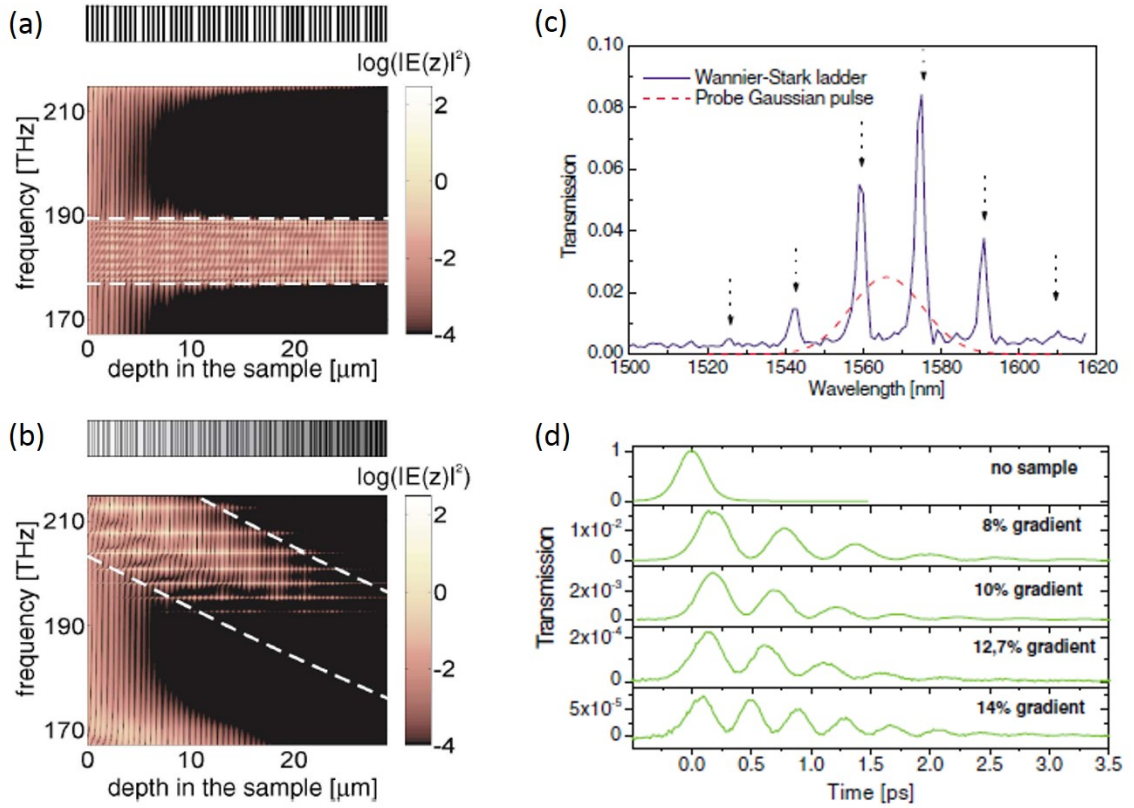


Figura 2.8: A la izquierda: Cálculo de la distribución de la energía en una estructura compuesta por diez cavidades y espejos de Bragg entre ellas (como se esquematiza en la parte superior), (a) caso sin gradiente y (b) con un gradiente $\Delta\delta = 14\%$. Las líneas punteadas indican la inclinación teórica de las minibandas. A la derecha: (c) medición del espectro de transmisión para una muestra de SP con 10 microcavidades y un gradiente $\Delta\delta = 10\%$, la línea punteada corresponde al pulso de prueba gaussiano que es utilizado para observar las OB. (d) Respuesta temporal del sistema con diferentes gradientes, las oscilaciones observadas se atribuyen a las OB ópticas (Tomado de la Ref. [29]).

en que las bandas han sido inclinadas al aplicar un gradiente $\Delta\delta = 14\%$. El periodo de las oscilaciones de Bloch esperado es $\tau_B = h/\Delta E_B$, donde h es la constante de Planck. En la Fig. 2.8(c) se presenta la medición experimental del espectro de transmisión para una muestra de SP con 10 microcavidades y un gradiente $\Delta\delta = 10\%$. En él se observan picos igualmente espaciados, atribuidos a las EWS ópticas. Posteriormente se hace pasar por la estructura un pulso de prueba gaussiano y se observa su evolución temporal. En la Fig. 2.8(d) se muestran los resultados para diferentes gradientes. Las oscilaciones observadas

son la contraparte óptica de las OB, y se ve claramente que el periodo de las oscilaciones disminuye al aumentar $\Delta\delta$.

2.3.3 Caso acústico

En general, la reflexión de Bragg puede causar OB a ondas de cualquier naturaleza (electrónicas, ópticas, acústicas o cualquier onda mecánica) que se propagan en una red con un gradiente lineal en el potencial, que puede ser causado a su vez por un campo eléctrico externo o una perturbación de cualquier naturaleza (eléctrica, magnética, de aceleración, o del campo gravitacional), véase, por ejemplo, la referencia [54]. Por lo que es posible llevar este fenómeno al caso acústico.

Las OB y las EWS acústicas han sido estudiadas y comprobadas experimentalmente en sistemas elásticos unidimensionales [33, 55], y en estructuras de multicapas de semiconductores basadas en cavidades acústicas, en las que se introduce el gradiente a través de la variación en los espesores de las cavidades [34–36].

En 1994, Mateos y Monsivais propusieron teóricamente las EWS para ondas elásticas transversales SH (del inglés *Shear Horizontal*). El sistema propuesto se muestra esquemáticamente en la Fig. 2.9 [55]. Al sistema periódico de multicapas se le aplica un gradiente en el parámetro η a lo largo de la dirección de crecimiento de las capas (z), para inclinar la estructura de bandas y generar las EWS. El parámetro $\eta = C^2/\beta^2$ es el equivalente acústico de la función dieléctrica en la ecuación de propagación de ondas electromagnéticas, β es la velocidad de la onda transversal en cada capa y C es la velocidad de la onda transversal en el medio de incidencia. La ecuación de onda en cada capa puede escribirse como:

$$\frac{d^2 u_y}{dz^2} + \eta(z) \frac{\omega^2}{C^2} u_y(z) = k_x^2 u_y(z). \quad (2.8)$$

Suponiendo que $\eta(z - jp) = \eta(z) - fjp$, donde j es un entero, $p = p_1 + p_2$ es el periodo y f es la pendiente de las líneas puntadas en la Fig. 2.9 y sustituyendo $z \rightarrow z - jp$, se obtiene,

$$\frac{d^2 u'_y}{dz^2} + \eta(z) \frac{\omega^2}{C^2} u'_y(z) = \left(k_x^2 + fjp \frac{\omega^2}{C^2} \right) u'_y(z), \quad u'_y(z) = u_y(z - jp). \quad (2.9)$$

Comparando las ecuaciones (2.8) y (2.9) se ve que $k_x^2 \rightarrow k_x^2 + fjp(\omega^2/C^2)$. Sustituyendo: $\omega^2/C^2 = k^2$ y $k_x^2 = k^2 \text{sen}^2\theta$, se encuentra que $\text{sen}^2\theta \rightarrow \text{sen}^2\theta + fjp$, donde θ es el ángulo de incidencia de la onda SH, como se muestra en la Fig. 2.9.

Los resultados teóricos para el desplazamiento en función de $q = \text{sen}^2\theta$ para un sistema con 100 capas, periodo $p = 200$ m y una pendiente $f = -0.001$, se presentan en la Fig.

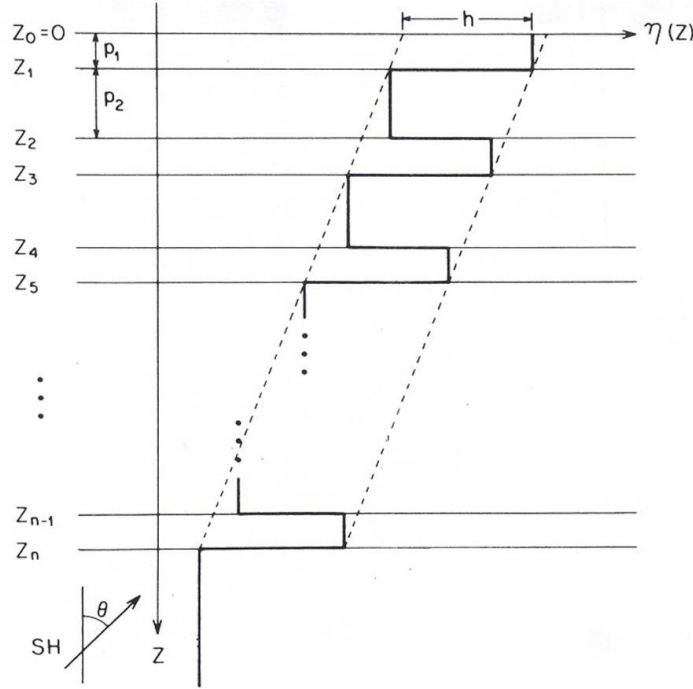


Figura 2.9: Gráfica de $\eta(z)$ como función de z para un medio elástico de multicapas. Las líneas punteadas indican la pendiente f y la periodicidad del sistema es $p = p_1 + p_2$ (Tomado de la referencia [55]).

2.10. La presencia de esta pendiente, igual que en el caso óptico, es análoga a la presencia del campo eléctrico externo en el caso electrónico. Se observa la aparición de picos igualmente espaciados con $|fp|=0.2$, correspondientes a las EWS acústicas.

En la Ref. [31] se estudia teóricamente y se confirma experimentalmente la existencia de oscilaciones de Bloch acústicas (OBA) en una superred ultrasónica formada por capas alternadas de metacrilato de metilo (Plexiglas) y cavidades de agua. Al sistema de cavidades de agua se le introduce un gradiente en sus espesores, $\Delta(1/d_{agua})$, lo cual es equivalente a un conjunto de cavidades acústicas con un gradiente lineal en sus frecuencias. Este gradiente produce una superposición de dos minibandas acústicas, resultando en la formación de resonancias en el espectro de transmisión, es decir, en la formación de una EWS acústica (EWSA). Esto, a su vez, da lugar a OBA en el espectro de transmisión con resolución temporal para un pulso acústico incidente con la posición espectral y anchura adecuadas. En la Fig. 2.11 se presentan los resultados reportados en esta referencia. La figura de la izquierda (Fig. 2.11(a)) corresponde a los cálculos teóricos (usando el MMT) para la distribución de campo de desplazamientos para el caso periódico (arriba) y para el caso en que se ha aplicado un gradiente $\Delta(1/d_{agua}) = 6\%$. A la derecha (Fig. 2.11 (b)) se muestran las mediciones de transmisión en resolución temporal para muestras con diferentes

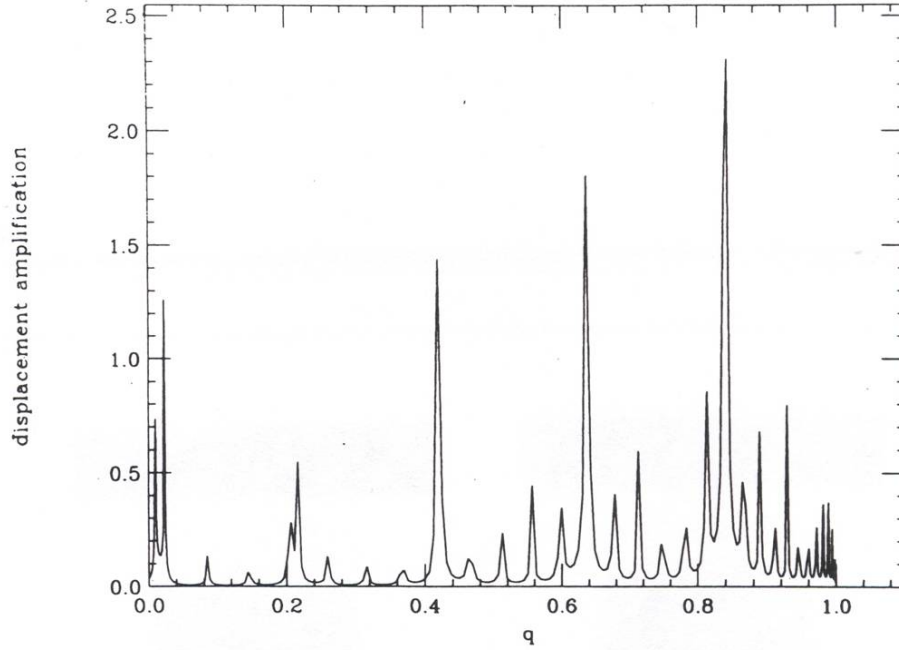


Figura 2.10: Desplazamiento en $z=0$ como función de $q = \text{sen}^2\theta$, para un sistema con una pendiente $f=-0.001$. Se observa la aparición de las resonancias de Wannier-Stark (Tomado de la Ref. [55]).

gradientes. Se observa cómo el aumento en el gradiente, disminuye el periodo de las OB.

El uso de cavidades acopladas a través de espejos de Bragg para obtener EWS y OB acústicas, tiene el mismo fundamento que en el caso óptico. Lanzillotti *et al* hicieron una amplia descripción teórica y comprobaciones experimentales sobre el diseño de sistemas de multicapas de semiconductores (AlAs/GaAs) con cavidades acústicas, en los que se introducen gradientes a través de una variación en el espesor de las capas como forma de simular el efecto del campo eléctrico externo del caso electrónico [34–36]. En la parte superior de la Fig. 2.12 se muestra el sistema de cavidades considerado, el cual consiste en 15 celdas unitarias con 2.5 periodos de espejos de Bragg de AlAs/GaAs ($\lambda_c/4$, $3\lambda_c/4$) y una capa espaciadora acústica de GaAs ($\lambda_c/2$), donde λ_c es la longitud de onda acústica del modo de cavidad confinado. El gradiente consiste en sintonizar el ancho de cada cavidad en una frecuencia de resonancia diferente y con un espaciamiento energético constante entre ellas (Δ). El caso mostrado en la Fig. 2.12 corresponde a un cambio lineal $\Delta=10.8$ GHz; con este gradiente se espera un periodo $\tau_B \sim 92.6$ ps. En la parte inferior de la Fig. 2.12 se

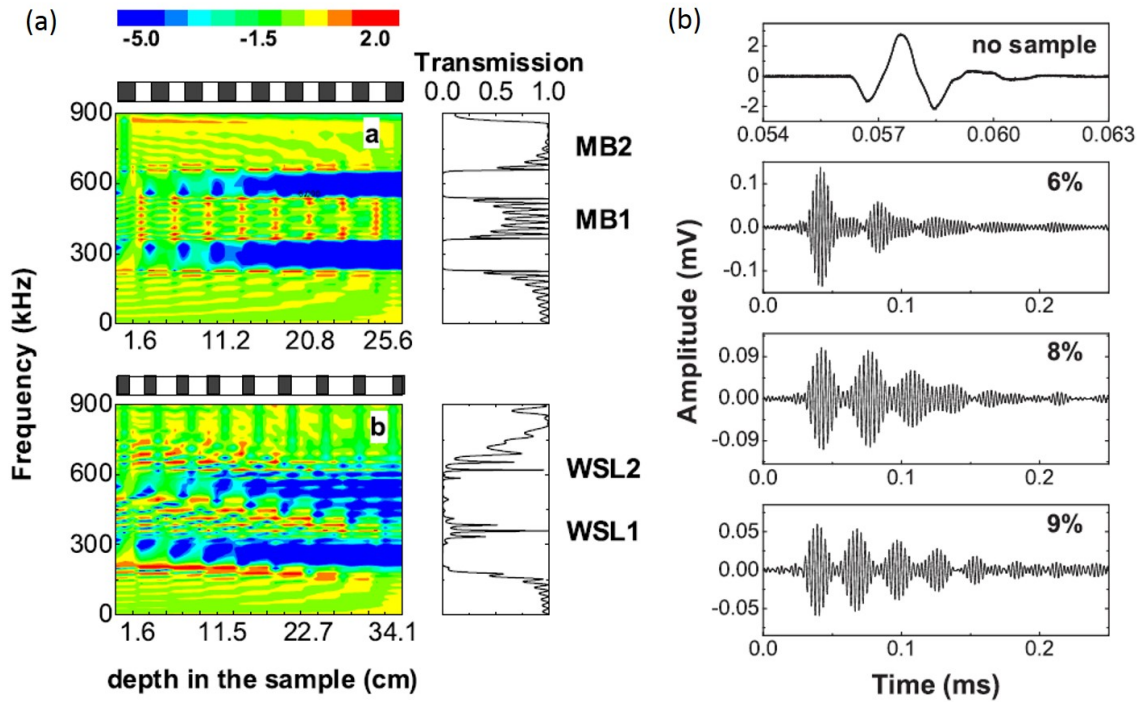


Figura 2.11: (a) Distribución del campo dentro de los sistemas. Arriba: caso periódico, abajo: con un gradiente $\Delta(1/d_{agua}) = 6\%$. (b) Mediciones experimentales de transmisión en resolución temporal para muestras con diferentes gradientes, las oscilaciones corresponden a las OBA (Tomado de la Ref. [31]).

puede ver el efecto que tiene la introducción de este gradiente en la estructura de bandas (a la izquierda) y en el espectro de reflectividad (a la derecha), en donde cada resonancia corresponde a un estado de la EWSA.

En la Fig. 2.13(a) se muestra la medición experimental de la transmisión en resolución temporal, en donde se observan las OB con un periodo de ~ 95 ps. En la Fig. 2.13(b) (línea negra) se grafica la transformada de Fourier de la señal experimental (etiquetada como E-FT), donde se observan los picos correspondientes a la EWSA.

Los sistemas descritos arriba son fabricados por epitaxia de haces moleculares (MBE), una técnica sofisticada y de alto costo, que requiere un sistema de ultra alto vacío y un control muy estricto en los parámetros de crecimiento de las capas, por lo que hacer una variación en el espesor resulta mucho más factible que modular las propiedades elásticas de las capas. En contraste, la fabricación de multicapas de SP es de bajo costo y relativamente

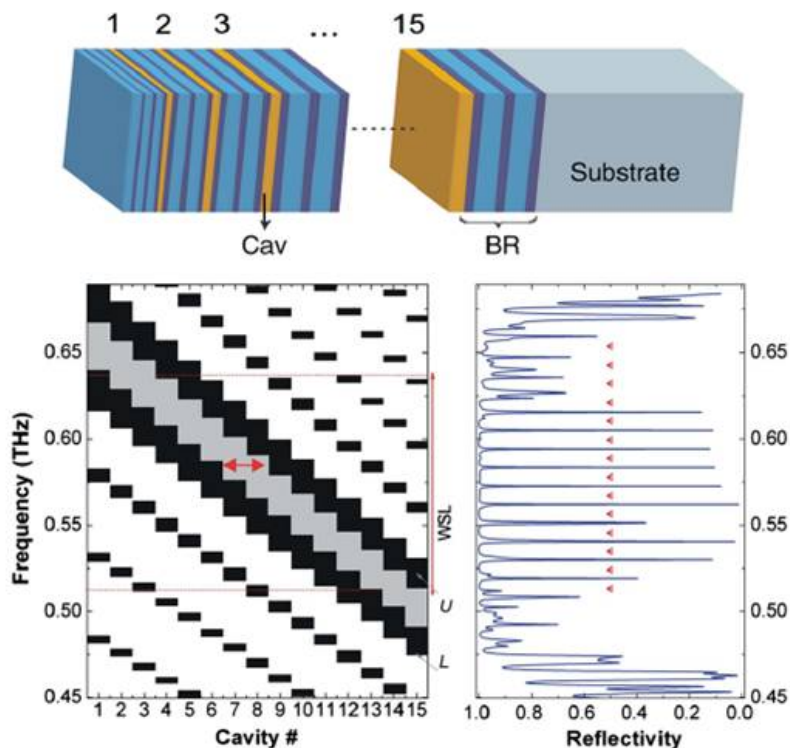


Figura 2.12: Arriba: Esquema de la estructura considerada. Abajo, a la izquierda: estructura de bandas, las regiones oscuras corresponden a bandas prohibidas y se sombrea la región en donde aparecen los modos de cavidad. Abajo, a la derecha: cálculo teórico del espectro de reflectividad acústica, en donde se observan los niveles de la EWSA [36].

fácil, además, este material permite modular, tanto los espesores, como las propiedades elásticas de cada capa. Los sistemas que se proponen y fabrican en esta tesis son estructuras de multicapas de SP, las cuales constan de gradientes lineales en las propiedades elásticas de las capas, que en el caso acústico es el equivalente al gradiente lineal que causa el campo eléctrico aplicado a una superred de semiconductores, como se describe en la siguiente sección.

2.4 Estructuras propuestas

Con base en los antecedentes expuestos en las secciones anteriores y para tener una mejor aproximación del caso acústico con el caso electrónico, aprovechando que el SP da la posibilidad de modular las propiedades elásticas de cada capa se propusieron dos tipos de estructuras basadas en multicapas de SP. Ambas parten de estructuras completamente periódicas a las que se les aplica un gradiente en la porosidad que, como se discutirá más adelante, está relacionada directamente con las propiedades elásticas de cada capa porosa.

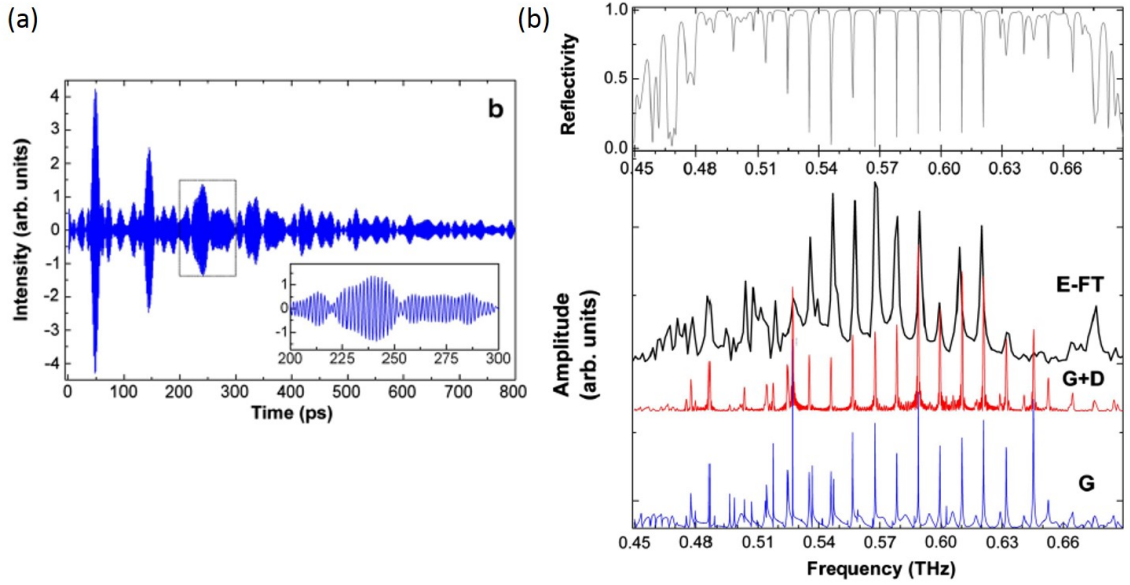


Figura 2.13: (a) Medición experimental de la transmisión en resolución temporal, se observan oscilaciones atribuidas a las OBA. (b) En línea negra se grafica la transmisión en función de la frecuencia, obtenida aplicando la transformada de Fourier a la señal experimental en (a) (Tomado de [36]).

Hasta ahora, las EWS y las OB en el caso acústico sólo se han investigado en sistemas en los que el gradiente en el potencial se simula haciendo variaciones en los espesores de las capas. En los sistemas estudiados aquí, se consideran sistemas periódicos a los que se aplican gradientes lineales en el parámetro η (que es el equivalente acústico de la constante dieléctrica en óptica), sin modificar los espesores de las capas, en analogía al efecto que tiene el campo eléctrico externo sobre el potencial periódico visto por los electrones en una superred de semiconductores. Los gradientes aplicados permiten obtener modos localizados en el espectro de transmisión acústica, es decir, se observan experimentalmente las EWSA. Para demostrar las OBA en el dominio del tiempo, se calcula la evolución temporal de un pulso gaussiano a través de la estructura. Un pulso gaussiano en el dominio de la frecuencia (f) está descrito por:

$$g(f) = \exp(-4\pi[(f - f_0)/\sigma]^2), \quad (2.10)$$

donde f_0 es la frecuencia central y σ el ancho del pulso. El parámetro σ controla la duración del pulso, por lo que su valor debe elegirse cercano al periodo de las OB.

En respuesta al pulso incidente, el tiempo y la variación espacial del campo de

desplazamientos $u(z, t)$ dentro de la muestra pueden calcularse a través de [53]:

$$u(z, t) = 1/2\pi \int_{-\infty}^{\infty} u(z, f)g(f) \exp(-i2\pi ft)df, \quad (2.11)$$

donde $u(z, f)$ es la distribución del campo de desplazamientos en cada punto z y para cada frecuencia f , el cual se obtiene por el MTT como se discutió en el capítulo anterior. Es posible calcular $u(z, f)$ y, a partir de ella, calcular también $u(z, t)$ para cualquier sistema; no obstante, es complicado tratar de medir la distribución del campo dentro de la muestra, por lo que demostrar experimentalmente las OBA de esta forma resultaría difícil, sin embargo, las OB dentro de la muestra afectan el espectro de transmisión (o reflexión), por lo que se puede demostrar su existencia a través del espectro de transmisión resuelto en el tiempo. Para esto, es posible calcular la amplitud de la transmisión resuelta en el tiempo utilizando la siguiente expresión:

$$T(t) = 1/2\pi \int_{-\infty}^{\infty} T(f)g(f) \exp(-i2\pi ft)df, \quad (2.12)$$

donde $T(f)$ es la transmisión acústica en cada frecuencia f , que teóricamente se calcula por el MTT y que también se puede medir experimentalmente en el laboratorio.

2.4.1 Estructuras periódicas

Los sistemas que se proponen en esta tesis para observar EWSA, parten de estructuras periódicas, como en el caso electrónico, las cuales deben presentar bandas prohibidas acústicas en frecuencias específicas; posteriormente se aplica un gradiente que inclinará la estructura de bandas y dará origen a la serie de modos localizados. Por lo tanto, es necesario encontrar las condiciones óptimas que permitan obtener la estructura de bandas deseada en sistemas periódicos.

En óptica, un reflector de Bragg (RB) está formado por pares de capas que se repiten, cada par consta de una capa de espesor d_1 con índice de refracción n_1 , seguida por otra de espesor d_2 con índice n_2 . El valor de la reflectividad del espejo depende del número de repeticiones de los pares de capas y del contraste de índice de refracción entre los materiales de cada capa. Una banda prohibida óptica aparece alrededor de la longitud de onda de Bragg λ_B (en el vacío), que para el caso de incidencia normal, está dada por [56],

$$\lambda_B = \frac{2}{m}(n_1d_1 + n_2d_2), \quad m = 1, 2, 3, \dots, \quad (2.13)$$

donde m es el orden de las múltiples bandas prohibidas.

Para las ondas acústicas en una estructura periódica la situación es similar, es decir, el contraste de la impedancia acústica entre las capas, da como resultado ondas que se reflejan e interfieren. La expresión para el valor de la frecuencia central f_B en la que aparecen las bandas prohibidas acústicas de los diferentes órdenes m en un espejo de Bragg acústico para incidencia normal, puede escribirse de la siguiente manera [56]:

$$f_B = \frac{2}{m}(\rho_1 d_1 / Z_1 + \rho_2 d_2 / Z_2)^{-1}, \quad m = 1, 2, 3, \dots, \quad (2.14)$$

donde los espesores de las capas están representados por d_i como antes, y Z_1 y Z_2 son las impedancias acústicas de las capas individuales. La impedancia acústica Z está dada por la ecuación (3.4). Las condiciones que maximizan el ancho de las bandas prohibidas en un RB acústico dependen del orden de la brecha. Para $m=1$, que corresponde a la primera brecha prohibida en el borde de la primera zona de Brillouin, el ancho de esta brecha está optimizado usando $\rho_1 d_1 / Z_1 = \rho_2 d_2 / Z_2$, mientras que para la primera banda prohibida en el centro de la zona de Brillouin ($m=2$), la relación es $\rho_1 d_1 / Z_1 = \rho_2 d_2 / 3Z_2$. Estas expresiones se pueden transferir directamente a las ondas electromagnéticas mediante la sustitución de las impedancias acústicas Z por los índices de refracción n_i .

La reflectividad depende del contraste de impedancias acústicas y del número de periodos. La reflectividad en el centro de una banda prohibida acústica de una estructura con N pares de capas, en donde las capas individuales tienen impedancias acústicas Z_1 y Z_2 , está dada por [56],

$$R_B = \left[\frac{(Z_2/Z_1)^{2N} - 1}{(Z_2/Z_1)^{2N} + 1} \right]^2. \quad (2.15)$$

Por lo tanto, si la relación de impedancias es suficientemente grande, se obtendrá $R_B \sim 1$, es decir, se obtendrán brechas prohibidas en la transmisión acústica. Para una estructura con capas alternadas con porosidades de 43 y 73%, y $N=8$, se obtiene $R=0.99999997$.

La porosidad y el espesor de las capas que forman los sistemas que se estudian en este trabajo son elegidas para obtener, en el caso periódico, las primeras bandas prohibidas dentro del ancho de banda de respuesta de los transductores utilizados para las mediciones de transmitancia acústica, cuyos resultados se presentan en el Capítulo 5, de tal manera que al aplicar los gradientes, las resonancias de Wannier-Stark aparezcan alrededor de 1.1 GHz, que es la frecuencia central de la respuesta de los transductores.

2.4.2 Caso con gradiente I

El primer caso considerado corresponde a sistemas con capas de porosidad constante alternadas por capas con gradientes lineales en el parámetro $\eta(z)$, donde $\eta(z)$ es el parámetro equivalente a la constante dieléctrica en óptica. En el caso acústico $\eta(z) = C^2/v_L(z)^2$, donde $v_L(z)$ es la velocidad longitudinal del sonido en la dirección z (la dirección de crecimiento de las capas), mientras que C es una constante con las mismas unidades, en este caso corresponde a la velocidad longitudinal del sonido en el medio de incidencia [55]. Un esquema de las estructuras propuestas se presenta en la Fig. 2.14. A la estructura periódica (Fig. 2.14(a)), se le aplica un gradiente lineal en el parámetro $\eta(z)$ de una de las capas, como se muestra en el esquema de la Fig. 2.14(b), la pendiente (indicada con una línea punteada) tiene como objetivo inclinar la estructura de bandas, en analogía al efecto que tiene el campo eléctrico externo en el caso electrónico.

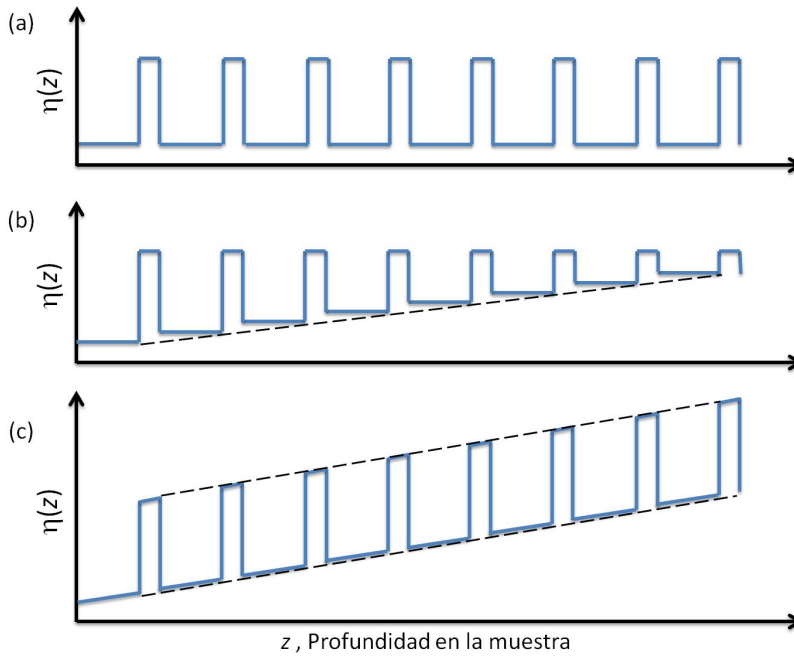


Figura 2.14: Parámetro $\eta(z)$ como función de la profundidad, z , en la muestra. (a) Caso periódico, (b) caso con gradiente I, y (c) caso con gradiente II (ver texto para más detalles).

2.4.3 Caso con gradiente II

El segundo caso que se considera es un sistema con un gradiente totalmente lineal en el parámetro $\eta(z)$ de todas las capas, como se muestra en la Fig. 2.14(c). Esta estructura reproduce con exactitud el efecto que el campo eléctrico tiene sobre el potencial periódico

para el caso electrónico, y que es causa de las OB. El gradiente lineal se presenta en toda la estructura, originalmente periódica, generando la inclinación de las minibandas y la aparición de modos localizados espacial y espectralmente, es decir, la EWS del caso acústico.

Capítulo 3

Silicio poroso

3.1 Historia del silicio poroso

El SP fue descubierto en 1956 por Ingeborg y Arthur Uhlir en Bell Telephone Laboratories, mientras trabajaban en ataque electroquímico de silicio con soluciones de ácido fluorhídrico (HF) con la intención de pulir y modelar microestructuras de silicio. Observaron que el silicio se pulía sólo por encima de una densidad de corriente umbral, mientras que por debajo de esta densidad de corriente, se formaban películas de color rojo o negro en la superficie [57]. No obstante, estas películas causaron poco interés en ese entonces. Turner realizó experimentos similares, sin embargo, los trabajos de Ingeborg y Uhlir son los reconocidos [58]. La naturaleza porosa de la película se reportó por primera vez en 1971 por Watanabe y Sakai, y posteriormente por Theunissen en 1972 [59, 60]. El tema principal de la investigación hasta los años 90 fue el uso de SP oxidado como un aislante dieléctrico [59, 61, 62]. Sin embargo, un artículo de Canham en 1990 sobre la fotoluminiscencia en el SP a temperatura ambiente despertó un interés más amplio por este material, dando lugar a una intensa actividad científica sobre las propiedades ópticas del SP [63]. Poco después, se informó sobre la electroluminiscencia en SP y numerosos grupos intentaron fabricar LEDs basados en SP con emisiones en diferentes longitudes de onda [64, 65].

Las propiedades ópticas del SP han dado lugar a un gran interés por investigar otras propiedades y usos de este material. Incluso, antes del descubrimiento de la fotoluminiscencia, se sabía que el SP presentaba diversas morfologías [66]. Las propiedades ópticas pasivas del SP, es decir, el índice de refracción y la absorción, también fueron in-

vestigadas antes de 1990 [67]. Esto forma parte de los antecedentes de los filtros ópticos basados en estructuras de multicapas de SP reportados por Vincent [68] y Berger *et al* en 1994 [69]. La formación de estructuras de multicapas para su uso como filtros ópticos se ha convertido en una técnica estándar. En 1995 Mazzoleni y Pavesi informaron sobre el uso de filtros de Fabry-Pérot de SP (dos pilas de pares de capas que cumplen la condición de Bragg, $\lambda/4$, con una capa espaciadora de espesor $\lambda/2$ entre ellas) para sintonizar y estrechar la emisión de fotoluminiscencia del SP [70]. Poco después, Pavesi *et al* reportaron una mejora en la línea de emisión de fotoluminiscencia utilizando el mismo tipo de filtros, indicando un acoplamiento de la emisión espontánea del SP con el modo de la cavidad de la estructura de multicapas [71]. Esto dio lugar a la incorporación de materiales dentro de la estructura porosa para tomar ventaja del mayor acoplamiento entre el campo y la materia en la microcavidad. Por ejemplo, el dopaje con iones de erbio en una estructura Fabry-Pérot resultó en una fotoluminiscencia mayor en el infrarrojo (IR) a una longitud de onda máxima de $1.536 \mu\text{m}$ [72].

Debido a la flexibilidad y la relativa facilidad con que se pueden fabricar los sistemas de multicapas en SP, se ha investigado gran diversidad de estructuras. Ya se han mencionado estructuras ópticas de multicapas básicas, tales como espejos de Bragg y filtros de Fabry-Pérot. Éstos pueden construirse de tal manera que las características ópticas cambien debido a un efecto externo. Como las características espectrales de estas estructuras pueden ser muy finas y estrechas, pequeños cambios en el espesor óptico de una capa cambian significativamente las características espectrales. La incorporación de cristales líquidos en los poros de una estructura periódica de SP da la capacidad de modular las características del filtro, mediante el control de un voltaje aplicado (o a través de la temperatura), por lo tanto, estos sistemas pueden utilizarse como interruptores ópticos [73–76]. De la misma forma, uno puede tener filtros con características dependientes de la polarización, como es el caso de los filtros dicroicos fabricados en Si (110) [77]. Estos elementos ópticos también pueden ser utilizados como sensores, ya sea mediante la detección de la variación en las características espectrales como un indicativo del grado de llenado de los poros, por ejemplo, con la humedad del aire, u otros gases o líquidos; o las paredes de los poros pueden ser sensibilizadas o activadas con diferentes materiales que reaccionan a moléculas más específicas [78, 79].

La posibilidad de controlar arbitrariamente el índice de refracción con la profundidad, ha dado lugar a la fabricación de gran diversidad de estructuras con diferentes perfiles

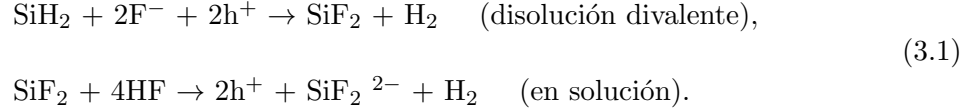
de porosidad [80,81], por lo que existen en la literatura numerosos reportes de investigación sobre SP, principalmente para su uso en dispositivos ópticos y, sólo muy recientemente, se ha llevado a cabo la investigación de sus propiedades elásticas para incorporarlos a dispositivos acústicos [82–84]. Se ha reportado la fabricación y caracterización de reflectores de Bragg, filtros, microcavidades y dispositivos como resonadores acústicos basados en SP [56,85,86]. El tema de interés en esta tesis es el fenómeno de las Oscilaciones de Bloch Acústicas en sistemas de multicapas basados en SP, por lo que se requiere investigar las propiedades elásticas del SP, como se discute más adelante.

3.2 Formación del silicio poroso

El SP posee un área superficial muy grande en relación con su volumen, y tiene propiedades ópticas y acústicas diferentes al Si cristalino. El SP consta de regiones vacías de material, conocidas como poros, que están conectados a través de líneas finas y puentes de Si cristalino. La forma y el tamaño de los poros pueden ser muy diferentes, dependiendo de las condiciones iniciales de la oblea de Si a partir de la cual se obtiene el SP. El Si es un material anisotrópico, lo que permite tener aún más variables para el control de las estructuras y morfologías en el SP. Dada la gran variedad de parámetros que controlan la porosidad, la profundidad y la morfología de SP, este material es altamente sintonizable.

La forma más común de fabricar SP, que se utiliza en esta tesis, es mediante una reacción electroquímica en la que se coloca la oblea de Si cristalino dopada en un electrolito basado en HF mientras se aplica una corriente externa. Este método permite el control de la porosidad y el espesor de las capas. La reacción de formación de los poros depende de la disponibilidad de huecos en la interfaz electrolito-Si. En el sistema para llevar a cabo la reacción, la oblea de Si tiene polarización positiva (ánodo). Ésta se pone en contacto con el electrolito, basado en HF, en el que se coloca un electrodo de platino (Pt) con polarización negativa (cátodo). El mecanismo de iniciación de los poros es aún objeto de debate, sin embargo, hay sugerencias de que los defectos o ligeras variaciones en el potencial de la superficie debido a defectos o átomos de dopaje, son el punto de partida de los poros. Cuando se aplica la corriente externa, los huecos de la muestra y los iones F^- en el electrolito, se mueven hacia la interfaz electrolito-sustrato y reaccionan. La cinética de reacción exacta no se conoce bien y puede variar bastante dependiendo, en gran medida, de los parámetros de formación, lo que es evidente al obtener diferentes morfologías en

el SP. La cinética de reacción y los mecanismos de formación de SP que se dan en las referencias [87–89] son las más aceptadas. La reacción principal durante la formación de SP fue sugerida por Lehmann y Gösele [90]:



Cómo se forman los poros es también una cuestión que todavía está en discusión. Hay tres modelos predominantes: el modelo de Beale, el de confinamiento cuántico y el de difusión limitada.

El modelo de Beale propone que en meso- y micro- SP las paredes de los poros se agotan de portadores de carga debido a la superposición de capas de agotamiento, que resulta en una concentración del campo eléctrico en las puntas de los poros, lo que a su vez aumenta la concentración de huecos en ellas y deriva en el ataque sobre las mismas [66]. El modelo de difusión limitada describe la formación de poros como resultado de un proceso en el que los huecos se mueven de forma aleatoria [89]. En este modelo, los huecos se mueven hacia la interfaz electrolito-sustrato y lo más probable es que lleguen primero a la punta de un poro, por lo tanto, la formación de SP está limitada por la difusión de los huecos. Estos modelos pueden describir, en cierta medida, la formación de micro- y meso- SP, sin embargo, en el macro-SP no es común que se presente la superposición de capas de agotamiento en las paredes de los poros, por lo que el mecanismo de formación es diferente [91]. La formación de macro-SP no se tratará aquí.

El modelo más aceptado en la comunidad de SP, es el sugerido por Lehmann y Gösele, basado en el confinamiento cuántico de portadores de carga dentro de los poros, los cuales son de tamaño nanométrico en micro- y meso- SP [90]. Este confinamiento cuántico da lugar a un aumento en la banda prohibida, en comparación con la del Si en bulto, lo cual introduce una barrera para los huecos que van desde el bulto hacia la estructura porosa de Si. En ésta, la que la concentración de huecos aumenta cerca de las puntas de los poros resultando en la disolución del Si. La disolución del Si en una solución de HF se inicia por el movimiento de un hueco, debido al campo eléctrico aplicado, desde el bulto de la oblea de Si hasta la interfaz electrolito-Si, donde los átomos de Si de la superficie de la oblea están hidrogenados (ver Fig. 3.1(a)) [92]. El transporte de los huecos h^+ en la oblea de Si y de los iones de flúor F^- en el electrolito es fundamental para el proceso de disolución, donde el número de huecos en movimiento depende de la densidad de corriente

aplicada. Cuando el HF_2^- en la solución electrolítica alcanza la superficie del Si, éste se disocia en iones de HF y F^- , el hueco cerca de la superficie debilita el enlace Si-H y el ión F^- forma un enlace con el Si (como se muestra esquemáticamente en la Fig. 3.1(b)). Cuando uno de los enlaces Si-F se establece, causa un efecto de polarización, permitiendo la formación del segundo enlace Si-F y provocando que un electrón migre hacia la oblea de Si. Los hidrógenos liberados forman hidrógeno de exceso (H_2), que se escapa en forma de burbujas a través de la solución electrolítica. Los dos enlaces iónicos Si-F que se forman, polarizan los enlaces de Si lo suficiente para debilitarlos y permitir un nuevo ataque por la solución de HF (como aparece en la Fig. 3.1(c)). Una vez que los cuatro enlaces del Si se rompen, se retira un átomo de Si en forma de tetrafluoruro de silicio (SiF_4) en el punto de reacción, dejando atrás una irregularidad en la superficie de la oblea que se desarrolla en un poro (ver Fig. 3.1(d)). Los átomos restantes de la superficie de Si terminan enlazados a átomos de hidrógeno y la superficie regresa a su estado original hasta que otro hueco esté disponible. La formación de poros se produce predominantemente en el fondo del poro, ya que la densidad de campo eléctrico se concentra en estas regiones, sin embargo, también se producen ramificaciones laterales [93]. La red restante de nanocristales de Si, no es atacada debido a que estas regiones están agotadas de huecos, por esta razón, la reacción de formación de SP es *auto-limitante*. El gas hidrógeno que se forma en la reacción puede interferir de manera importante durante el ataque, cambiando la concentración del electrolito y provocando que las capas no crezcan de forma homogénea con respecto a la profundidad. Este efecto se investiga más adelante.

De manera similar a la mayoría de las uniones entre semiconductores, en la interfase de silicio/electrolito se forma una zona de agotamiento (ver Fig. 3.2). La anchura de la zona de agotamiento depende del dopaje y puede explicar los diferentes tamaños de poros que se encuentran en silicio tipo p^- y p^+ . Además, la anchura de la capa de agotamiento depende de la curvatura de la superficie: la anodización se produce preferentemente en el fondo de los poros donde la curvatura es más grande. Por otra parte, cuando las zonas de agotamiento de los poros adyacentes se encuentran, el flujo de corriente es repentinamente anulado, por lo que se bloquea el ataque al silicio y se evita el colapso de los poros. La disolución se produce esencialmente en el fondo de los poros, donde está disponible una mayor cantidad de huecos, como se representa esquemáticamente en la Fig. 3.2. De esta manera, el ataque en el Si se da en la dirección en la que se aplica la corriente anódica [94]. Una vez que se forma una capa de SP, no se produce más ataque electroquímico sobre ella, en cambio, se

inicia un ataque más lento, debido a su permanencia dentro de la solución de HF.

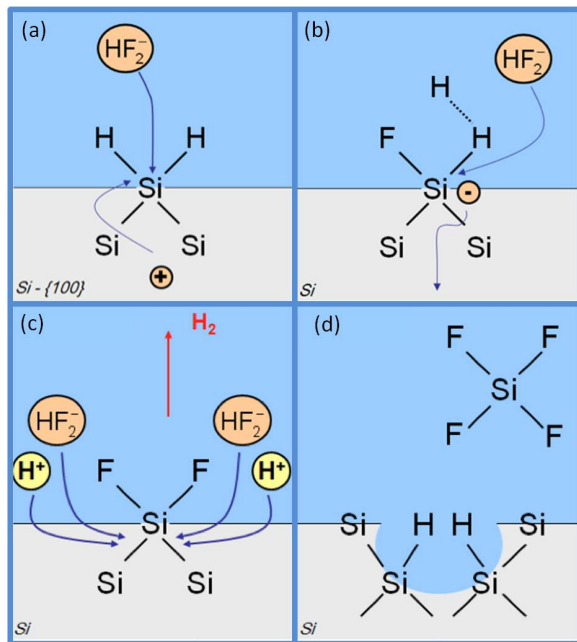


Figura 3.1: Diagrama esquemático de la reacción durante el ataque electroquímico al Si en una solución de HF/Etanol [92].

Es evidente que los poros juegan un papel importante para la formación de SP, dando lugar a un mecanismo auto-limitante con el agotamiento de los huecos como el agente limitante. La reacción de disolución comienza en los defectos de la superficie de la oblea de Si, donde los poros se forman y sus paredes se erosionan hasta que ya no tienen huecos disponibles. Este proceso de formación evita que los poros creados reciban nuevos ataques y la reacción procede sólo al final del poro, como se representa en la Fig. 3.2. Esto último es una de las principales ventajas del proceso de formación del SP ya que, una vez que se ha formado una capa porosa, no se produce más ataque electroquímico sobre ella durante las siguientes variaciones de densidad de corriente. Por lo tanto, la porosidad puede ser modulada en profundidad con respecto al espesor del sustrato de Si, lo que permite la fabricación de multicapas con cualquier perfil de porosidad [80].

El SP se forma en un intervalo limitado de densidades de corriente, como se refleja en la curva corriente-voltaje (I-V) medida para el sistema electrolito-Si, y que se muestra en la Fig. 3.3. Esta curva I-V, tomada de la Ref. [89], muestra la relación corriente-voltaje en un sistema que consiste en una oblea de Si de tipo *p* inmersa en un electrolito basado en HF bajo corriente directa e inversa, con iluminación y sin ella. Si se ilumina la muestra durante el ataque electroquímico, habrá huecos generados por los fotones que pueden reaccionar

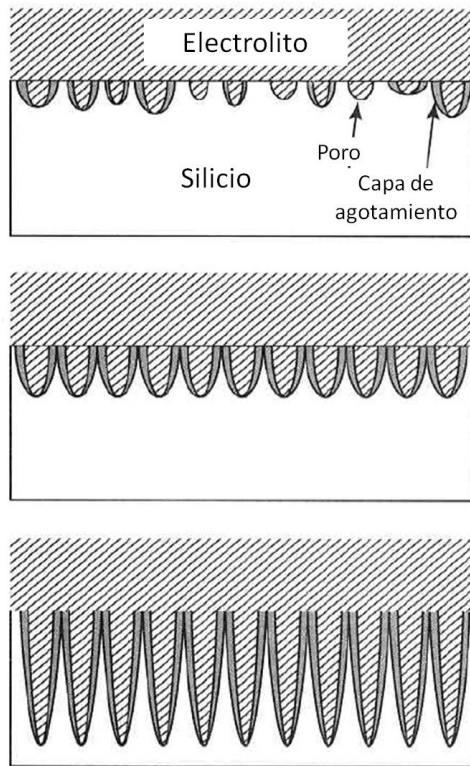


Figura 3.2: Formación de los poros en el silicio poroso. La figura superior muestra la etapa inicial, donde los poros se desarrollan al azar en la superficie de silicio. En la parte central se muestra el proceso de autorregulación. Cuando las zonas de agotamiento alrededor de cada poro se superponen, el crecimiento del poro cambia de un crecimiento isotrópico a un crecimiento altamente direccional. La figura inferior muestra cómo la disolución avanza sólo en el fondo de los poros [94].

con los iones F^- . Esto se utiliza frecuentemente en la fabricación de SP tipo n , mientras que, como puede verse en la Fig. 3.3, en la formación de SP tipo p , la iluminación tiene un efecto muy pequeño, ya que los huecos generados por fotones tienen una concentración casi insignificante. Las curvas I-V para Si tipo n en las mismas condiciones son un poco diferentes, pero se omiten porque en esta tesis se utiliza solo Si tipo p . En la curva para polarización directa aparecen dos picos. Por debajo del primer pico de corriente, identificado como la corriente de electropulido J_{PS} , se encuentra la región de formación de SP (región sombreada de la Fig. 3.3). Por otro lado, la región de electropulido se encuentra entre los dos picos de corriente y por encima del segundo pico se encuentra la región de electropulido con oscilaciones de potencial; por arriba de J_{PS} , el Si se disuelve y no se forman poros. De manera adicional, existen algunas tendencias generales que se observan en las curvas I-V cuando se cambian las condiciones de la reacción, por ejemplo, al aumentar la concentración de HF, el primer pico se desplaza hacia valores de corriente más altos, mientras que el aumento de dopaje en el sustrato hace que el pico se desplace a corrientes más bajas.

Hasta este punto, se puede decir que los principales requisitos para la formación

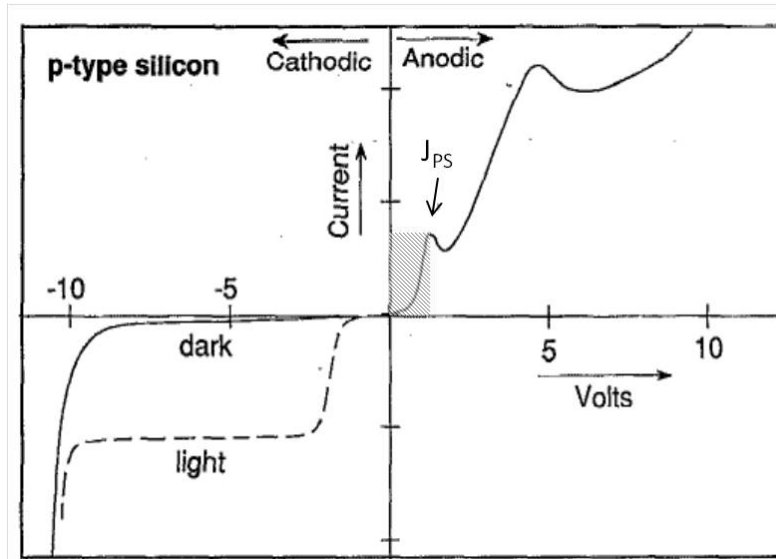


Figura 3.3: Curva característica corriente-voltaje para Si dopado tipo p en HF acuoso. La línea continua indica la respuesta en oscuro y la línea discontinua muestra la respuesta bajo iluminación. El primer pico de corriente J_{PS} corresponde a la formación de un óxido anódico superficial formado durante, y requerido para, el electropulido. El área gris indica el régimen útil para la formación de SP (Tomado de [89]).

de silicio poroso son:

- La oblea de silicio debe ser polarizada anódicamente, con polarización directa para silicio dopado tipo p , y polarización inversa para silicio dopado tipo n .
- La densidad de corriente debe encontrarse por debajo del valor crítico J_{PS} , según se muestra en la Fig. 3.3.

Cuando no se cumple la segunda condición, la reacción está limitada por la transferencia de masa de la solución: los huecos se acumulan en la interfase Si-HF y ocurre el electropulido.

3.3 Características del silicio poroso: tamaño de poro y morfología

El resultado del ataque electroquímico sobre el Si, dentro de las limitaciones discutidas anteriormente es usualmente, una estructura porosa. Usualmente, las paredes de los poros de la estructura permanecen iguales después del ataque, debido a que las reacciones

electroquímicas tienen lugar en el fondo de los poros. Sin embargo, dependiendo de los parámetros de la anodización, la estructura puede variar en gran medida. El tamaño de los poros es una propiedad sensible a varios parámetros, como la densidad de corriente, la resistividad de la muestra, la concentración de HF y la composición del disolvente. La clasificación utilizada está definida por la Unión Internacional de Química Pura y Aplicada (IUPAC, del inglés *International Union of Pure and Applied Chemistry*) y trata sobre los materiales porosos en general: materiales con tamaños de poro de menos de 2 nm se denotan como micro, con poros entre 2 y 50 nm con meso y por encima de 50 nm como macro; las películas de SP fabricadas para esta tesis son mesoporosas. Esta categorización se relaciona únicamente con el diámetro de los poros, pero no da información acerca de su morfología. Aquí, el término *morfología* de los poros se utiliza para hablar de propiedades como la forma, la orientación, la interconexión de los poros, etc. La morfología es el aspecto menos cuantificable del SP y es muy difícil caracterizarla sistemáticamente, ya que tiene detalles extremadamente ricos en cuanto a las variaciones de tamaño, forma y distribución espacial de los poros. Se puede resumir en que el silicio micro y mesoporoso típicamente exhibe una estructura similar a una esponja, con poros densamente ramificados y al azar, que no muestran una clara orientación. La tendencia observada es que las ramificaciones aumentan con la disminución del diámetro del poro. Por el contrario, el silicio macroporoso puede tener poros bien definidos, con paredes lisas y ramificaciones cortas o con ramas dendríticas. Por otro lado, el Si es un material anisotrópico con simetría cúbica [95] y la evolución de los poros es siempre en una dirección cristalográfica preferencial [96]. La dirección de crecimiento de los poros en el Si depende de la superficie que se expone a la solución electrolítica. La dirección de ataque electroquímico para las muestras utilizadas en este estudio es la dirección cristalográfica [100], en la que el crecimiento preferencial de los poros ocurre a lo largo de esta dirección y la ramificación de los poros se produce, principalmente, a lo largo del plano (100) (o en las direcciones cristalográficas [001] y [010]) como se muestra en la Fig. 3.4.

La morfología estructural, en general, es muy sensible a los parámetros de la formación. Un breve resumen y la clasificación de las diferentes morfologías de poro se dan en la referencia [88]. Los poros pueden ser de tipo esponja, lineales o ramificados, al azar o alineados a lo largo del eje cristalino de la muestra. Algunas de las morfologías de poro que se pueden conseguir a partir de obleas de Si tipo *p* se muestran en la Fig. 3.5, donde la densidad de corriente y la concentración de dopante influyen en el crecimiento de los

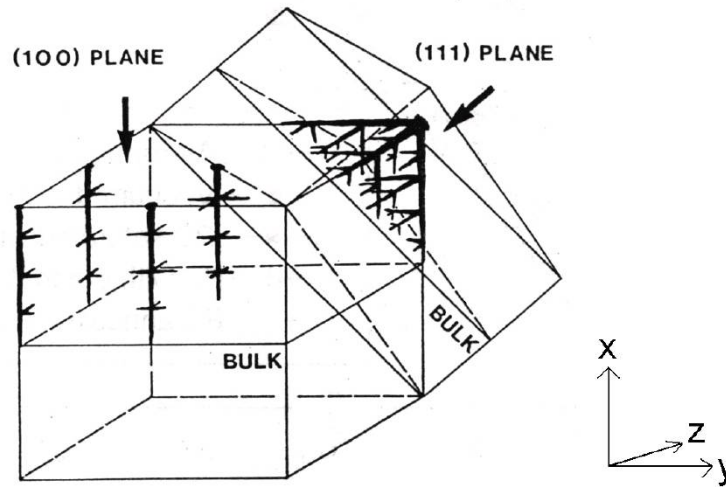


Figura 3.4: Morfología de los poros en los planos (100) y (111).

diferentes tipos de poro [92].

3.4 Influencia de los parámetros de formación

Con el método de ataque electroquímico se tiene la capacidad de controlar fácilmente el espesor de la capa de SP con el tiempo de ataque, el tamaño de poro y la morfología con el tipo y la concentración de dopante, y la porosidad con la densidad de corriente y la concentración de HF. El proceso de formación de SP por anodización electroquímica ha sido ampliamente desarrollado por muchos autores y los detalles se pueden consultar en las referencias [97–102]. Los parámetros que influyen en el proceso de formación de SP en sustratos de Si tipo p , son:

- El **dopaje del sustrato**. El tipo y la concentración de dopante determinan la resistividad R de las obleas de Si. Las obleas con dopaje tipo p usualmente se representan como p^- para dopajes bajos ($R > 1 \Omega \text{ cm}$), como p^+ para dopajes moderados ($R \sim 0.02 - 1 \Omega \text{ cm}$), y como p^{++} para obleas altamente dopadas ($R < 0.02 \Omega \text{ cm}$). Así, se producen diferentes morfologías de poro dependiendo de las propiedades de dopaje de las obleas de partida [103]. La concentración y el tipo de dopaje en las obleas son parámetros cruciales para la formación de SP, como se discutió anterior-

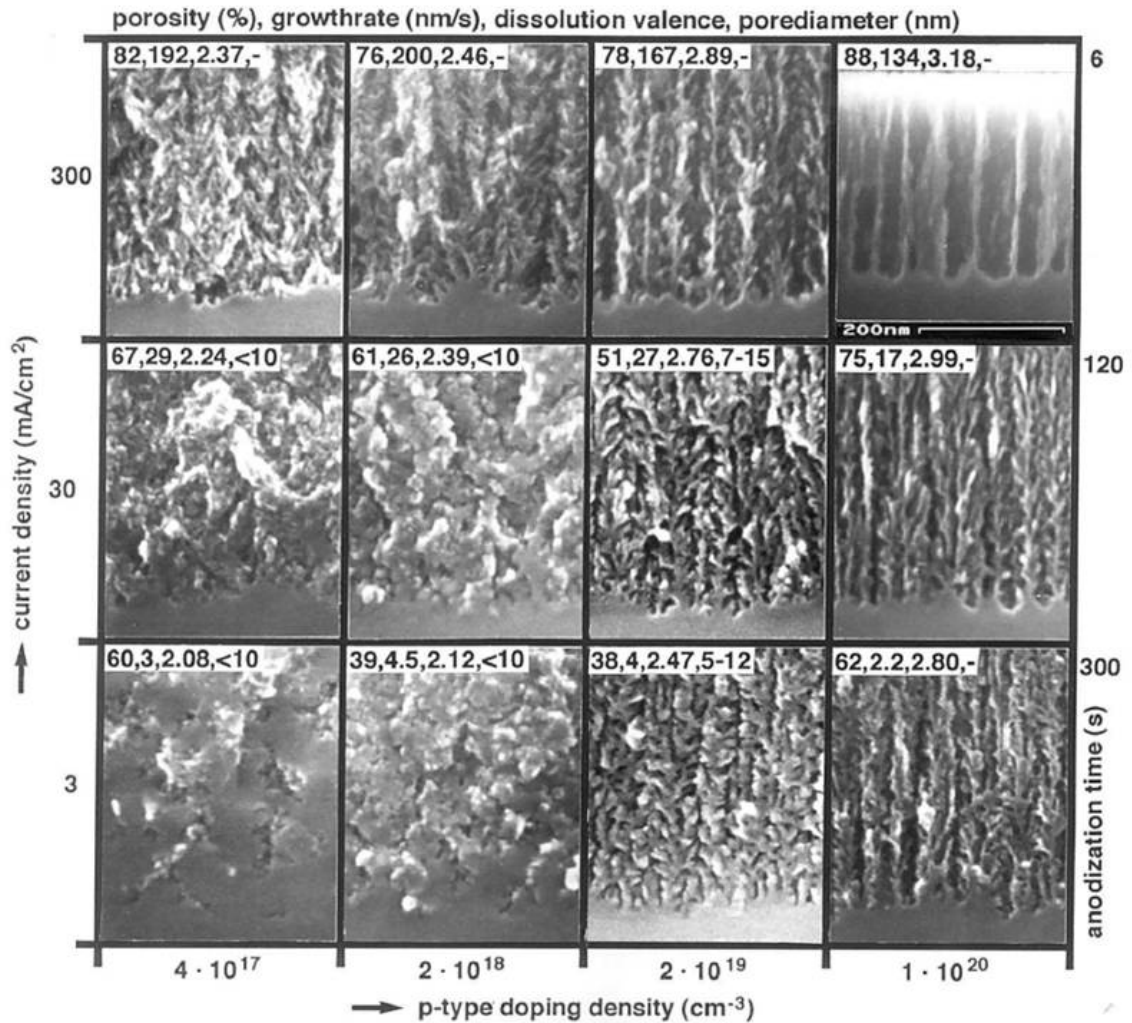


Figura 3.5: Imágenes de SEM de la interfase entre el bulto y el SP para Si dopado tipo p en dirección [100], anodizado en solución de HF-Etanol (Tomado de [92]).

mente. Debido a que al utilizar Si tipo p no se necesita de iluminación externa, y dado que se obtiene una rugosidad baja en la interfaz SP-sustrato, la mayoría de las estructuras de SP que se investigan aquí fueron fabricadas en obleas de Si tipo p . La morfología obtenida y los rangos de porosidad dependen de la resistividad de la oblea de Si. Generalmente, con obleas de alta resistividad se obtiene silicio microporoso, y las muestras son muy frágiles y con un rango de porosidad reducido. Con muestras de resistividad más baja, comúnmente se obtiene silicio mesoporoso y la rugosidad

microscópica en la interfaz tiende a disminuir aunque la rugosidad macroscópica, es decir, la debida a estrías, tiende a aumentar, además, el intervalo de porosidad que se puede obtener con obleas altamente dopadas es bastante grande. Las muestras que se presentan en este trabajo se fabrican en obleas de Si tipo p^{++} dopado con boro, con una resistividad de 0.007-0.013 $\Omega\cdot\text{cm}$ y espesor de $525\pm 25 \mu\text{m}$.

- La **densidad de corriente aplicada**. La porosidad de cada capa de SP depende de la densidad de corriente aplicada. Densidades de corriente bajas dan lugar a porosidades bajas, mientras que con densidades de corriente altas se obtienen altas porosidades.
- La **concentración de HF**. Cuanto mayor sea la concentración, menor será el tamaño de poro y se obtendrá una menor porosidad. La concentración de HF también determina la corriente de electropulido J_{PS} , que es el límite superior de la densidad de corriente que permite obtener SP. Con una concentración baja de HF el rango en el que la densidad de corriente se puede variar es pequeño, y se puede ampliar mediante el aumento de la concentración de HF.
- El **disolvente en el que se diluye el HF**. El SP es organofílico e hidrofóbico, por lo que el uso de etanol garantiza una mayor homogeneidad, debido a una mejor humectabilidad de la superficie comparada con la de agua desionizada.
- El **tiempo de ataque**. El espesor de una capa de SP está determinado por el tiempo en que se aplica una corriente, éste es el tiempo de ataque o anodización. Se requieren tiempos de ataque largos para obtener capas gruesas, del orden de micras. Sin embargo, tiempos de ataque largos introducen anisotropía con respecto al espesor de la capa debido a dos factores: el cambio en la concentración del electrolito por la acumulación de burbujas de H_2 en los poros, causando una disminución en la concentración de HF y la acción química del electrolito en lugares alejados del frente de ataque. Cuando se mantiene fija la densidad de corriente, puede verse que la porosidad aumenta cuando disminuye la concentración de HF. Esta disminución en la concentración de HF causa un aumento en la porosidad y una reducción en la velocidad de ataque, efecto que se vuelve notorio cuando el espesor de las capas es grande (del orden de micras) [104, 105]. El efecto de la acumulación de H_2 en los poros y por tanto la obtención de capas inhomogéneas y con espesores menores a los esperados, se puede evitar introduciendo “pausas” durante el ataque electroquímico (conocidas

en inglés como “*etch breaks*”) en las que se detiene la corriente para pausar el ataque químico de la oblea de Si y permitir que la concentración de HF se recupere. El efecto de la introducción de estas pausas durante el ataque es un tema que se tratará más adelante.

Tabla 3.1: Efecto de los parámetros de anodización sobre la formación de SP. Un aumento de los parámetros de la primera columna da lugar a una variación de los elementos en el resto de columnas. (Adaptado de [106]).

El aumento en	Porosidad	Velocidad de ataque	Corriente crítica
Concentración de HF	Disminuye	Disminuye	Aumenta
Densidad de corriente	Aumenta	Aumenta	-
Tiempo de anodización	Aumenta	Disminuye	-
Temperatura	-	-	Aumenta
Nivel de dopaje	Disminuye	-	Aumenta

La porosidad, el grosor, el diámetro de los poros y la microestructura del SP dependen de las condiciones de anodización. En la Tabla 3.1 se hace un resumen del comportamiento de algunos parámetros cuando se modifican las condiciones de la reacción electroquímica. Además de los parámetros tratados arriba, también debe considerarse la humedad en el ambiente, las condiciones de secado de las muestras, la preparación de la oblea de Si antes de ser atacada electroquímicamente y la temperatura del electrolito. Se ha demostrado que la rugosidad inicial observada en la superficie de la oblea de Si se traslada a través de la capa conforme el frente de ataque avanza a través del sustrato [107]. Por lo tanto, para este trabajo, se han elegido obleas pulidas mecánica y químicamente por uno de sus lados, lo que minimiza la rugosidad de la superficie del Si. Ya que la rugosidad de las interfaces entre las capas con diferente porosidad, dependerá de la rugosidad inicial de la superficie de la oblea de Si, con esto se garantizan interfaces más suaves, lo que ayuda a evitar efectos de dispersión no deseados durante las mediciones ópticas y acústicas. Por otra parte, se ha demostrado que la temperatura de la solución electrolítica durante el proceso de fabricación de SP influye en la velocidad de ataque y la rugosidad de las interfaces, observándose que el ataque a bajas temperaturas reduce la rugosidad de las interfaces debido a la mayor viscosidad de la solución electrolítica [108, 109]. En este trabajo, las

muestras se fabricaron a temperatura ambiente ya que bajo las condiciones que aquí se utilizan, la rugosidad es muy pequeña, comparada con la longitud de onda con la que se estudian las muestras ($\sim 3 - 7 \mu\text{m}$).

3.5 Parámetros elásticos del silicio poroso

Para aplicar la teoría descrita en el Capítulo 1 sobre el cálculo del coeficiente de transmisión, así como diseñar y fabricar las estructuras propuestas en la Sección 2.4, es necesario que los parámetros elásticos del SP, es decir, la velocidad del sonido viajando a través de él y su densidad de masa, sean datos conocidos. Las propiedades elásticas o acústicas del SP, al igual que sus propiedades ópticas, presentan una fuerte dependencia con la porosidad, la cual puede variar desde 4% en Si macroporoso, hasta 95% en Si mesoporoso. La porosidad determina la densidad de masa (ρ) y las velocidades de desplazamiento de las ondas elásticas, tanto longitudinales (v_L) como transversales (v_T).

Las constantes elásticas efectivas del SP han sido estudiadas para diferentes niveles de dopaje y orientaciones de las obleas de Si, utilizando diversos métodos experimentales tales como microscopia acústica, nanoindentación y dispersión de Brillouin [110–112]. Estos estudios, generalmente, son motivados por la necesidad de determinar la estabilidad mecánica de las capas. Sólo pocos estudios se han hecho sobre el uso de estructuras de SP para generar sistemas con respuestas acústicas específicas, como son bandas prohibidas o modos localizados [56, 83–85]. En general, las propiedades de los materiales que deben considerarse, principalmente, cuando se trata con ondas acústicas son: la elasticidad, que relaciona los esfuerzos generados por cualquier pequeña deformación del medio con los desplazamientos, y la densidad de masa, ρ , que corresponde a la inercia mecánica del material. La densidad del SP, si se desprecia la densidad del aire en comparación con la densidad del Si, puede escribirse como:

$$\rho = \rho_0(1 - P), \quad (3.2)$$

donde P es la porosidad y $\rho_0=2.33 \text{ g/cm}^3$ es la densidad de masa del Si cristalino. En el caso general, la elasticidad está representada por un tensor de cuarto orden, pero debido a las simetrías del sistema, sus componentes se pueden representar como una matriz de 6×6 [96]. La velocidad de las ondas acústicas está dada por:

$$v = \sqrt{c/\rho}, \quad (3.3)$$

donde c es una componente del tensor elástico en el caso anisotrópico general, igual a c_{33} para ondas longitudinales y a c_{44} o c_{66} para ondas transversales. En esta tesis se investigan únicamente los modos longitudinales, ya que las mediciones experimentales se hacen con ondas incidiendo de forma normal a la superficie de las muestras desde un medio líquido, por lo que $c = c_{33} = \lambda + 2\mu$ en la ecuación (3.3) (como puede verse en la ecuación (1.8)).

Por analogía con las ondas electromagnéticas, donde la impedancia se define como la relación entre los campos H y E , la impedancia acústica se define como la relación entre las tensiones generadas por la onda y la velocidad de las partículas (que corresponde a la derivada de los desplazamientos con respecto al tiempo), siendo igual a:

$$Z = \rho v, \quad (3.4)$$

donde Z se expresa en Rayleighs (Rayl). Es fácil ver en las ecuaciones anteriores que la porosidad tendrá una influencia dramática, tanto en la velocidad como en la densidad de masa.

Al igual que en el caso electromagnético, en el caso acústico la característica más importante del SP es que sus propiedades son una mezcla de las propiedades del medio dentro de los poros y las del Si cristalino. Para conocer la relación entre la porosidad y las constantes ópticas del SP se utiliza el modelo de Bruggeman, el cual se describe en el siguiente capítulo. Debido a que el caso acústico ha sido menos investigado, no hay un método de homogenización que pueda proporcionar, por ejemplo, las constantes elásticas como una función de la porosidad y de las propiedades del medio dentro de los poros. Sin embargo, existen modelos basados en la teoría establecida inicialmente por Biot [113] para rocas porosas y modificados por muchos otros autores, en particular por Allard [114], que describen el comportamiento de las propiedades elásticas del SP en función de la porosidad. El modelo de Biot permite calcular el módulo de elasticidad del SP cuando los poros están vacíos; sin embargo, una buena aproximación de esta situación es el caso en el que los poros se llenan sólo con aire. Las caracterizaciones realizadas a las muestras de SP que se fabrican aquí, suponen que sólo hay aire dentro los poros, esto es obvio en el caso de las mediciones ópticas, pero en las mediciones de transmisión acústica se utiliza un líquido para acoplar los transductores a la superficie de la muestra, por lo que inicialmente se supone que el líquido no penetra dentro de los poros. El hecho de que las medidas obtenidas por ambas técnicas están en buen acuerdo, parece validar esta hipótesis, además, se han reportado casos parecidos en donde tampoco se ha visto penetración del agua en los poros [115].

Experimentalmente, se ha encontrado que en materiales porosos el $\ln(v)$ presenta una relación lineal con $\ln(1 - P)$, por lo que la dependencia de las velocidades acústicas longitudinal (v_L) y transversal (v_T) con la porosidad, se puede expresar como [110,116]:

$$v = v_{L0}(1 - P)^k, \quad v = v_{T0}(1 - P)^m, \quad (3.5)$$

donde k y m son constantes empíricas obtenidas ajustando resultados experimentales, y v_{L0} y v_{T0} son las velocidades longitudinal y transversal del material no poroso, respectivamente. Según Phani *et al* valores de k y m entre 0.5 y 1.5 corresponden a muestras con poros relativamente ordenados [116]. La velocidad del sonido en los materiales porosos, además de depender de la porosidad, depende también de su microestructura, la cual a su vez, para el caso del SP, es consecuencia del nivel de dopaje de la oblea original [116,117]. Por ejemplo, se ha visto que para niveles de dopaje altos, se obtienen morfologías del poro más ordenadas, lo que resulta en un comportamiento distinto de la velocidad acústica efectiva [92,117,118]. Da Fonseca *et al*, llevaron a cabo experimentos de microscopía acústica y reportan la dependencia de la velocidad del sonido con la porosidad para muestras fabricadas usando obleas tipo p^+ con resistividad 10-80 $m\Omega \cdot cm$ y orientación (100), en un rango de porosidades de 20-50% [119]. Encuentran, usando las ecuaciones para ajustar numéricamente sus resultados experimentales, que $v_{L0} = 8570$ m/s, $k = 1.095$, $v_{T0} = 5840$ m/s y $m = 1.19$. Fan *et al* utilizaron dispersión de Brillouin para investigar las propiedades elásticas del SP y encontraron que, para muestras con porosidades entre 57% y 83%, $k = 1.083$ y $m = 1.086$ [115]. Aliev *et al* utilizaron mediciones de transmisión acústica ondas propagándose en la dirección (100) para investigar la dependencia de la velocidad acústica longitudinal con la porosidad de muestras fabricadas en obleas tipo p^{++} con resistividad 1-15 $m\Omega \cdot cm$ y porosidades entre 25% y 80%, encontrando valores para v_{L0} y k de 8433 m/s y 0.58, respectivamente [83,84]. En la Fig. 3.6 se comparan los resultados de las referencias [83] y [119]. Se puede observar cómo diferentes tipos de obleas de Si resultan en distintos comportamientos de la velocidad del sonido como función de la porosidad. En el siguiente capítulo se investiga la dependencia de la v_L con la porosidad para el tipo de obleas utilizadas aquí.

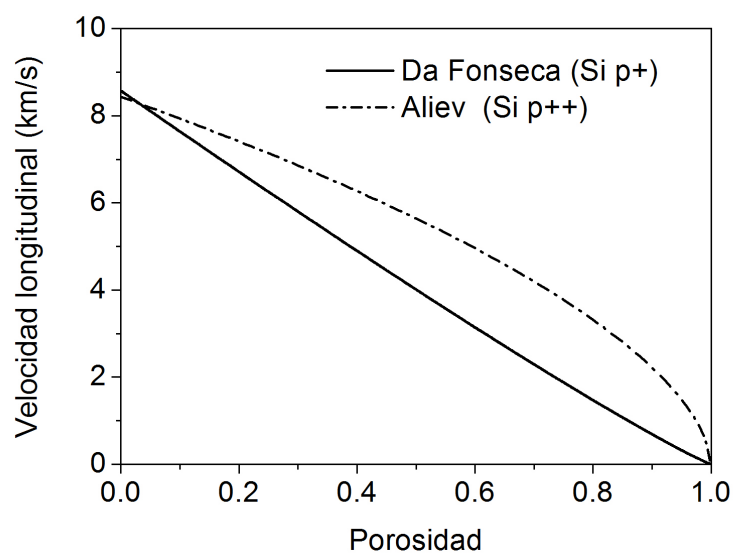


Figura 3.6: Velocidad longitudinal en capas de SP como función de la porosidad, para Si p^+ (línea continua) de acuerdo a la Ref. [119] y para Si p^{++} (línea discontinua) según la Ref. [83].

Capítulo 4

Fabricación de silicio poroso

4.1 Arreglo experimental para la fabricación de silicio poroso

El tipo de celda para el ataque electroquímico que se utilizó en este trabajo es la celda vertical, la cual consiste en dos electrodos, uno en la parte superior y otro en la parte inferior de la celda; la oblea de Si se sitúa en la parte inferior como se muestra en el esquema de la Fig. 4.1. Durante la anodización electroquímica, la oblea de Si actúa como el ánodo y un alambre de platino (Pt) resistente al HF, funciona como el cátodo, el cual se encuentra inmerso en el electrolito de HF y etanol. La corriente fluye desde el electrodo de Pt, perpendicular a la superficie de la oblea, creando una capa porosa en la dirección de la corriente [95]. La oblea de Si se coloca sobre una placa de cobre en donde se hace el contacto eléctrico, como se muestra en el esquema de la Fig. 4.1. El alambre de platino de forma espiral es colocado paralelo a la superficie de la oblea de Si para obtener una densidad de corriente uniforme a través de la zona de ataque. La forma abierta de la espiral de platino (en lugar de utilizar una placa) permite la liberación adecuada de las burbujas de hidrógeno.

Para cada muestra, ya sea de una sola capa (monocapa) o de múltiples capas (multicapas), se utiliza un trozo de oblea de Si de aproximadamente 2 cm x 2 cm, colocándola en el fondo de la celda. Además, se utiliza un *O-ring* de goma para fijar la oblea de Si a la celda, que evita fugas y mantiene fija la superficie de la oblea que estará en contacto directo con la solución de HF para ser atacada electroquímicamente. El área de la zona circular en contacto con el electrolito es de 1.2 cm². La celda está hecha de Teflón[®], que es resistente y químicamente inerte al HF. Para el electrolito que sirve como el reactivo de

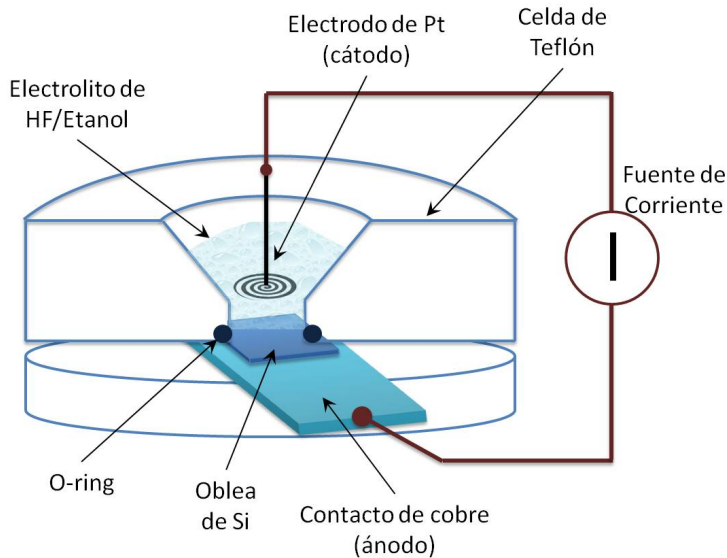


Figura 4.1: Esquema de la configuración de la celda de ataque electroquímico.

ataque se utiliza HF acuoso de concentración 40% en peso, mezclado con etanol con 99.99% de pureza, en una relación volumétrica 1:1 [104, 120].

Las obleas de Si son tratadas antes del ataque para preparar la superficie. Primero, se someten a un baño ultrasónico en agua desionizada para remover cualquier impureza depositada en la superficie. Posteriormente, se lavan con etanol y se secan con aire caliente. Por último, se sumergen en una solución 1:3 en volumen de HF y agua desionizada, para remover el óxido de las superficies de la oblea y así evitar un contacto eléctrico deficiente con el electrodo de cobre.

La corriente de ataque es suministrada por una fuente de corriente Keithley controlada a través de un programa computacional desarrollado en LabVIEW 8.2.1, con el que se registran los perfiles de corriente deseados en función del tipo de estructura de SP que se desea obtener. La resistividad de la oblea y el área de la superficie de Si (A) en contacto con el electrolito son parámetros fijos y conocidos. Se debe tomar en cuenta que, una vez que comienza el ataque electroquímico, la resistividad de la oblea de Si cambia debido a la presencia de las regiones de SP que se van desarrollando. Con el fin de controlar las porosidades de las muestras, se varía el voltaje para obtener las densidades de corriente J que romperán enlaces Si-Si obteniendo así la porosidad deseada. Es decir, el cambio en la resistividad de la muestra se compensa variando el voltaje, con el objetivo de controlar la corriente I , que es medida con un multímetro y registrada en la computadora. La siguiente

ecuación da los valores de densidad de corriente para una corriente y área conocidas:

$$J(\text{mA} \cdot \text{cm}^2) = I(\text{mA})/A(\text{cm}^2). \quad (4.1)$$

Además, debe considerarse que en muestras gruesas y con alta porosidad ($> 80\%$), las conexiones entre poros pueden romperse durante el proceso de secado debido a las grandes tensiones capilares cuando la solución de HF se evapora de los poros. Con el fin de evitar el cambio estructural de la red de silicio fabricada, las muestras se secan utilizando pentano, que tiene una tensión superficial más baja por lo que ayuda a prevenir las rupturas.

Con las condiciones experimentales utilizadas aquí, los valores de corriente que permiten obtener estructuras homogéneas, mecánicamente estables y con los espesores requeridos, están en la región de 10 mA a 220 mA. Con estas corrientes se obtienen porosidades en el intervalo de 43% a 75%, las cuales corresponden a las porosidades mínima y máxima que se utilizan en este trabajo, respectivamente. Corrientes por encima de ~ 400 mA están en el régimen de electropulido, por lo que las capas de SP se desprenden del sustrato.

4.2 Calibración del sistema de ataque electroquímico

Con el objetivo de obtener capas con el espesor y la porosidad deseados, es necesario llevar a cabo la calibración del sistema de ataque electroquímico bajo las condiciones que se utilizarán para fabricar todas las muestras, es decir, fijando el tipo de obleas que serán atacadas, el tipo y concentración del electrolito, y las condiciones generales de preparación de las muestras. Para esto, se fabricaron monocapas de SP, utilizando valores de corriente entre 10 y 220 mA y diferentes tiempos de ataque, con lo que se obtienen espesores entre 1 y 10 μm . Las monocapas de SP se caracterizaron mediante espectroscopía óptica y perfilometría. Primero se midió la reflectancia especular utilizando un espectrómetro. Posteriormente, se removieron las monocapas utilizando una solución de NaOH con concentración 1 N, dejando al sustrato de Si completamente libre de SP, y finalmente se utilizó un perfilómetro de superficie para determinar los espesores de las capas (esta técnica se describe más adelante).

Puesto que se conoce el tiempo de ataque y ya se ha medido el espesor, se puede calcular la velocidad de ataque, con la relación: (espesor medido)/(tiempo de ataque) como una función de la densidad de corriente (J). La curva de calibración de la velocidad de ataque se muestra en la Fig. 4.2(a) y es necesaria para fabricar capas con un espesor es-

pecífico. Para fabricar estas monocapas, no se introdujeron pausas de corriente que, como se detallará más adelante, es una condición importante para evitar que haya gradientes de porosidad a través del espesor en capas más gruesas.

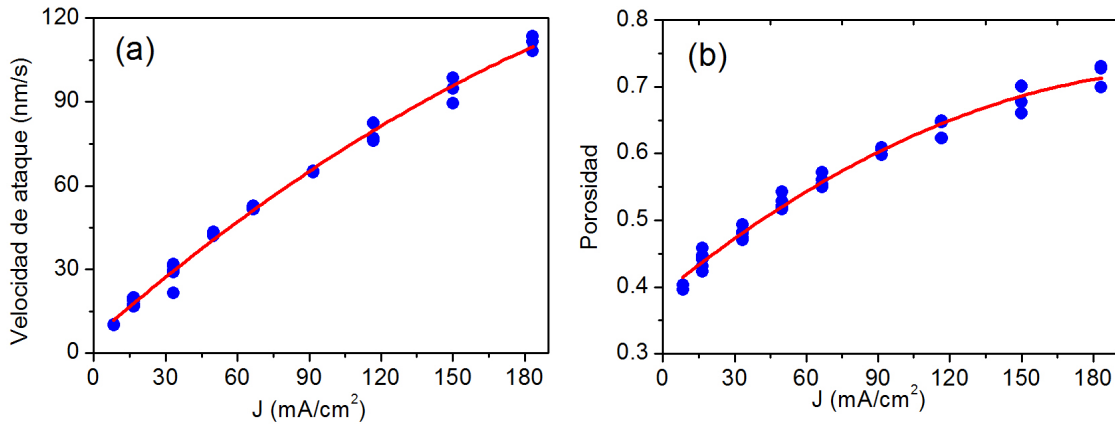


Figura 4.2: Curvas de calibración para obleas de Si altamente dopado con boro y resistividad de $7\text{-}13 \text{ m}\Omega \cdot \text{cm}$ orientado en la dirección cristalográfica $[100]$. Las líneas corresponden al mejor ajuste de los datos para (a) la velocidad de ataque y (b) la porosidad, en función de la densidad de corriente, J . Para cada valor de J , fueron realizadas tres mediciones.

Una vez que se conoce el espesor de la capas por perfilometría, la porosidad se obtiene ajustando la reflectancia medida con la curva que se calcula teóricamente utilizando el MMT para el caso óptico [121]. Con el espectro de reflectancia medido, en conjunto con una aproximación de medios efectivos (discutida más adelante en este capítulo), se obtiene la porosidad de la capa de SP, ya que la porosidad (relacionada con el índice de refracción efectivo) es el único parámetro desconocido en las ecuaciones. Los detalles para obtener la porosidad de las monocapas se describen ampliamente en la sección 6.3. La curva de calibración para la porosidad en función de la densidad de corriente se presenta en la Fig. 4.2(b), donde se puede ver que conforme aumenta el valor de la densidad de corriente se obtiene una porosidad mayor.

Se utilizó el método de mínimos cuadrados para encontrar las curvas que mejor se ajustan a los datos experimentales de la Fig. 4.2, encontrando valores del coeficiente R^2 por encima de 0,98. El error en estas curvas de calibración dependerá de pocos factores, tales como variaciones en la concentración de HF, de la temperatura a la que se realiza el

proceso y en la resistividad de las obleas de Si que se utilizan. Para el SP fabricado en este trabajo, fue posible obtener capas con una porosidad y espesor dentro de 5% de los valores deseados. Este valor de error es típico para el arreglo experimental descrito, sin embargo, si se requiere un control más preciso sobre la porosidad y espesor de cada capa, se pueden utilizar condiciones de fabricación más rigurosas; por ejemplo, podría controlarse la temperatura durante el ataque para evitar las fluctuaciones de la temperatura ambiental durante las diferentes épocas del año. También se podrían utilizar obleas de Si de mayor calidad, es decir, con menor variación en la resistividad. La concentración de HF también podría mantenerse más estable mediante el uso de un sistema por medio del cual el HF pudiera circular y refrescarse durante el proceso, en lugar del sistema *batch* (o por lotes) que se utiliza aquí, en donde todo el proceso se lleva a cabo con la misma solución electrolítica.

En algunos estudios se ha observado que, dependiendo de las condiciones en las que las muestras se almacenan después de su fabricación, hay envejecimiento causado por la oxidación dentro de los poros y en la superficie. La presencia de SiO₂ modifica la química de la superficie del SP y se observan cambios en la respuesta óptica de las muestras; por ejemplo, se modifica el índice de refracción o la intensidad de la luminiscencia [122]. Este efecto de envejecimiento, visto en muestras de SP, puede ser revertido por inmersión de las muestras en HF para reducir las capas oxidadas. En términos de aplicaciones ópticas, el índice de refracción efectivo controla la respuesta óptica de las muestras, pero para aplicaciones acústicas, es la impedancia acústica la que controla la respuesta acústica. La relación de los índices de refracción efectivos (a una longitud de onda de 1 μm) entre el Si (3.5) y el SiO₂ (1.5) es de 2.3, sin embargo, la impedancia acústica del Si oxidado (SiO₂) en comparación con la del Si no cambia mucho, la relación entre la impedancia acústica del Si (19.64 MRayl) y la del cuarzo fundido SiO₂ (13.13 MRayl) es 1.5. A esto puede atribuirse el hecho de que hasta ahora y a lo largo de esta investigación, no se han observado efectos del envejecimiento de las capas SP en la medición de la transmisión acústica de las muestras.

4.3 Efecto de la introducción de pausas de corriente durante el ataque

Las capas de SP preparadas por anodización electroquímica, no son perfectamente homogéneas en la dirección de crecimiento [129]. Durante la formación del SP sobre sus-

tratos dopados tipo p , la microestructura y la porosidad de las capas cambian con la profundidad. Cuando las capas son gruesas, del orden de micras, este efecto es mayor y se vuelve importante, sin embargo, es esencial obtener SP homogéneo para lograr respuestas específicas y el comportamiento deseado. Por ejemplo, para aplicaciones en donde se requieren análisis cuantitativos, como en biosensores en la región del IR o dispositivos ultrasónicos para aplicaciones en el orden de GHz. Aquí, se estudia de manera sistemática la obtención de monocapas y multicapas de SP gruesas y homogéneas con respecto a la dirección de crecimiento de las capas.

Se ha visto que la homogeneidad de las capas de SP con respecto a su espesor, depende principalmente de dos efectos: una disolución química del Si en el electrolito (es decir, ataque químico en lugares alejados del frente de ataque debido a la densidad de corriente aplicada) [89,130], y cambios en la concentración de HF durante el proceso de anodización [131–133]. El primero es una función del tiempo de anodización y de la superficie específica de la muestra. Se han hecho estudios sobre el cambio de la velocidad de ataque y la microestructura con la profundidad en capas de SP fabricadas sobre sustratos p^+ en la dirección [100], encontrando para Si p^+ y p^{++} que el cambio en la concentración de HF es el efecto dominante sobre la formación de gradientes de porosidad y que éstos no son causados por el ataque químico en lugares alejados del frente de ataque [129,133].

Basados en los principales modelos sobre la formación del SP (tratados en el Capítulo 4), se puede concluir que la disolución de Si durante la formación de las capas de SP toma lugar en el fondo de los poros. Como resultado de la reacción química escapa H_2 de exceso en forma de burbujas a través de la solución electrolítica [63, 89, 90]. La acumulación de estas burbujas de H_2 dentro de los poros conduce a limitaciones en la difusión de las especies electrolíticas hacia y desde el frente de ataque, causando cambios en la concentración de HF. Debido a que con una menor concentración de HF la porosidad se incrementa mientras que la velocidad de ataque disminuye, es decir, el agotamiento de HF en el fondo de los poros da lugar a capas más delgadas con porosidades más altas [134].

El efecto que tiene el cambio en la concentración de HF en el electrolito puede verse en la micrografía SEM de la Fig. 4.3, la cual corresponde a una estructura con un perfil de densidad de corriente periódico, es decir, alternando densidades de corriente bajas y altas, donde no se introdujeron pausas de corriente durante el crecimiento de las capas. Puede notarse, incluso a simple vista, que las capas son más delgadas hacia el sustrato (a la derecha de la imagen). En esta estructura, las capas de baja porosidad (las capas más

claras en la imagen) que están más cerca de la superficie, tienen un espesor de $1.72 \mu\text{m}$, mientras que la capa de baja porosidad más profunda, tiene un espesor de $1.65 \mu\text{m}$, lo que significa un cambio del 4% a través de la estructura completa. La capas de alta porosidad (capas más oscuras en la imagen) cerca de la superficie tiene un espesor de $4.66 \mu\text{m}$ y cerca del sustrato de $3.08 \mu\text{m}$, lo que representa un cambio total en el espesor del 34%. El cambio de espesor más importante ocurre en las capas de alta porosidad, como se espera, ya que la acumulación de burbujas de H_2 es mayor en ese caso.

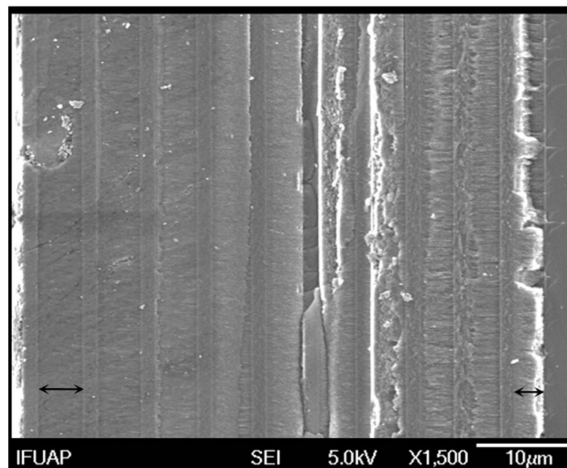


Figura 4.3: Micrografía SEM de una estructura periódica fabricada sin pausas durante el proceso. Se puede observar el efecto del agotamiento de HF con respecto a la profundidad de las capas, pues las capas se vuelven más delgadas hacia el sustrato (a la derecha de la imagen).

En este trabajo, se fabricaron monocapas y se determinó la velocidad de ataque y la porosidad promedio como función del tiempo de ataque para diferentes densidades de corriente, en capas con espesores entre 1 y $100 \mu\text{m}$. Los espesores se miden por perfilometría para capas entre 1 y $10 \mu\text{m}$ y por microscopía óptica para capas con espesores mayores a $20 \mu\text{m}$. La porosidad de las capas se obtiene ajustando el espectro de reflectancia óptica medido con uno calculado teóricamente, como se detalla en el siguiente capítulo. Los resultados se muestran en la Fig. 4.4, observándose las tendencias generalmente aceptadas para la formación de SP en Si tipo p , es decir, con densidades de corriente altas se obtienen porosidades y velocidades de ataque altas. Sin embargo, las condiciones de ataque, para la misma densidad de corriente aplicada, claramente cambian con el tiempo. La tendencia es hacia una mayor porosidad y menor velocidad de ataque respecto al espesor de la capa (o

al tiempo de ataque) [105, 129].

Para tiempos de ataque más largos que los presentados en la Fig. 4.4, los patrones de interferencia resultantes de las múltiples reflexiones en las capas se vuelven irregulares y resulta imposible determinar la porosidad de la capa a través del ajuste de su espectro de reflectancia. Se debe notar que todas las monocapas en la Fig. 4.4 fueron fabricadas sin pausas de corriente, por lo que la irregularidad de las oscilaciones en la reflectancia, puede atribuirse a un exceso en el gradiente de la porosidad con el espesor de la capa.

Debido a que densidades de corriente altas producen una mayor cantidad de H_2 de exceso, entonces se espera que los gradientes relacionados con la disminución de la concentración de HF sean mayores para capas con porosidades más altas, lo que es consistente con los resultados en la Fig. 4.4, en donde puede verse que para densidades de corriente altas el efecto es sustancial. Para capas delgadas (tiempos de ataque cortos), tanto las velocidades de ataque como las porosidades presentan la misma tendencia de las curvas de calibración de la Fig. 4.2.

Es importante mantener constantes la porosidad y la velocidad de ataque, sobretodo en estructuras gruesas. El HF es consumido en los poros, por lo tanto en las capas más profundas de muestras gruesas al electrolito le toma más tiempo recuperar su concentración original y el efecto de los cambios de concentración de HF será más grande. Al fabricar capas de SP gruesas se debe tener cuidado, ya que existe la posibilidad de que el SP se desprenda del sustrato debido a la acumulación de H_2 en los poros. Para prevenir esta acumulación, se pueden introducir pausas en el ataque, que son intervalos de tiempo en los que no se aplica corriente y el ataque electroquímico sobre la oblea de Si se detiene, permitiendo que el H_2 de exceso escape de los poros hacia la superficie y se recupere la concentración de HF en el electrolito.

Antes de fabricar las estructuras de SP que se proponen para observar las EWSA y las OBA, se estudiaron las condiciones óptimas requeridas para obtener estructuras mecánicamente estables, en las que los gradientes en la porosidad (*chirp* en inglés) y en el espesor de la capas sean los mínimos posibles. Los parámetros que se estudiaron fueron: la duración de las pausas en el ataque, el número de repeticiones de estas pausas y el tiempo total que la muestra está en contacto con el electrolito. Primero, se fabricaron seis monocapas de alta porosidad utilizando una densidad de corriente de 183.3 mA/cm^2 durante un tiempo de ataque efectivo de 300 segundos e introduciendo pausas durante el proceso con diferentes tiempos de ataque y diferente duración de las pausas de corriente.

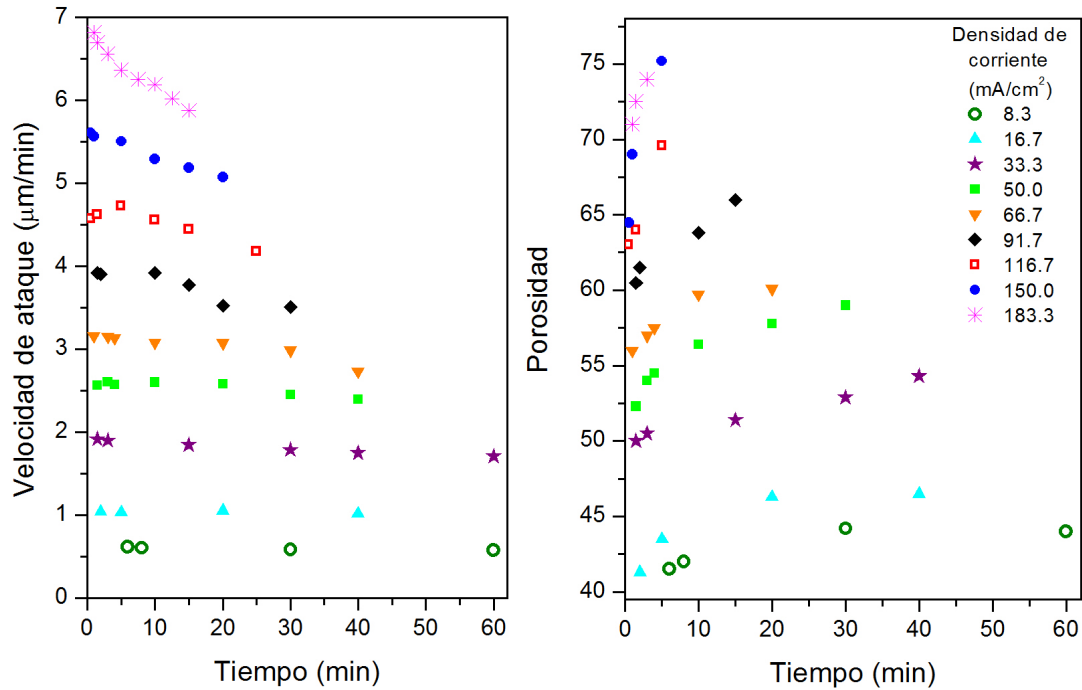


Figura 4.4: Velocidad de ataque y porosidad en función del tiempo de anodización, de monocapas con espesores de 1 a 100 μm , para diferentes densidades de corriente. Se puede ver la tendencia hacia velocidades de ataque más bajas y porosidades más altas a tiempos (o espesores) mayores, para cada densidad de corriente.

Con esto, se determinó el efecto de estos parámetros sobre el espesor y porosidad de las capas. Los espectros de reflectancia óptica para las seis monocapas se muestran en la Fig. 4.5, mientras que en la Tabla 4.1 se presentan las condiciones de fabricación, los resultados de los espesores medidos por microscopía óptica y las porosidades determinadas ajustando los espectros medidos con los calculados teóricamente. La primera muestra fue fabricada sin pausas de corriente durante el ataque y no pudo determinarse la porosidad debido a que el patrón de interferencia de la reflectancia es irregular, por lo que no puede ajustarse a un espectro teórico. Ocurre lo mismo para la muestra A, en la que a pesar de haber sido fabricada introduciendo pausas en la corriente no se corrigió el gradiente de porosidad. Para las muestras B a E sí es posible ajustar un espectro de reflectancia óptica, usando los espesores medidos; la porosidad obtenida de las simulaciones se encuentra en la última

columna de la Tabla 4.1. Debido a que para la muestra *D* se obtiene la velocidad de ataque más alta y la menor porosidad, se considera que éstas son las condiciones de ataque óptimas para fabricar capas gruesas (de alrededor de 30 μm) y de alta porosidad. A esta muestra corresponde una relación de (tiempo de ataque)/(duración de la pausa) (t_c/t_0) de 1/10 y una velocidad promedio de crecimiento de 11.5 nm/s.

Tabla 4.1: Espesores medidos y porosidades promedio determinadas para monocapas de alta porosidad fabricadas introduciendo pausas durante el ataque.

Muestra	Tiempo de ataque por paso (s)	Tiempo de pausa (s)	Espesor medido (μm)	Tiempo total del proceso (min)	Porosidad promedio (%)
Sin pausas	300	-	31.8	5	-
A	1	10	33.6	55	-
B	0.5	5	33.4	55	78.0
C	0.4	2	33.5	30	73.1
D	0.2	2	37.8	55	72.1
E	0.1	2	35.7	105	76.8

El propósito de la introducción de pausas de corriente durante el proceso es reducir la velocidad de ataque, regulando de esta forma la generación de burbujas de H_2 y dando tiempo suficiente para que la concentración del electrolito se reestablezca. En los sistemas que se fabrican en esta tesis se busca mantener una velocidad de crecimiento suficientemente pequeña. Para capas con porosidades altas, se utiliza la relación (tiempo de ataque, t_c)/(duración de la pausa, t_0) de 1/10 y para capas de porosidades bajas, una relación de 1/2 con velocidades de crecimiento promedio de ~ 10 y 20 nm/s, respectivamente. Para porosidades intermedias, se interpolan linealmente estas relaciones.

4.3.1 Efecto de la introducción de pausas de corriente en sistemas periódicos

Para obtener las condiciones óptimas de fabricación de sistemas con capas gruesas, fueron diseñadas y fabricadas dos tipos de estructuras periódicas. Ambas constan de 10 periodos de capas alternadas *A-B* de baja ($p_A=43\%$) y alta ($p_B=73\%$) porosidad. La estructura 1 se diseñó con espesores $d_A=1.01$ μm y $d_B=1.97$ μm , y la estructura 2 con

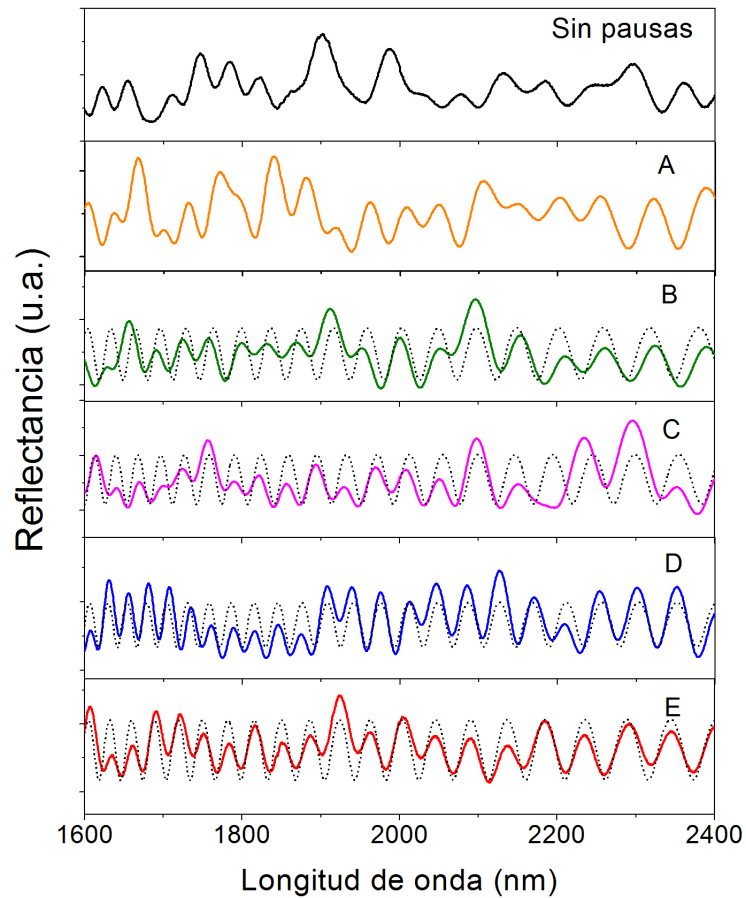


Figura 4.5: Espectros de reflectancia óptica para monocapas gruesas de alta porosidad, bajo diferentes condiciones de ataque. Las líneas continuas corresponden a los espectros medidos, y las líneas punteadas a las simulaciones teóricas del mejor ajuste encontrado.

espesores $d_A=3.04 \mu\text{m}$ y $d_B=1.97 \mu\text{m}$. Las condiciones de ataque se muestran en la Tabla 4.2.

Con la finalidad de observar la banda prohibida óptica principal, que para estructuras periódicas gruesas aparece en la región del infrarrojo medio (MIR), las mediciones de reflectancia se llevaron a cabo utilizando espectroscopía infrarroja por transformada de Fourier (FTIR) en el intervalo de 1.5 a 25 μm . La Fig. 4.6 muestra la reflectancia óptica para la estructura 1, en donde la línea punteada corresponde a la muestra 1-A, la cual fue fabricada haciendo una sola pausa de corriente de 3 s entre cada capa. Es evidente el efecto del cambio de concentración de HF sobre la porosidad y el espesor de las capas, ya que en

el espectro de reflectancia óptica no se observan las bandas prohibidas que se esperan de una estructura periódica. Por lo tanto, se puede concluir que este procedimiento no permite fabricar estructuras homogéneas en la dirección de crecimiento de las muestras, y que las pausas de corriente que se han hecho no son las adecuadas para permitir la regeneración del electrolito.

La muestra 1-B (línea continua en la Fig. 4.6) fue fabricada introduciendo pausas de corriente en cada capa, como se indica en la Tabla 4.2. Para las capas de baja porosidad se aplicó la corriente durante 2.3 s (t_c), seguida de una pausa de 2 s (t_0) en 30 repeticiones. Para las capas de alta porosidad se aplicó la corriente durante 0.2 s, se hizo una pausa de 2 s y se repitió el proceso 90 veces. Ambos procedimientos se llevan a cabo 10 veces para completar la estructura de 10 periodos. Bajo estas condiciones, se tiene una relación $t_c/t_0=0.1$ para las capas de alta porosidad y $t_c/t_0=1.2$ para las de baja porosidad. Siguiendo este procedimiento se logra una respuesta experimental de excelente correspondencia con el espectro calculado teóricamente, para el cual se ha utilizado el espesor medido por microscopia óptica, y las porosidades corresponden al mejor ajuste. Debido a la introducción de las pausas en la corriente, el tiempo total de fabricación de la muestra 1-B es de 55 minutos, en contraste con 15 minutos que es el tiempo que toma fabricar la muestra 1-A.

En la Fig. 4.6, en línea a trazos se muestra el espectro de reflectancia óptica que se calculó teóricamente utilizando: $p_A=47\%$, $p_B=78\%$, $d_A=0.95 \mu\text{m}$ y $d_B=1.88 \mu\text{m}$, el cual corresponde al mejor ajuste encontrado para el espectro experimental de la muestra 1-B. La banda prohibida principal se obtiene alrededor de 9300 nm, y las brechas de orden superior hacia menores longitudes de onda. La obtención de bandas prohibidas bien definidas puede considerarse una prueba de la periodicidad de la muestra.

La estructura 2, que tiene un espesor total mayor, no puede fabricarse introduciendo pausas de corriente solo entre las capas de baja y alta porosidad (como la muestra 1-A), debido a que el gradiente de porosidad es demasiado grande y la estructura se vuelve mecánicamente inestable provocando que las capas se desprendan del sustrato. No obstante, cuando se introducen suficientes pausas de corriente durante la fabricación de las capas, es posible obtener una estructura estable. Para la estructura 2 se consideraron los tres casos que se muestran en la Tabla 4.2. La reflectancia óptica para las tres muestras se presenta en la Fig. 4.7. En el espectro de la muestra 2-A no se observa una estructura de bandas bien definida (línea punteada en la Fig. 4.7(a)), a pesar de haber utilizado las condiciones encontradas como óptimas para la estructura 1. Esto no es extraño, ya que este sistema

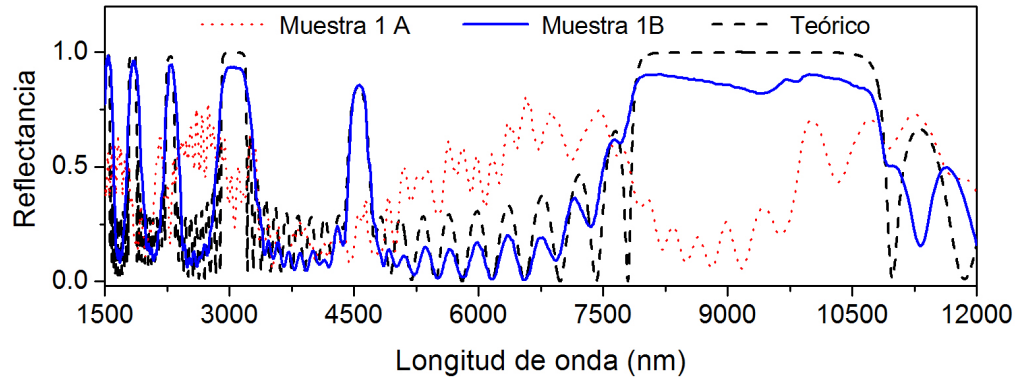


Figura 4.6: Reflectancia óptica en la región del MIR para la Estructura 1. La línea punteada corresponde a la Muestra 1-A, la línea continua a la Muestra 1-B y la línea a trazos al espectro calculado teóricamente. La banda prohibida principal se observa alrededor de 9300 nm y las bandas prohibidas de orden superior hacia longitudes de onda menores. Las condiciones de crecimiento se muestran en la Tabla 4.2.

es 70% más grueso por lo que es de esperarse que se necesite más tiempo para permitir la regeneración de la concentración de HF. Para la siguiente muestra (2-B), el tiempo de pausa entre pasos se duplicó de 2 a 4 segundos, por lo que la relación t_c/t_0 se reduce a la mitad y la velocidad de crecimiento promedio disminuye. Esto implica un incremento en el tiempo total de fabricación de 60 minutos, como puede verse en la Tabla 4.2. Con este procedimiento se logra un espectro más definido (línea a trazos en la Fig. 4.7(a)). Sin embargo, para la última muestra, 2-C, (línea continua en la Fig. 4.7(a)) se logran mejores resultados. La muestra 2-C se fabricó utilizando un tiempo t_c dos veces mayor que en la muestra 2-A y un tiempo de pausa $t_0=4$ s en lugar de 2 s. Con esto la relación t_c/t_0 y la velocidad de crecimiento promedio se conservan iguales que en la muestra 2-B, lo mismo que el tiempo total de fabricación (98 minutos); sin embargo, con este procedimiento se observa un espectro de reflectancia de mejor calidad. En la Fig. 4.7(b) se grafica nuevamente (en línea continua) el espectro medido para la muestra 2-C, y en línea a trazos, los resultados teóricos utilizando: $p_A=43\%$, $p_B=77\%$, $d_A=2.90 \mu\text{m}$ y $d_B=1.85 \mu\text{m}$.

El tiempo total que la muestra 2-B está en contacto con el electrolito es mayor a 2 horas y media, así que el efecto de la disolución química del Si en el electrolito comienza a ser un factor importante, por lo que la muestra 2-B resulta de menor calidad que la muestra 2-C.

Tabla 4.2: Condiciones de crecimiento para las estructuras periódicas 1 y 2.

Estructura	Muestra	Capa A				Capa B				Tiempo total del proceso	Espesor medido
		Baja porosidad				Alta porosidad					
		Tiempo de ataque	Duración de la pausa	Velocidad de crecimiento promedio	t_c/t_0	Tiempo de ataque	Duración de la pausa	Velocidad de crecimiento promedio	t_c/t_0		
		t_e (s)	t_0 (s)	(nm/s)		t_e (s)	t_0 (s)	(nm/s)			
								(min)	(μm)		
1	1-A	70.3	3	13.0	23.4	17.7	3	90.8	5.9	15	28.3
	1-B	2.3	2	7.3	1.2	0.2	2	9.5	0.1	55	28.6
2	2-A	4.7	2	9.6	2.3	0.4	2	16.6	0.2	68	44.7
	2-B	4.7	4	7.4	1.2	0.4	4	9.0	0.1	98	45.6
	2-C	2.3	4	5.1	0.6	0.4	4	9.0	0.1	128	46.9

En conclusión, el uso de una relación óptima entre el número y la duración de las pausas es muy importante para lograr muestras de alta calidad. Thönissen *et al* dan otra solución para evitar cambios en la porosidad modificando la densidad de corriente y el tiempo de ataque con respecto a la profundidad de las capas en la muestra, de tal forma que se compensen los cambios de concentración del electrolito [133]. Sin embargo, cuando se modifica la densidad de corriente también se modifican otros parámetros además de la porosidad, como la morfología. Por lo tanto, en este trabajo se utilizaron pausas durante el ataque para prevenir el agotamiento del HF en el electrolito y de esta forma mantener la porosidad y la velocidad de ataque tan constantes como sea posible.

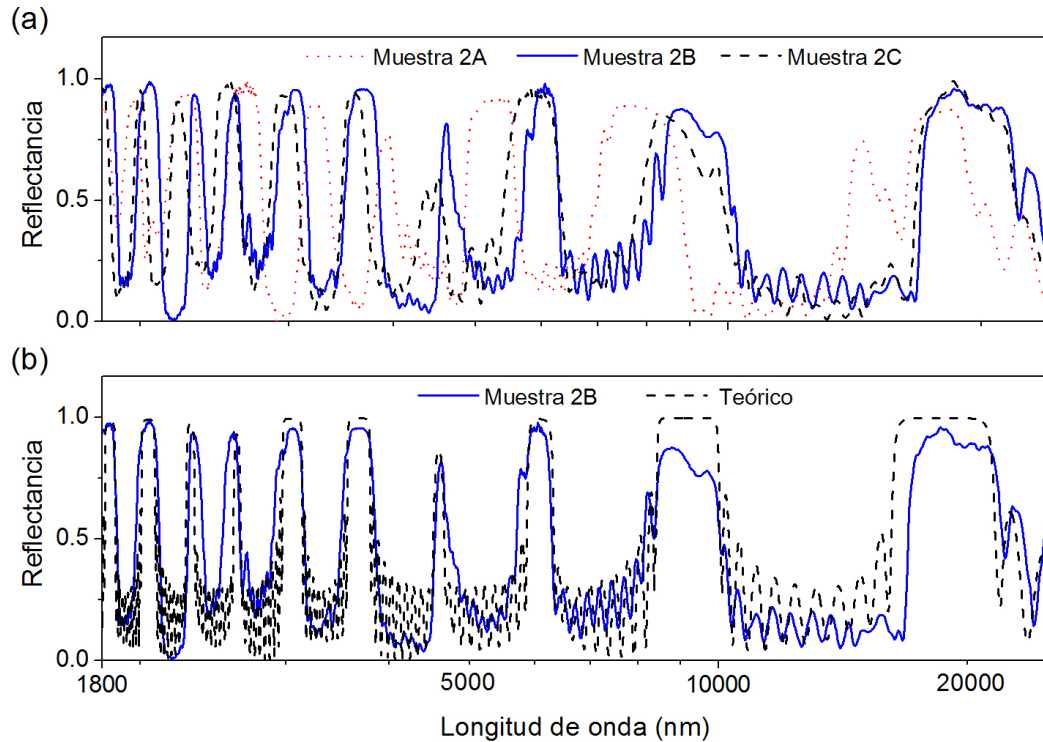


Figura 4.7: (a) Reflectancia óptica medida en la región del MIR para las muestras de la Estructura 2. La línea punteada corresponde a la Muestra 2-A, la línea continua a la Muestra 2-B y la línea a trazos a la Muestra 2-C. Las condiciones de crecimiento para cada muestra se presentan en la Tabla 4.2. (b) Espectro de reflectancia medido para la Muestra 2-C (línea continua) y el calculado teóricamente (línea a trazos). La banda prohibida principal se observa centrada en ~ 19000 nm y las brechas de orden superior hacia longitudes de onda menores. En ambas gráficas el eje x está en escala logarítmica para tener una mejor definición de la estructura de bandas.

Capítulo 5

Caracterización de monocapas y multicapas

5.1 Espesor y porosidad en monocapas

La porosidad de las monocapas de SP se puede determinar por el método gravimétrico o a través de mediciones de reflectividad óptica. Para ambos métodos se debe conocer el espesor de la capa porosa. El método gravimétrico es simple pero no muy preciso, ya que se basa en el conocimiento de la masa de la oblea de Si antes (m_1) y después del ataque (m_2), además del volumen V_{total} de la región atacada (ver Fig. 5.1). La porosidad, P , de una capa porosa, se define como la fracción de volumen de aire (V_{aire}) que hay en el volumen total de ésta, y se determina por:

$$P = \frac{V_{aire}}{V_{total}}, \quad (5.1)$$

la cual puede ser expresada también como:

$$1 - P = \frac{V_{Si}}{V_{total}}, \quad (5.2)$$

donde V_{Si} es el volumen de Si en la capa, ya que el SP consiste de una matriz de Si con poros llenos de aire. La porosidad gravimétrica (P_{grav}) se calcula con la ecuación:

$$P_{grav} = \frac{m_1 - m_2}{V_{total} \cdot \rho_0}, \quad (5.3)$$

donde ρ_0 es la densidad del Si cristalino y tiene un valor de 2.330 g/cm³. El volumen puede aproximarse a través de la relación $V_{total} = A \cdot d$, donde A es el área de la superficie atacada

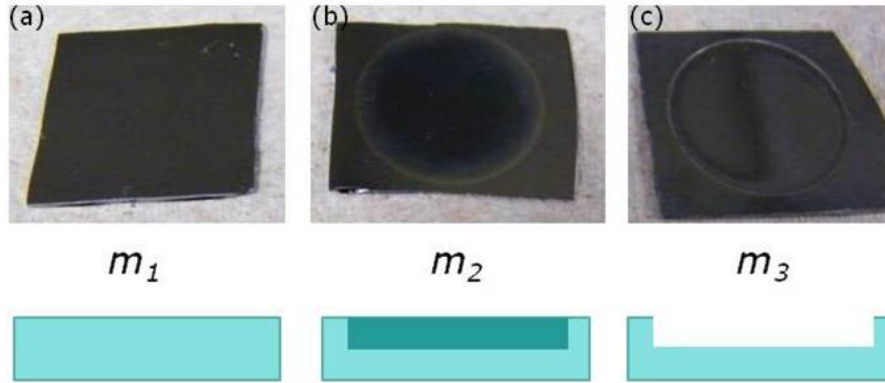


Figura 5.1: (a) Muestra de Si cristalino antes del ataque, (b) monocapa de de SP en el sustrato de Si y (c) sustrato de Si después de que la capa porosa ha sido removida.

y d , el espesor de la capa. Si se remueve la capa porosa, y se mide la masa del sustrato de Si (sin SP) m_3 (ver Fig. 5.1(c)), entonces puede escribirse la siguiente relación:

$$V_{total} \cdot \rho_0 = m_1 - m_3. \quad (5.4)$$

Sustituyendo la Ec. (5.4) en la Ec. (5.3), se encuentra que

$$P_{grav} = \frac{m_1 - m_2}{m_1 - m_3}. \quad (5.5)$$

El espesor también puede determinarse con la ecuación (5.4), si se aproxima el volumen de la monocapa al volumen de un cilindro:

$$d = \frac{m_1 - m_3}{A \cdot \rho_0}. \quad (5.6)$$

Este método para calcular el espesor es destructivo ya que requiere remover las capas porosas para medir la masa del sustrato m_3 . Además, debido a que las diferencias de masa son muy pequeñas este método no es muy preciso, sin embargo, da una estimación aproximada de la porosidad.

El método gravimétrico se puede aplicar a monocapas, pero en sistemas de multicapas, no es posible encontrar las porosidades de las capas individuales que forman la estructura, por lo que en este trabajo se utilizan mediciones de interferencia de modos electromagnéticos para determinar la porosidad tanto de monocapas como de multicapas. Los espesores de las capas de SP se pueden obtener también mediante métodos mucho más exactos. En este trabajo, para muestras gruesas se utiliza la técnica de perfilometría para

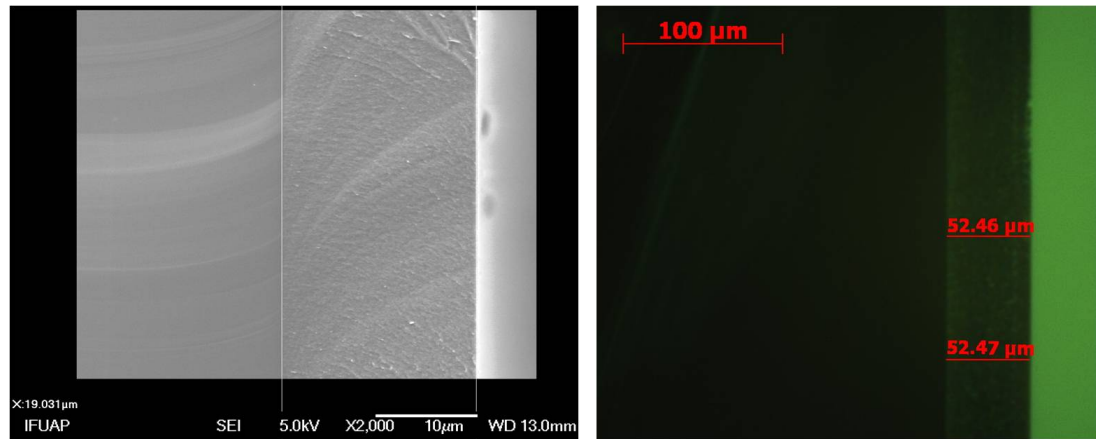


Figura 5.2: A la izquierda, imagen SEM para una monocapa de $19.0 \mu\text{m}$; y a la derecha imagen de microscopía óptica para una monocapa de $52.5 \mu\text{m}$.

medir los espesores de las monocapas delgadas, y microscopía óptica. Algunas muestras fueron medidas utilizando imágenes de SEM para corroborar los resultados. La microscopía óptica y SEM son técnicas parcialmente destructivas, ya que la muestra necesita ser fraccionada para observar la sección transversal y medir el espesor de la capa. En la Fig. 5.2 se muestran imágenes de SEM (a la izquierda) y de microscopía óptica para dos monocapas, una de $19.0 \mu\text{m}$ y otra de $52.5 \mu\text{m}$, respectivamente. En ambas imágenes, la superficie de la muestra está a la derecha y el sustrato a la izquierda.

5.2 Perfilometría

La técnica de perfilometría permite determinar los espesores de capas de SP de forma indirecta. Primero, se remueven las monocapas de SP del sustrato utilizando una solución de NaOH de concentración 1 Normal (1 N), que disuelve el SP sin afectar al sustrato de Si. Después se utiliza un perfilómetro de superficie para hacer un barrido por el hueco que ha quedado en el sustrato después de disolver la capa porosa. Esta técnica es totalmente destructiva y cualquier caracterización requerida debe hacerse antes de remover el SP.

El perfilómetro de superficie (también conocido como perfilómetro *stylus*) es un instrumento utilizado para analizar la topografía superficial de una muestra, lo que permite determinar su rugosidad superficial. Consta de una punta de diamante que, con movimientos verticales y laterales, escanea a través de la superficie, y permite medir el desplazamiento

vertical como función de la posición. En este trabajo se utiliza un perfilómetro marca Veeco modelo Dektak 150, cuya máxima resolución vertical es de 1 \AA y puede hacer barridos horizontales de hasta 55 mm.

En la Fig. 5.3 se muestra un ejemplo del tipo de mediciones que se obtienen a partir de la técnica de perfilometría. Las líneas rojas y azules corresponden a dos direcciones de barrido diferentes y perpendiculares entre sí. El espesor que se reporta para cada muestra corresponde al promedio de varias mediciones en las distintas direcciones. Además del espesor, los perfiles permiten observar los relieves en el sustrato, lo que habla de la rugosidad en la interfaz SP-sustrato que, en general, es pequeña como en los casos mostrados en la Fig. 5.3.

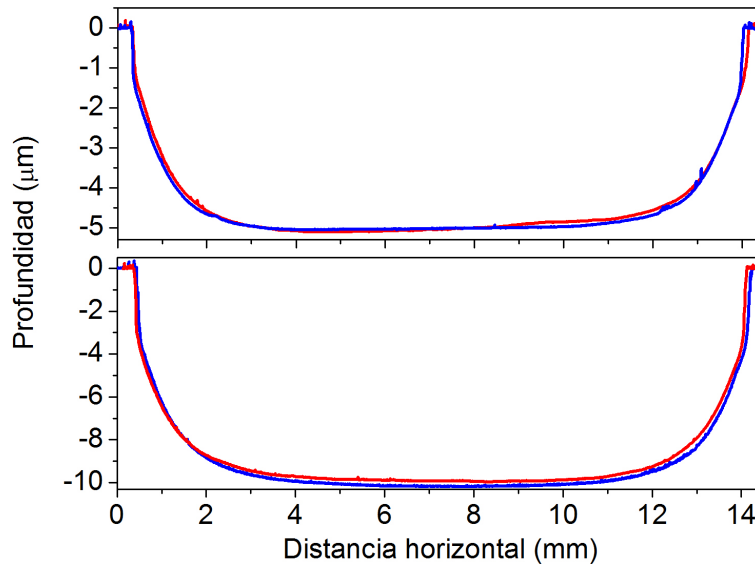


Figura 5.3: Perfiles observados para dos muestras diferentes. Para cada una se presentan dos mediciones en dos direcciones perpendiculares entre sí (notar que la escala en el eje horizontal es tres órdenes de magnitud mayor que la escala en el eje vertical).

5.3 Índice de refracción efectivo en monocapas de SP

El SP se puede describir como un medio efectivo que consiste en poros llenos de aire y rodeados por una matriz de Si. Los índices de refracción de cada material por separado, aire y Si, se conocen, pero el índice de refracción efectivo del nuevo medio debe determinarse. La forma y tamaño de los poros en la matriz de Si, así como la sustancia

dentro de los poros, determinan sus propiedades ópticas. El tamaño de poro que se obtiene en el tipo de obleas y bajo las condiciones del ataque electroquímico utilizadas aquí, es de ~ 20 nm de diámetro, según estudios previos hechos por el grupo de investigación.

Un método muy simple para evaluar el índice de refracción de una capa o película delgada, es analizar su patrón de interferencia, resultante de las reflexiones múltiples entre las interfaces para obtener su espesor óptico. Este método se utiliza comúnmente para el caso incidencia normal [70, 135]. Sin embargo, se tiene como limitación experimental que el ángulo de incidencia mínimo que permite el equipo de medición de la reflectancia óptica es de 20° , por lo que aquí se presentan las expresiones para el cálculo del índice de refracción para cualquier ángulo de incidencia. La Fig. 5.4 muestra un esquema de la interferencia de un haz de luz que incide sobre una película delgada. La luz que viaja de un medio con índice de refracción n_0 , se encuentra con una película delgada con índice de refracción n . Parte de la luz se transmite a través de la capa y parte se refleja. Este sistema implica interferencia entre la luz que se refleja desde la interfaz superior de la película y la luz que se refleja desde la interfaz inferior de la película. En nuestro caso, el medio de incidencia es aire, cuyo índice de refracción es $n_0=1$. El patrón de interferencia reflejado se caracteriza por una serie de picos y valles. La capa porosa de la muestra actúa como un interferómetro de Fabry-Pérot con la luz reflejada desde las interfaces aire/SP y SP/Sustrato de Si (ver Fig. 5.4). Suponiendo que la película de SP tiene superficies paralelas y que el índice de refracción es una función suave de la longitud de onda es posible deducir, de la posición de los máximos o mínimos de reflectancia, el valor del índice de refracción [136]. La separación entre los máximos o mínimos en el espectro de reflectancia puede utilizarse para determinar el producto nd , donde n es el índice de refracción efectivo de la capa porosa y d es el espesor físico de la capa o la distancia física entre las dos interfaces reflectantes. Dado que d se puede medir, entonces el índice de refracción efectivo es el único parámetro desconocido.

Los máximos en el espectro de reflectividad corresponden a interferencia constructiva, y los mínimos a interferencia destructiva. La condición en la que ocurre interferencia constructiva es

$$m\lambda_m = 2nd \cos \theta, \quad \text{donde } m = 1, 2, \dots \quad (5.7)$$

Las expresiones para dos máximos consecutivos son:

$$m = \frac{2nd \cos \theta}{\lambda_m} \quad (5.8)$$

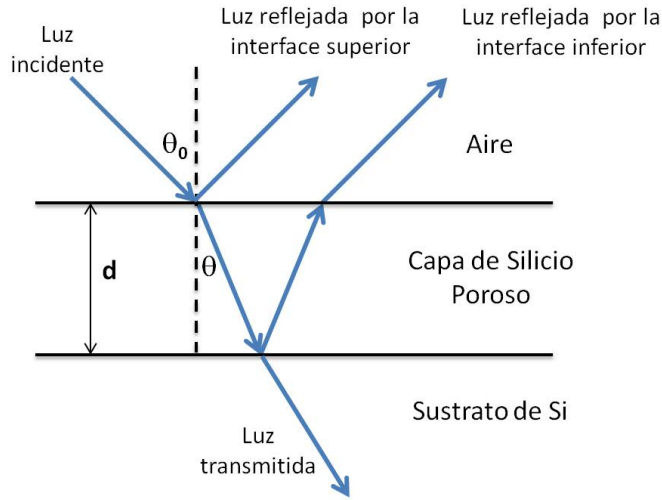


Figura 5.4: Diagrama esquemático de la reflexión de un haz de luz incidiendo a un ángulo θ_0 sobre una monocapa de SP con índice de refracción n y espesor d .

y

$$m + 1 = \frac{2nd \cos \theta}{\lambda_{m+1}}. \quad (5.9)$$

De estas dos expresiones se obtiene:

$$n \cos \theta = \frac{1}{2d} \frac{\lambda_m \lambda_{m+1}}{\lambda_{m+1} - \lambda_m}. \quad (5.10)$$

En lugar de θ , se expresa la ecuación (5.10) en términos del ángulo de incidencia θ_0 , aplicando la ley de Snell

$$n \sqrt{1 - \text{sen}^2 \theta} = n \sqrt{1 - \frac{\text{sen}^2 \theta_0}{n^2}} = \frac{1}{2d} \frac{\lambda_m \lambda_{m+1}}{\lambda_{m+1} - \lambda_m}. \quad (5.11)$$

La expresión resultante para el índice de refracción n para cualquier ángulo de incidencia θ_0 es:

$$n = \sqrt{\left[\frac{1}{2d} \frac{\lambda_m \lambda_{m+1}}{\lambda_{m+1} - \lambda_m} \right]^2 + \text{sen}^2 \theta_0}, \quad (5.12)$$

donde λ_m es la longitud de onda del m -ésimo máximo del espectro de reflectividad y d es el espesor de la monocapa.

En este trabajo se utiliza la ecuación (5.12) para obtener una primera aproximación del índice de refracción de las monocapas fabricadas. Para aplicar esta ecuación, es necesario medir el espectro de reflectancia y conocer el espesor de la monocapa. La caracterización

óptica de cada monocapa de SP se lleva a cabo utilizando un espectrómetro VARIAN-CARY 5000 (Varian Inc., NC, USA) con luz sin polarizar. Se mide la reflectancia especular en la región de 400 a 2800 nm, a un ángulo de incidencia $\theta_0=20^\circ$, que es el mínimo posible en el equipo. En la Fig. 5.5, con una línea continua se muestra como ejemplo el espectro de reflectancia medido para una monocapa fabricada aplicando $J=50 \text{ mA/cm}^2$ durante 90 s. Se puede observar el patrón de interferencia característico de una película delgada. El espesor de la monocapa fue determinado mediante perfilometría. En la Fig. 5.6 se presentan 4 mediciones en diferentes direcciones, pasando por la parte central del hueco, el espesor que se considera, es el promedio de todas las mediciones, $3.85 \mu\text{m}$ en este caso.

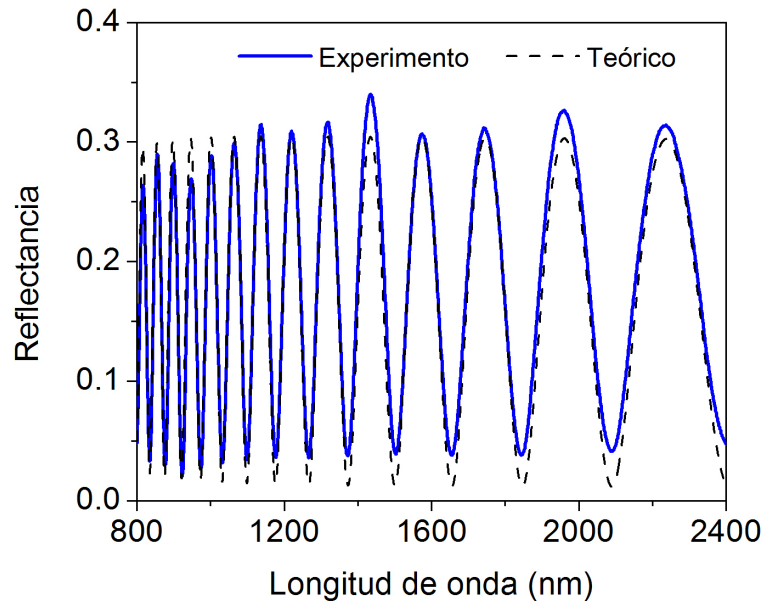


Figura 5.5: Patrón de interferencia para una monocapa de SP fabricada aplicando 50 mA/cm^2 durante 90 s. La línea continua corresponde al espectro medido, mientras que la línea a trazos al espectro calculado teóricamente, considerando un espesor de $3.85 \mu\text{m}$ y una porosidad de 52.1%.

El índice de refracción para esta monocapa se calcula de acuerdo a la ecuación (5.12). Se encuentra que éste varía desde 2.35 hasta 2.10 para el intervalo de longitud de onda entre 800 y 2400 nm, lo que demuestra que el índice de refracción del SP no es constante en este intervalo de longitud de onda, debido a los efectos de dispersión. La dispersión es una propiedad de los materiales que hace que ondas con diferentes longitudes

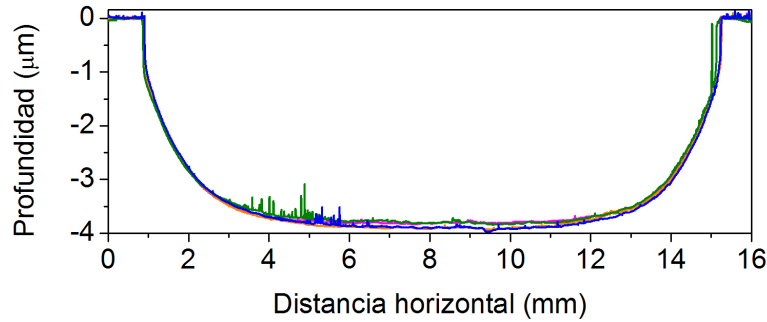


Figura 5.6: Perfil medido para una monocapa fabricada aplicando 50 mA/cm^2 durante 90 s. Las cuatro líneas son barridos en direcciones horizontales diferentes, pasando por la parte central del hueco.

viajen a diferentes velocidades a través del material. El Si presenta mayor dispersión en la región UV y visible del espectro, que se reduce hacia la región infrarroja. Aunque las mediciones ópticas que se han hecho a monocapas y multicapas de SP sobre sustratos de Si están en la región del infrarrojo, en los cálculos se incluyen las propiedades de dispersión del Si. Se utiliza el modelo de Cauchy para introducir las propiedades de dispersión del Si al método teórico; este modelo es útil para materiales dieléctricos, lejos de la banda de absorción [136]. La ecuación de Cauchy es una relación empírica entre el índice de refracción complejo y la longitud de onda de la luz λ , en particular, para materiales transparentes. La forma más general de la ecuación de Cauchy para la parte real (n) y la parte imaginaria (k) del índice de refracción es [137]:

$$n = A + \frac{B}{\lambda^2} + \frac{C}{\lambda^4}, \quad (5.13)$$

y

$$k = De^{E/\lambda}, \quad (5.14)$$

donde A , B , C , D y E son coeficientes constantes que pueden encontrarse ajustando datos experimentales de los índices de refracción medidos en cada longitud de onda. Las constantes para el Si cristalino son: $A=3.432$, $B=1.003 \times 10^5$, $C=3.257 \times 10^{10}$, $D=0.0001156$ y $E=3216$, para λ dada en nanómetros, y sólo es aplicable a longitudes de onda por encima de ~ 400 nm, debido al alto nivel de absorción óptica del Si en la región UV.

En la Fig. 5.7 se muestra la parte real e imaginaria del índice de refracción para el Si cristalino como función de la longitud de onda, donde $n(\lambda)$ es la parte real del índice

de refracción y $k(\lambda)$ es la parte imaginaria. Se grafican con curvas continuas los valores reportados en [138] y con círculos los valores calculados usando las ecuaciones (5.13) y (5.14). Se observa que en la región del IR, el índice de refracción es relativamente constante, a medida que la longitud de la onda incidente está lejos de los picos de absorción del material. La dispersión, o cambio en el índice de refracción con la longitud de onda, se vuelve más significativa hacia la región visible del espectro.

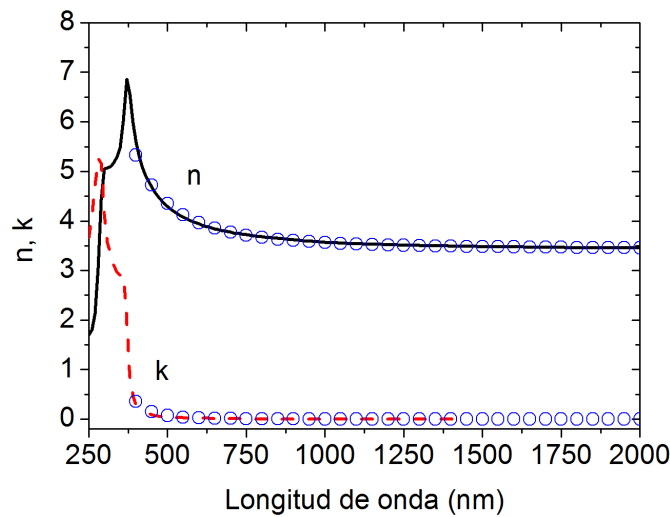


Figura 5.7: Parte real (n) y parte imaginaria (k) del índice de refracción del Si cristalino. Las curvas continuas corresponden a los valores reportados en [138] y los círculos a los valores calculados usando las ecuaciones (5.13) y (5.14).

Una vez que se ha calculado el índice de refracción efectivo de la capa porosa a través de la ecuación (5.12), se utiliza una aproximación de medio efectivo para calcular su porosidad. Las mediciones experimentales de reflectancia se comparan con los resultados teóricos obtenidos utilizando el espesor medido y el índice de refracción efectivo calculado, para ayudar a encontrar la porosidad *real* de la monocapa. En la Fig. 5.5 se grafica en línea a trazos el espectro de reflectancia óptica calculado teóricamente para la monocapa medida por perfilometría, cuyo espesor promedio es de $3.85 \mu\text{m}$ y tiene una porosidad de 52.1%. En el método teórico se considera la dependencia del índice de refracción con la longitud de onda, a través de las ecuaciones (5.13) y (5.14). Se utiliza la aproximación de medio efectivo de Bruggeman para relacionar la porosidad con el índice de refracción efectivo de

la capa porosa, como se describe a continuación.

5.4 Aproximaciones de medio efectivo

Un medio poroso presenta diferentes propiedades ópticas que el mismo material en bulto. Si el tamaño de las características (por ejemplo, el tamaño de poro) es mucho menor que la longitud de onda del campo electromagnético incidente, el campo se propaga en el medio poroso con una función dieléctrica efectiva. Esta función dieléctrica efectiva depende de las funciones dieléctricas del material en bulto y del material dentro de los poros (por ejemplo, aire), en una proporción controlada por la porosidad. La teoría que describe la función dieléctrica de medios mixtos es la *teoría de medio efectivo*. Existen varios modelos de medio efectivo; por ejemplo, el de Bergman [139], Maxwell-Garnett [140], Looyenga [141] y Bruggeman [142]. La principal diferencia entre estos formalismos se encuentra en cómo se toma en cuenta la microtopología de los poros. La respuesta óptica de un medio poroso cambia con el grado de “conexión” (fuerza de percolación) de la red y el tamaño de los segmentos de material que quedan en el medio. Esta dependencia con la microtopología hace que el problema de encontrar una correspondencia entre la porosidad y la función dieléctrica efectiva no sea trivial. Maxwell-Garnett, Looyenga y Bruggeman suponen ciertas microtopologías, por lo que la validez de la función dieléctrica efectiva está más o menos limitada, si se considera que la microtopología del SP depende en gran medida de parámetros de formación. Un ejemplo de esto fue reportado por Setzu *et al*, donde muestras con la misma porosidad, pero obtenidas con diferentes parámetros de formación, dan índices de refracción significativamente diferentes [108]. La fórmula de Bergman es general y tiene en cuenta la microtopología a través de una función de densidad espectral, sin embargo, esta función es normalmente desconocida y debe especificarse para todas las microtopologías de las diferentes películas de SP, por lo que hace a este enfoque muy complicado. En las referencias [143, 144] se discute ampliamente el uso de la teoría de medio efectivo para describir las propiedades ópticas del SP. La Fig. 5.8 se ha tomado de la referencia [144], y muestra una comparación de varias aproximaciones de medio efectivo.

A pesar de que existen varias teorías de medio efectivo, el formalismo más citado relacionado con el SP, es el de Bruggeman. La popularidad de esta aproximación se basa en un documento elaborado por Aspnes, donde se realizaron mediciones de elipsometría espectroscópica a Si amorfo en bulto, y el modelo que dio el mejor ajuste fue el de Bruggeman

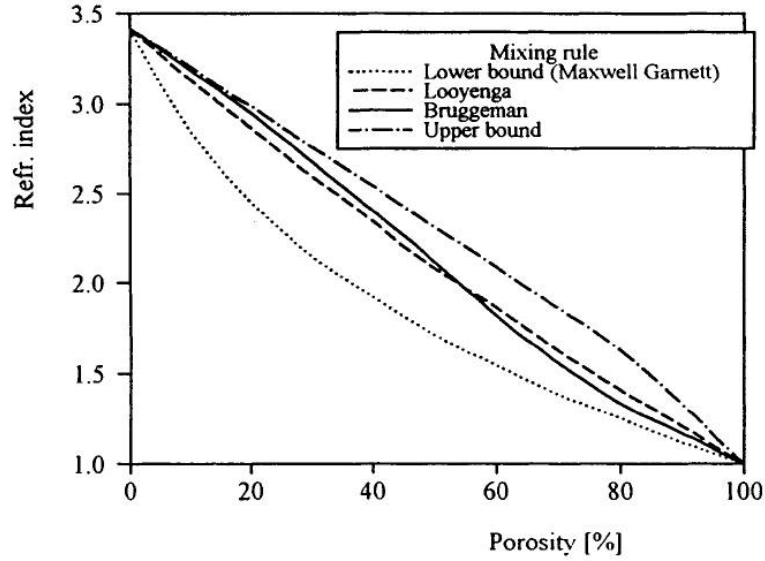


Figura 5.8: Comparación de diferentes aproximaciones de medio efectivo, donde se grafica la parte real del índice de refracción como una función de la porosidad (Tomado de la Ref. [144]).

[145]. Este modelo también se utiliza en esta tesis para todos los cálculos de índice de refracción-porosidad. Las muestras que se presentan aquí, deben tener un rango estrecho de topologías debido a que el intervalo de resistividades del sustrato es reducido, al igual que el de las concentraciones de HF en el electrolito, de modo que cualquier error introducido por la elección de este modelo será sistemático.

El modelo de Bruggeman está descrito mediante la siguiente expresión:

$$\sum_i f_i \frac{\varepsilon_i - \varepsilon_{eff}}{\varepsilon_i + 2\varepsilon_{eff}} = 0, \quad (5.15)$$

donde la fracción de volumen del material i dentro del medio poroso se define por f_i , ε_i es la función dieléctrica del material embebido y ε_{eff} la función dieléctrica efectiva. Para poros llenos de aire en una matriz de silicio, se obtiene:

$$P \frac{\varepsilon_{aire} - \varepsilon_{eff}}{\varepsilon_{aire} + 2\varepsilon_{eff}} + (1 - P) \frac{\varepsilon_{Si} - \varepsilon_{eff}}{\varepsilon_{Si} + 2\varepsilon_{eff}} = 0, \quad (5.16)$$

donde P es la porosidad, ε_{aire} , ε_{Si} , ε_{eff} son las funciones dieléctricas del material en la matriz (Si), del material embebido (aire/vacío) y del medio efectivo (SP), respectivamente.

Considerando medios dispersivos, la función dieléctrica compleja se define como $\hat{\epsilon} = \epsilon_r + i\epsilon_i$, y su relación con el índice de refracción complejo $\hat{n} = n + ik$, es a través de $\hat{n} = \sqrt{\hat{\epsilon}\mu}$. Aquí se supone, para todos los cálculos, que los materiales son no magnéticos, es decir, la permeabilidad magnética μ es igual a 1.

Las diferentes funciones dieléctricas e índices de refracción utilizados en el cálculo de la función dieléctrica efectiva del SP, se toman de la literatura. Para el aire, se utiliza un valor constante de 1, tanto para la función dieléctrica como para el índice de refracción. La función dieléctrica del silicio cristalino como una función de la longitud de onda de la radiación incidente se encuentra tabulada en varios reportes. Una referencia estándar para las constantes ópticas de Si es la realizada por Palik [138], graficadas con líneas en la Fig. 5.7. También se llevaron a cabo algunas mediciones de elipsometría, que es una técnica que permite determinar el índice de refracción (n) y la constante de absorción óptica (k). Los resultados obtenidos para el sustrato de Si cristalino se muestran con líneas continuas en la Fig. 5.9, y con líneas punteadas para una monocapa de SP. En esta tesis, se utilizan las ecuaciones (5.13) y (5.14) para calcular las constantes ópticas del Si como función de la longitud de onda. Estos valores se introducen en la Ec. (5.16) y se obtiene el índice de refracción y la constante de absorción efectivos en función de la longitud de onda para cada valor de la porosidad.

5.5 Caracterización óptica de multicapas de silicio poroso

El espectro de reflectancia óptica de un sistema de multicapas de SP es diferente al observado para una monocapa, pues cada una de las interfaces contribuyen a que la onda electromagnética incidente sea reflejada y transmitida. La respuesta óptica de un sistema compuesto por muchas capas de SP dependerá del perfil del índice de refracción efectivo de la estructura. Los sistemas periódicos, diseñados para presentar brechas acústicas alrededor de 1 GHz, presentan la brecha óptica principal en el MIR y las brechas de orden superior en las regiones del visible y del IR cercano (NIR).

En la Fig. 5.10 se muestra un ejemplo de la respuesta óptica de un sistema periódico de SP en la región NIR del espectro. Este sistema consta de 10 periodos de capas alternadas de baja (43%) y alta (73%) porosidad, con espesores individuales de 205 y 315 nm, respectivamente. Los espesores y porosidades fueron elegidos de acuerdo a la Ec. (2.13) para obtener la banda prohibida principal centrada a una longitud de onda $\lambda_B=1900$ nm.

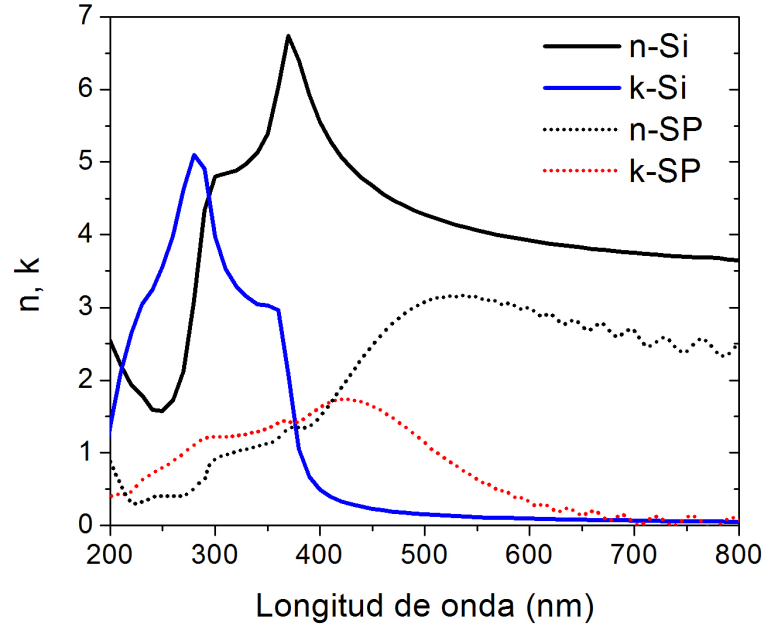


Figura 5.9: n y k obtenidos por elipsometría para el Si cristalino y para una monocapa de SP.

Los tiempos de ataque y las densidades de corriente utilizadas para fabricar esta muestra fueron elegidos según la Fig. 4.2. Un sistema con estos espesores podría aplicarse en acústica de altas frecuencias, cercanas a 20 GHz (de acuerdo con la Ec. (2.14)). El lado izquierdo de la Fig. 5.10 corresponde al espectro medido (línea continua) y al mejor ajuste teórico (línea a trazos) para una muestra fabricada de la “forma tradicional”, es decir, haciendo pausas de corriente únicamente en las interfaces de la estructura. En esta muestra se utilizaron pausas de corriente de 3 segundos entre cada capa de alta y baja porosidad, y sin pausas de corriente durante el crecimiento de cada capa. El ajuste teórico corresponde a espesores de 200 y 310 nm y porosidades de 45 y 75%, respectivamente. A la derecha de la Fig. 5.10 se presenta la reflectancia óptica para una muestra fabricada introduciendo cinco pausas de corriente de 4 s en cada capa. Es evidente que la introducción de estas pausas de corriente mejora sustancialmente la calidad de la estructura, no sólo porque se puede ver la brecha principal perfectamente definida, sino también porque los espesores y porosidades utilizados en los cálculos teóricos corresponden a los parámetros de diseño. Se

observa claramente el excelente acuerdo entre el espectro medido y el calculado. Con el primer procedimiento (espectro a la izquierda de la Fig. 5.10) aún se tiene un gradiente en la porosidad, el cual causa, además de un corrimiento al azul, bandas prohibidas que no se encuentran bien definidas. El corrimiento en la posición de la banda prohibida (~ 90 nm) se debe al incremento en la porosidad y a la disminución en el espesor de las capas. Esto significa que la muestra del lado izquierdo no fue fabricada con suficientes pausas de corriente que permitieran recuperar la concentración de HF en la parte inferior de los poros, donde se lleva a cabo el ataque. Sin embargo, el procedimiento utilizado para fabricar la muestra de la derecha, se encontró como el óptimo para fabricar estructuras con capas individuales delgadas, del orden de nanómetros.

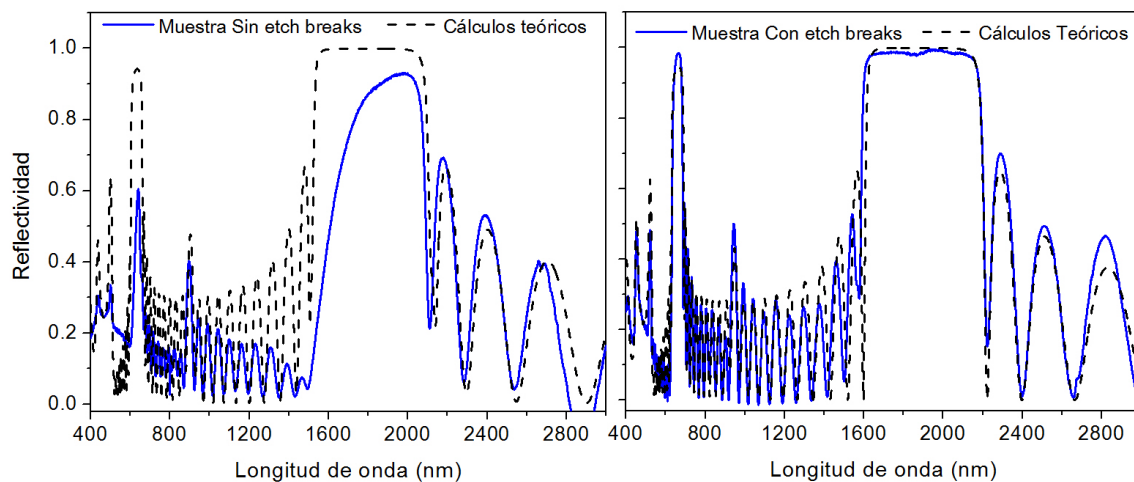


Figura 5.10: Reflectividad óptica para un sistema periódico diseñado para obtener la brecha principal centrado en 1900 nm. Izquierda: Línea continua, reflectividad medida para una muestra fabricada sin introducir pausas de corriente durante el crecimiento de cada capa. Línea a trazos, cálculos teóricos utilizando los datos dados en el texto. Derecha: Línea punteada, reflectividad medida para una muestra fabricada introduciendo pausas de corriente en cada capa porosa. Línea a trazos, cálculos teóricos utilizando los datos dados en el texto.

Para un sistema periódico con capas individuales más gruesas, del orden de micras como las del interés de este trabajo, la banda prohibida óptica fundamental se encuentra a longitudes de onda mayores. En la Fig. 5.11 se presenta el espectro de reflectividad óptica, tanto teórico como experimental, en la región del MIR, mientras que su espectro de

transmitancia acústica puede verse en la Fig. 5.17. La muestra diseñada para aplicaciones acústicas alrededor de 1 GHz tiene capas individuales con espesores de 0.90 y 2.44 μm y porosidades de 43% y 56%, respectivamente. La brecha óptica principal se observa en 13300 nm y las brechas de orden superior hacia longitudes de onda menores. Esta muestra fue fabricada introduciendo pausas de corriente, por lo tanto, se obtienen brechas ópticas y acústicas bien definidas y en las posiciones esperadas, según los cálculos teóricos.

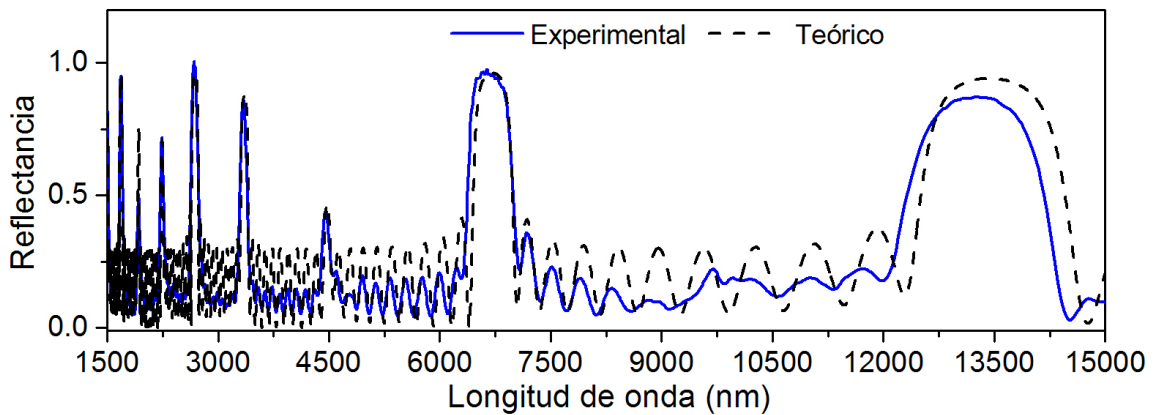


Figura 5.11: Espectro de reflectancia en la región del MIR para un espejo de Bragg donde se observa la banda prohibida principal en 13300 nm y los *gaps* de órdenes superiores hacia longitudes de onda menores. La línea continua corresponde al espectro medido y la línea a trazos al espectro calculado teóricamente. El espectro de transmisión acústica de esta muestra se presenta en la Fig. 5.17.

5.6 Medición de la transmisión acústica en silicio poroso

Para llevar a cabo los experimentos de transmisión acústica que se presentan en este trabajo, se montó y puso en marcha un nuevo laboratorio de investigación. En la Fig. 5.12 se muestra un diagrama esquemático del arreglo experimental implementado para la realización de estas mediciones. El arreglo consta principalmente de un analizador de redes vectorial (VNA, por sus siglas en inglés) R&S® ZVL3, un par de transductores piezoeléctricos, un arreglo de posicionadores micrométricos y dos microscopios ópticos ortogonales. Para medir la respuesta de transmisión acústica de una muestra, ésta se coloca entre los dos transductores piezoeléctricos que operan a una frecuencia central de 1,1 GHz con un ancho de banda

de ~ 500 MHz. Los transductores consisten en una capa piezoeléctrica de ZnO que emite ondas hacia una pila de Si cristalino con espesor de $520 \mu\text{m}$ y revestimiento antirreflectante de SiO_2 . Las ondas ultrasónicas generadas por los transductores se transmiten a través de una sección transversal cuadrada de $200 \mu\text{m}^2$. El efecto piezoeléctrico se crea cuando se aplica un campo eléctrico a un material, usualmente un cristal, derivando en una respuesta mecánica por parte de dicho material; en forma inversa, el material piezoeléctrico responde con un voltaje cuando se le aplica un esfuerzo mecánico. Un voltaje oscilante produce una respuesta mecánica oscilante que excita la propagación de ondas sobre un objeto que se encuentra en contacto con el transductor [146].

La superficie frontal de cada transductor es alineada paralelamente a la superficie de la muestra usando dos microscopios ortogonales, para garantizar que las ondas acústicas se emitan normales a las capas de SP. Para acoplar los transductores a la muestra, debe utilizarse una sustancia líquida, en este caso, agua desionizada o una mezcla In-Ga eutéctica. No se detectó penetración del líquido de acoplamiento en los poros, ya que si se cambia de un líquido al otro, no se afecta la velocidad del sonido medido. Los transductores tienen que ser colocados a unos pocos micrómetros de la superficie de la muestra, ya que la longitud de atenuación de ondas acústicas en líquidos con frecuencias alrededor de 1 GHz es corta. Además, los transductores no deben estar en contacto directo con la muestra para evitar dañarla a ésta o a los transductores. Para controlar la distancia entre los transductores y la muestra, se utiliza un arreglo de posicionadores micrométricos, con los cuales también es posible ajustar su posición angular. Cuando los transductores ya están acoplados a la muestra, se envía una señal eléctrica desde el VNA hasta uno de los transductores piezoeléctricos, el cual convierte la energía eléctrica en energía mecánica y envía ondas acústicas a través de las muestras; el segundo transductor convierte la energía de la onda acústica transmitida en energía eléctrica, que es recopilada por el VNA. El VNA es capaz de detectar tanto la amplitud como la fase de la señal transmitida, en un intervalo de frecuencia desde 9 KHz hasta 3 GHz. Las longitudes de onda acústicas excitadas a través del SP, a una frecuencia de 1 GHz, son de 3-7 μm , dependiendo de la porosidad.

Con un VNA se pueden medir los parámetros de reflexión y transmisión (parámetros S) como una función de la frecuencia. Éste consta de dos puertos, uno que transmite la señal eléctrica (puerto 1) y otro que la recibe (puerto 2). El parámetro de transmisión S_{21} se mide en el puerto 2 mediante la recepción de la señal transmitida desde el puerto 1. El parámetro S_{12} se mide en el sentido inverso. La reflexión puede medirse en el puerto 1, S_{11} ,

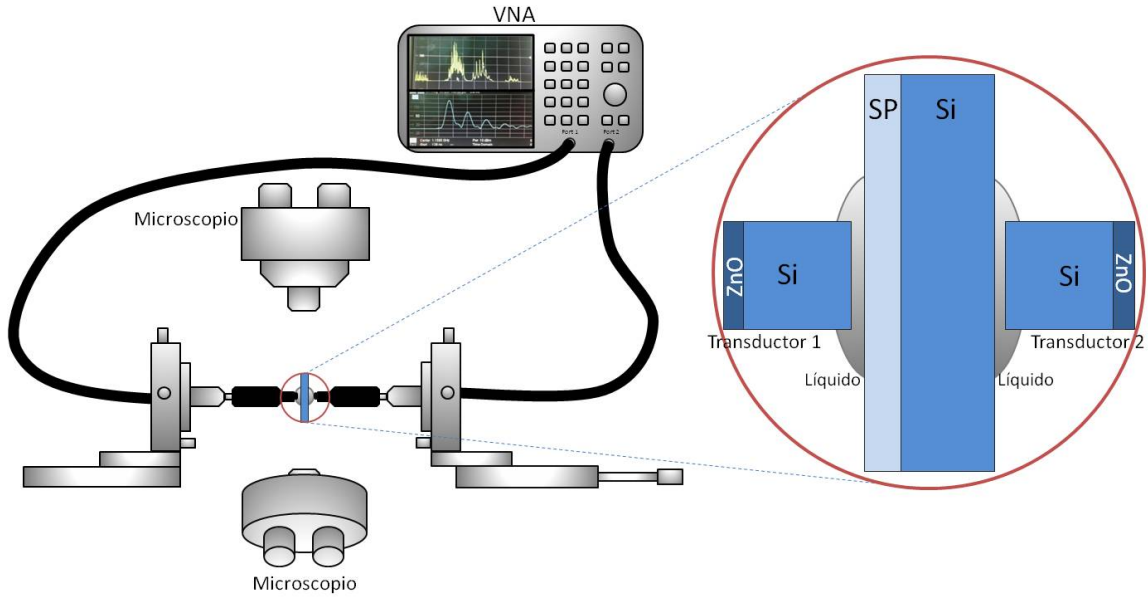


Figura 5.12: Arreglo experimental para la medición de la transmisión acústica.

o en el puerto 2, S_{22} .

Los parámetros S medidos, los cuales están relacionados con los coeficientes de reflexión y transmisión, pueden presentar diferencias en amplitud con los resultados esperados; estas diferencias pueden derivarse de errores aleatorios y sistemáticos como el ruido térmico introducido y las pérdidas en el arreglo. Los errores sistemáticos pueden eliminarse si el sistema se calibra en las mismas condiciones en las que se hacen las mediciones acústicas, por ejemplo, el mismo rango de frecuencia y ancho de banda. Por lo tanto, antes de realizar cualquier medición y con el fin de compensar los efectos de dispersión debidos a desajustes de impedancia, se llevó a cabo una calibración completa del sistema usando el *kit* de calibración proporcionado por el mismo fabricante. En la Fig. 5.13 se muestra la parte real e imaginaria del parámetro de transmisión S_{21} para los dos transductores (nominalmente idénticos) colocados uno frente al otro y acoplados a través de una delgada capa de líquido (In-Ga en este caso). El espectro en la parte inferior de la Fig. 5.13 corresponde a la magnitud de la señal, calculada a través de: $|Y| = \sqrt{\Re^2 + \Im^2}$, donde \Re e \Im son las partes real e imaginaria del parámetro S_{21} . La forma global de la señal está determinada por la respuesta conjunta de los dos transductores (la eficiencia de emisión de uno, acoplado a la eficiencia de recepción del otro). Los detalles finos del espectro corresponden a los modos

acústicos longitudinales de las pilas de Si en los transductores. Esta medición se llevó a cabo utilizando un ancho de banda de muestreo de 100 Hz y una potencia en la fuente de 10 dBm. La transmisión acústica medida para las muestras se normaliza a esta respuesta de los transductores, y las mediciones se llevarán a cabo dentro de esta banda de respuesta, es decir, entre 0.8 y 1.4 GHz, aproximadamente.

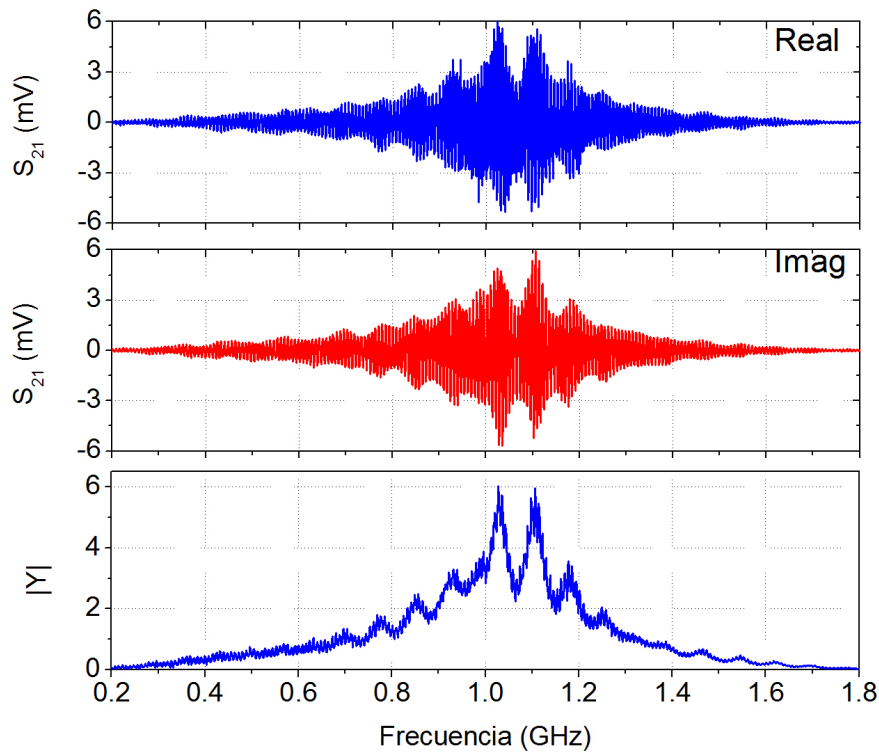


Figura 5.13: Parte real (línea azul) y parte imaginaria (línea roja) de la señal transmitida entre los transductores acoplados con agua. Abajo se grafica la magnitud de esta señal.

5.6.1 Dependencia de la velocidad longitudinal con la porosidad

En el capítulo 4 se describió cómo la velocidad longitudinal depende de la porosidad, y que esta dependencia se modifica según el tipo de obleas de Si sobre las que se fabrican las muestras y las condiciones del proceso de anodización. Por lo tanto, es necesario determinar la relación velocidad longitudinal-porosidad para el tipo de obleas que se utilizan en esta tesis y, de esta forma, poder diseñar y fabricar sistemas con respuestas acústicas específicas. La dependencia de la velocidad con la porosidad se determina por un

proceso similar al utilizado para determinar la porosidad por mediciones ópticas: utilizando múltiples reflexiones en monocapas de SP de ondas acústicas, en este caso.

Las múltiples reflexiones surgen debido a los contrastes de impedancia en las interfaces dentro de la muestra y con el medio circundante. Cuando una onda elástica que se propaga por un medio encuentra una interfaz, parte de la onda incidente se transmite y parte de ella se refleja, por lo que la onda se someterá a múltiples reflexiones dentro de cada capa del sistema. En la Fig. 5.14 se grafica la parte real e imaginaria del espectro de transmisión visto para una monocapa de SP sobre el sustrato de Si (ver arreglo a la derecha de la Fig. 5.12), así como la magnitud de la señal. El acoplamiento de las ondas que viajan a través de las cuatro capas adicionales (líquido-SP-Si-líquido) resulta en la modulación de los modos de los transductores y en la reducción de la amplitud de la señal de transmisión, debido a la reflectividad total entre capas de diferente impedancia, a la atenuación acústica y a las pérdidas por dispersión.

Se realizaron mediciones como la mostrada en la Fig. 5.14 para cada una de las monocapas fabricadas. Para facilitar el análisis de la señal transmitida, se calculó la respuesta equivalente, en el dominio del tiempo (ver Fig. 5.15), utilizando el algoritmo de la transformada rápida de Fourier, que incorpora tanto la amplitud como la fase de la señal medida.

La señal original en el dominio de la frecuencia se describe por la suma de los números complejos Y_k :

$$Y_k = \sum_{n=0}^{N-1} y_n e^{-\frac{i2\pi}{N} kn}, \quad (5.17)$$

los cuales representan la amplitud y fase de las diferentes componentes sinusoidales de la señal de entrada y_n , donde $k=0, \dots, (N-1)$ para N números complejos Y_0, \dots, Y_{N-1} .

En el espectro de la Fig. 5.14, son 4001 puntos los que conforman el conjunto de los números complejos Y_k , y cada frecuencia individual tiene tanto una parte real como una imaginaria, $Y_k = a + ib$. La ecuación anterior también puede escribirse como,

$$Y_k = \rho e^{i\phi}, \quad (5.18)$$

donde $\rho = \sqrt{a^2 + b^2}$ es la amplitud de la señal original en el dominio de la frecuencia descrito por las partes real e imaginaria a y b , mientras que la fase está representada por ϕ . Si la frecuencia de muestreo tiene N puntos igualmente espaciados ($N=4001$ en este caso) después de realizar la transformada de Fourier, la escala de tiempo debe especificarse

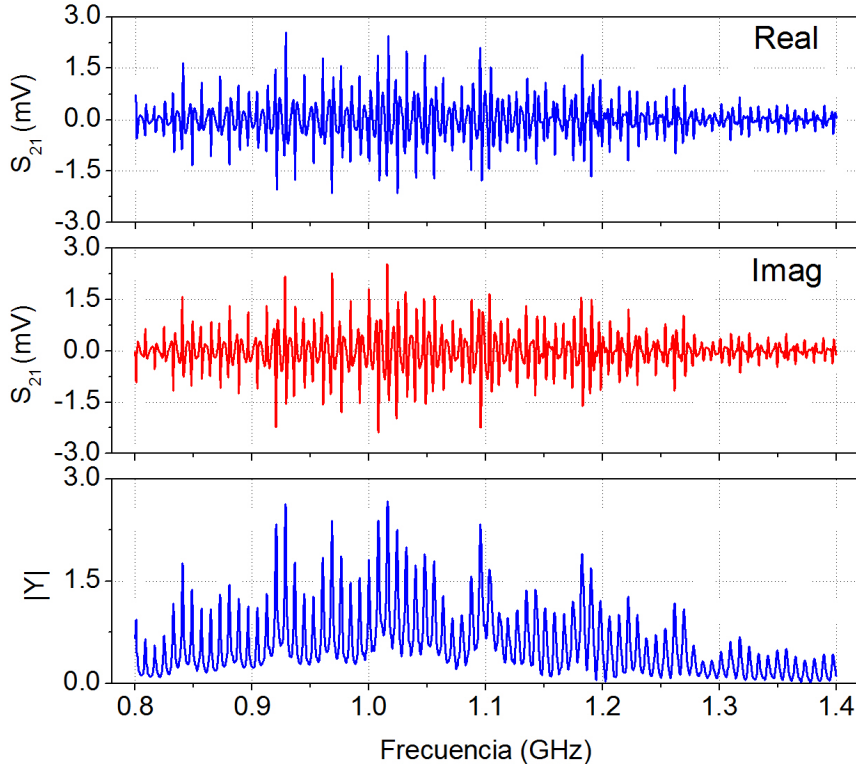


Figura 5.14: Parte real (línea azul) y parte imaginaria (línea roja) de la señal de transmisión que se obtiene para una monocapa fabricada aplicando 33.3 mA/cm^2 durante 40 minutos. Abajo: Magnitud de la señal. Estas mediciones se obtuvieron utilizando el arreglo experimental mostrado en la Fig. 5.12.

utilizando la ecuación de la frecuencia de Nyquist,

$$\Delta f = (N - 1)\delta f, \quad (5.19)$$

donde Δf es el intervalo de frecuencia. Además, $\delta t = 1/\Delta f$ es el periodo de muestreo y $\Delta T = (N - 1)\delta t$ es el intervalo total de tiempo. Por ejemplo, si la frecuencia de Nyquist es $\Delta f = 0.6 \text{ GHz}$ y $N = 4001$, se obtiene una frecuencia de muestreo $\delta f = 0.15 \text{ MHz}$. Para el mismo intervalo de frecuencias el periodo de muestreo será $\delta t = 1.67 \text{ ns}$ y $\Delta T = 6,665 \text{ ns}$. Estos parámetros determinan la resolución de la señal en la escala temporal.

El nuevo conjunto de datos está representado por la suma de los números complejos y_n dada por,

$$y_n = \frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1} Y_k e^{\frac{i2\pi}{N} kn}, \quad (5.20)$$

donde $n=0, \dots, (N - 1)$ para N números complejos y_0, \dots, y_{N-1} , que corresponde a la transformada de Fourier inversa (IFFT). El conjunto de números complejos y_n se puede escribir de manera similar al conjunto de los números complejos Y_k , por la ecuación $y_n = a' + ib'$ o $y_n = \rho' e^{i\phi'}$, donde la amplitud $\rho' = \sqrt{a'^2 + b'^2}$ está en el dominio del tiempo, al igual que la fase ϕ' . La amplitud ρ' es análoga a la magnitud de la señal en el dominio de tiempo. En la Fig. 5.15 se muestra la magnitud de la señal en función del tiempo para la muestra medida en la Fig. 5.14. El eje y corresponde a $abs(y_n) = |y_n| = \rho'$.

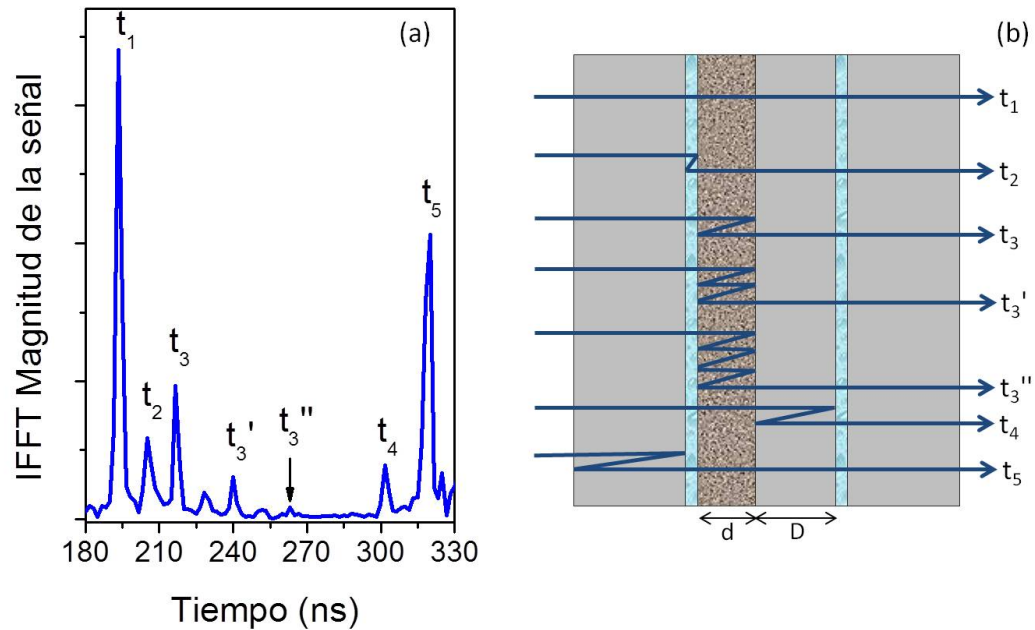


Figura 5.15: (a) Amplitud de la señal transmitida en el dominio del tiempo, los tiempos t_1 , t_2 , t_3 , t_3' , t_3'' , t_4 y t_5 corresponden a las trayectorias representadas esquemáticamente en (b).

Cada pico que aparece en el espectro temporal corresponde a las múltiples reflexiones dentro del sistema que se está midiendo (Fig. 5.15(b)), por lo que, mediante la identificación del origen de cada uno de los picos y calculando la diferencia de tiempo entre dos picos consecutivos con el mismo origen, se puede encontrar la velocidad de la onda longitudinal a través de cada capa. El primero y más intenso de los picos corresponde al tiempo que le toma a la señal transmitirse directamente a través del sistema, $t_1 \sim 190$ ns (Fig. 5.15(a)). Los picos posteriores se “retrasan” debido a una o más reflexiones (de ida y

vuelta) en las capas de líquido de acoplamiento, en la capa porosa, en el sustrato o en las capas de Si de los transductores. La Fig. 5.15(a) muestra los picos asociados a alguna de las capas de líquido de acoplamiento (t_2), a la capa porosa (t_3 , t'_3 y t''_3), al sustrato de Si (t_4) y a las capas de Si en los transductores (t_5). La Fig. 5.15(b) muestra los recorridos por la estructura de capas y se etiquetan los tiempos de llegada de las ondas después de llevar a cabo cada recorrido. Las alturas de los picos disminuyen de acuerdo con el número de reflexiones experimentadas en cada recorrido, la diferencia de impedancia acústica en cada interfaz reflejante y la dispersión y absorción acústica.

La velocidad de las ondas longitudinales a través de la capa porosa, v_L , se puede encontrar usando el “*tiempo de retardo*” Δt (o tiempo de ida y vuelta para una reflexión en una capa), a través de:

$$v_L = \frac{2d}{\Delta t} = \frac{2d}{t_3 - t_1} = \frac{4d}{t'_3 - t_1} = \frac{2d}{t''_3 - t_1}, \quad (5.21)$$

donde d es el espesor de la monocapa, medido por microscopía óptica. La porosidad de cada muestra fue determinada previamente utilizando mediciones ópticas y la aproximación de medio efectivo de Bruggeman (como se describió anteriormente), por lo que es posible calcular la velocidad longitudinal y escribirla como una función de la porosidad para las muestras fabricadas. De manera simultánea, se puede calcular la velocidad longitudinal en el sustrato de Si cristalino

$$v_{L0} = \frac{2D}{t_4 - t_1}, \quad (5.22)$$

donde D es el espesor del sustrato, también medido por microscopía óptica. El valor promedio encontrado para v_{L0} en las muestras fabricadas aquí es 8.44 ± 0.02 km/s. Este valor se grafica en la Fig. 5.16 con línea discontinua y corresponde al ajuste de los resultados encontrados en cada una de las muestras. El valor encontrado para v_{L0} está en buen acuerdo con los valores reportados para la velocidad de ondas longitudinales en la dirección [100] en silicio cristalino [147].

Los resultados para las capas porosas y para el sustrato de cada una de ellas, se muestran en la Tabla 5.1 y se grafican en la Fig. 5.16. La velocidad determinada con la ecuación (5.21) para las monocapas se grafica con cuadrados y la velocidad calculada a través de la ecuación (5.22) para el Si cristalino del sustrato, con círculos; en ambos casos se incluye la desviación estándar calculada para el conjunto de cinco mediciones hechas sobre cada muestra.

La velocidad acústica para las ondas longitudinales que se propagan en la dirección [100] en el SP fabricado aquí, para el que se han utilizado obleas de Si con dopaje alto y resistividad de $7\text{-}13\text{ m}\Omega \cdot \text{cm}$, se puede ajustar con la fórmula empírica dada en la ecuación (3.5), donde el valor del exponente k está relacionado con el grado de orden del medio poroso, como se describió en el capítulo 4. Los datos se ajustan bien utilizando $k=0.56\pm 0.02$, por lo que la dependencia de la velocidad longitudinal con la porosidad puede escribirse como:

$$v_L = 8.44(1 - p)^{0.56}. \quad (5.23)$$

Resultados similares se reportan en la Ref. [83] para obleas con resistividades dentro de este intervalo, por lo que nuestros resultados son consistentes.

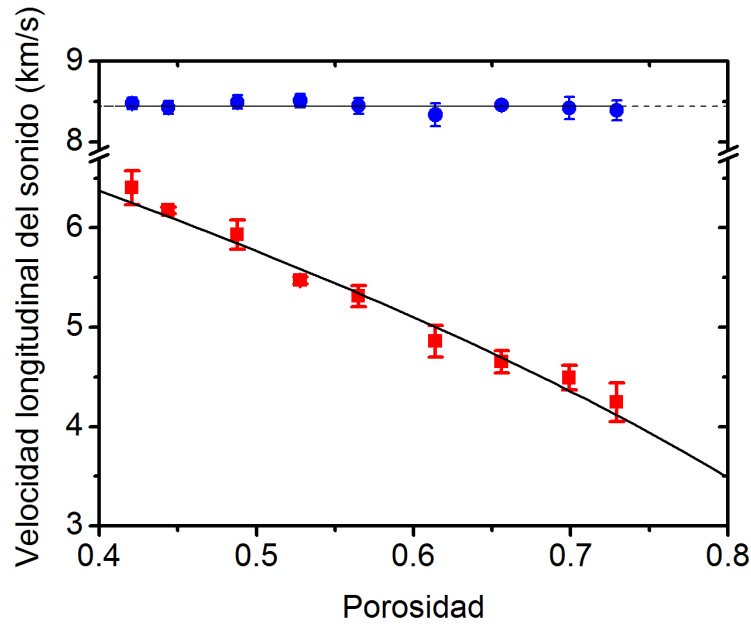


Figura 5.16: Dependencia de la velocidad longitudinal con la porosidad para SP $p++$ en la dirección cristalográfica [100]. Resultados experimentales para capas porosas (cuadrados rojos) y mejor ajuste encontrado (línea continua). Resultados experimentales para sustrato de Si cristalino (círculos azules) y valor promedio (línea a trazos).

5.6.2 Medición de la transmisión acústica en multicapas de silicio poroso

Las propiedades de transmisión de las multicapas de SP se miden utilizando la configuración experimental descrita antes y que se muestra en la Fig. 5.12. Las muestras de

Tabla 5.1: Propiedades de las muestras usadas para determinar la dependencia de la velocidad longitudinal del sonido con la porosidad. Los resultados se grafican en la Fig. 5.16.

Porosidad	Espesor (μm)	Velocidad longitudinal (km/s)	Velocidad del Si (en el sustrato) (km/s)
0.42	56.3	6.40 ± 0.17	8.48 ± 0.07
0.44	97.2	6.18 ± 0.03	8.43 ± 0.08
0.49	102.6	5.93 ± 0.15	8.50 ± 0.08
0.53	95.9	5.47 ± 0.04	8.51 ± 0.08
0.56	109.2	5.31 ± 0.11	8.45 ± 0.10
0.61	105.4	4.86 ± 0.16	8.34 ± 0.14
0.66	104.5	4.65 ± 0.11	8.46 ± 0.05
0.70	101.5	4.49 ± 0.12	8.42 ± 0.14
0.73	61.9	4.24 ± 0.20	8.39 ± 0.12

multicapas de SP se colocan entre los transductores y se registra la transmisión a través de cada muestra como función de la frecuencia. Para sistemas periódicos, se observa una serie de bandas prohibidas (del inglés *band – gaps*), por lo que en estas regiones actúan como espejos.

Del lado izquierdo de la Fig. 5.17 se muestra la transmisión acústica medida en *decibeles* (dB) para un sistema periódico (línea azul), así como la respuesta de los transductores acoplados con In-Ga y sin muestra (línea negra). A la derecha de la Fig. 5.17 se presenta, en línea continua, el espectro de la muestra normalizado a la respuesta de los transductores. Este espectro corresponde a un sistema con 10 periodos de capas alternadas *A-B* con espesores $d_A=0.90$ y $d_B=2.44 \mu\text{m}$, y con porosidades $p_A=43\%$ y $p_B=56\%$. La estructura fue diseñada para obtener la primera y segunda brechas centradas alrededor de 800 y 1600 MHz, respectivamente. En la figura de la derecha se etiquetan las dos primera brechas, para las cuales $m = 1$ y $m = 2$, respectivamente, según la ecuación (2.14). Los espesores y las porosidades de las capas individuales se eligen para obtener este resultado, por lo tanto, se espera obtener espesores y porosidades cercanas a las de diseño. El tiempo de ataque y la densidad de corriente que se aplica se eligen de acuerdo a las curvas de calibración del sistema, según la Fig. 4.2. Los espesores fueron medidos por SEM y las porosidades se encuentran ajustando tanto el espectro de reflectividad óptica como el de

transmisión acústica.

Las ecuaciones (2.13) y (2.14) muestran que un sistema periódico puede exhibir simultáneamente brechas ópticas y acústicas, por lo que su caracterización óptica sirve para deducir las porosidades de las capas individuales en estructuras de multicapas, como se discutió anteriormente. Sin embargo, es posible llevar a cabo una caracterización adicional de las multicapas comparando los datos de transmisión acústica experimentales con los calculados teóricamente. En la gráfica de la derecha de la Fig. 5.17 se presenta, en línea punteada, el espectro de transmisión acústica calculado con el MMT que se trató en el capítulo 1.

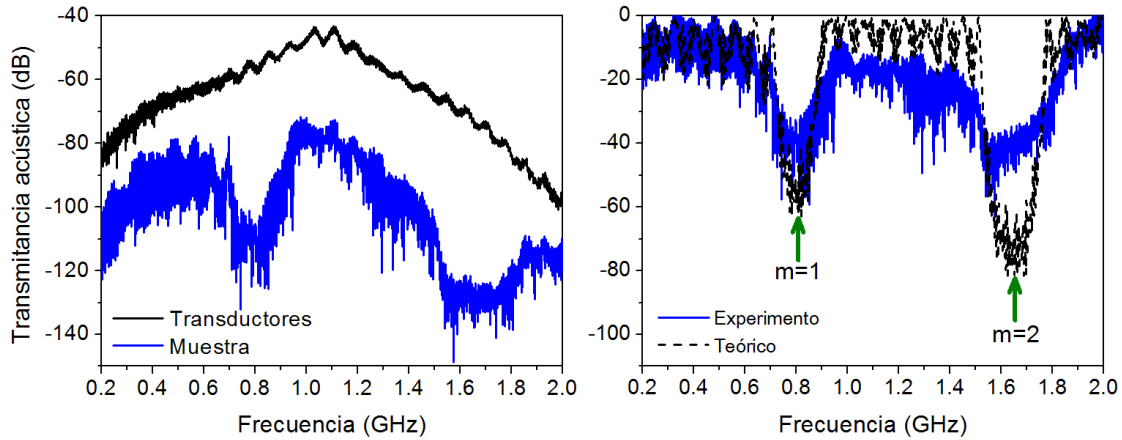


Figura 5.17: Izquierda: Medición de transmisión acústica en dB (sin normalizar) para una muestra periódica que presenta sus dos primeras brechas en la región de frecuencias medida. En línea negra se grafica la respuesta de los transductores acoplados con In-Ga, sin muestra entre ellos. Derecha: en línea continua, la transmisión acústica normalizada a la respuesta de los transductores; en línea a trazos, los resultados teóricos usando los datos que se especifican en el texto.

En la Fig. 5.18 se muestra el espectro de transmisión acústica para un sistema más grueso, formado por 18 periodos de capas alternadas de baja y alta porosidad. Los espesores de las capas son 2.0 y $1.7 \mu\text{m}$, con porosidades de 47% y 67% , respectivamente. El espesor total de la estructura es $\sim 67 \mu\text{m}$ y las brechas observadas en el espectro de transmisión en 0.72 y 1.44 GHz, corresponden a las brechas de primer y segundo orden, $m=1$ y $m=2$ en la ecuación (2.14), respectivamente. El banda prohibida fundamental muestra una atenuación muy importante, de ~ 40 dB y con un ancho de banda fraccional del 46% , sin embargo, la

profundidad medida para la banda prohibida fundamental es mucho menor que el valor del caso simulado, ~ -200 dB. Esto se debe a limitación experimental, ya que en la configuración utilizada el ruido de fondo tiene una amplitud de ~ 110 dB. Por lo tanto, se puede concluir que la banda prohibida tiene una profundidad de al menos 40 dB. Cabe señalar que la profundidad de la segunda brecha fue modelada con mayor precisión, lo que sugiere que en realidad la primera brecha acústico podría ser mucho más profunda. Un dispositivo con tales características, podría ser utilizado como un filtro de ondas acústicas para las regiones de frecuencia en donde aparecen las bandas prohibidas.

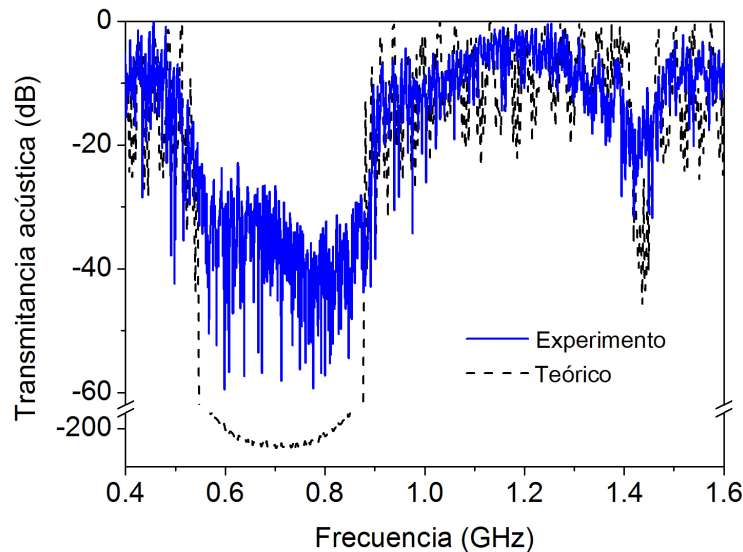


Figura 5.18: Línea continua: Transmisión acústica medida para una sistema periódico, en donde se observan las dos primeras bandas prohibidas. La línea a trazos corresponde a los resultados teóricos usando los datos que se dan en el texto.

La línea continua en la Fig. 5.19 corresponde al espectro de reflectividad óptica medido para la misma muestra de la Fig. 5.18, y la línea a trazos al espectro calculado utilizando los mismos valores de espesores y porosidades que en el caso acústico. Se observan las brechas ópticas correspondientes a $m=6$ (centrada en 2350 nm) hasta $m=14$ (centrada alrededor de 950 nm), según la ecuación (2.13).

Hasta aquí se ha presentado el método de fabricación óptimo y las técnicas de caracterización de estructuras de multicapas de SP. También se encontró la dependencia de la velocidad longitudinal del sonido con la porosidad de las capas. Al tener un alto con-

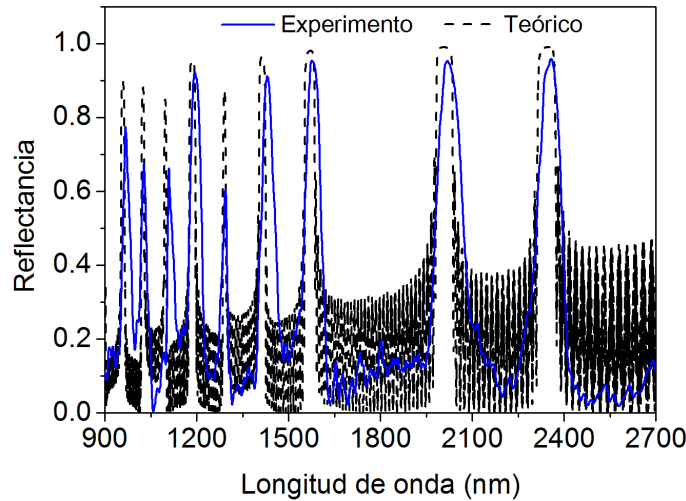


Figura 5.19: Línea continua: Reflectividad óptica medida para el sistema periódico descrito en el texto, en donde se observan las brechas ópticas de orden superior. La línea a trazos corresponde a los resultados teóricos utilizando el MMT para el caso óptico, con los mismos espesores y porosidades que los usados en el caso acústico.

trol sobre los parámetros de fabricación, se obtuvieron estructuras con respuestas acústicas específicas, lo cual es fundamental para fabricar estructuras con distintos perfiles de porosidad, como las que se proponen para observar las EWSA y las OBA, el objetivo principal de este trabajo de tesis. Los resultados teóricos y experimentales sobre las EWSA y OBA se presentan en el siguiente capítulo.

Capítulo 6

Resultados teóricos y experimentales: EWS y OB acústicas

6.1 Escaleras de Wannier-Stark: Caso I

Como se discutió en el Capítulo 4, se han utilizado diferentes formas para conseguir doblar las bandas de energía y obtener una analogía con el potencial periódico electrónico en un cristal sujeto a un campo eléctrico externo. Aquí se consideran dos casos para alcanzar este objetivo, ambos consisten en estructuras periódicas a las que se les introducen gradientes lineales en las propiedades elásticas de las capas, sin modificar los espesores originales de la estructura periódica.

Para el primer caso considerado aquí, que permite obtener EWS en el espectro de transmisión acústica y OBA en el dominio del tiempo, se diseñaron y fabricaron tres sistemas (A, B y C) con diferentes pendientes en el gradiente lineal del parámetro $\eta(z)$, equivalente a la constante dieléctrica. En el caso acústico $\eta(z) = C^2/v_L(z)^2$, donde $v_L(z)$ es la velocidad longitudinal del sonido en la dirección z , que es la dirección de crecimiento de las capas, y C es una constante con las mismas unidades, la velocidad longitudinal del sonido en el medio de incidencia, ZnO en este caso [55]. Las tres muestras fabricadas, se obtienen alternando capas a y b con diferente porosidad. El número de períodos considerado debe ser lo suficientemente grande como para obtener brechas acústicas bien definidas. En

las tres muestras, la capa b tiene una porosidad constante de 73% y un espesor $d_b=1.01 \mu\text{m}$; mientras que para la capa a , con un espesor $d_a=4.62 \mu\text{m}$ en las tres muestras, la porosidad varía gradualmente a lo largo de la dirección de crecimiento. El gradiente lineal que se introduce en la capa a corresponde a una variación en las porosidades del 43% al 55% para la muestra A, del 43% al 60% para la muestra B, y del 43% al 65% para la muestra C. Las porosidades y espesores de las capas se eligieron para obtener la primera banda prohibida acústica dentro del ancho de banda de la respuesta de los transductores, es decir, entre 0.5 y 1.8 GHz. En la Fig. 6.1 se muestra una representación esquemática del parámetro $\eta(z)$ como una función de la profundidad en las estructuras A, B y C.

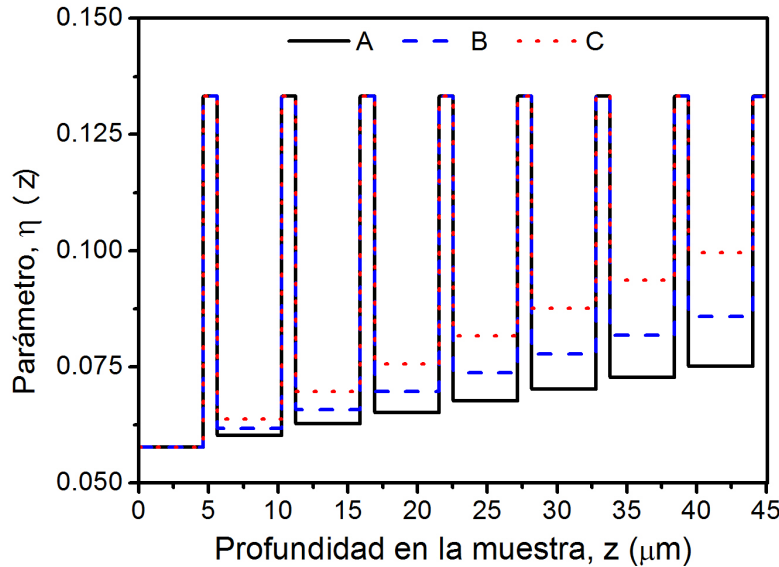


Figura 6.1: Perfil de parámetro $\eta(z)$ como una función de la profundidad en las estructuras: A (línea continua), B (línea a trazos) y C (línea punteada).

Se introdujeron pausas de corriente durante el ataque electroquímico, para evitar los cambios de concentración de HF en el electrolito y obtener los espesores y porosidades de diseño, como se discutió en el capítulo 4 [129]. Debido a que las muestras son gruesas y con un gran contraste de porosidad entre las capas, el número y duración de las pausas de corriente son muy importantes para obtener estructuras homogéneas. Para fabricar estas muestras se utilizaron pausas de 6 s y relaciones de (tiempo de ataque)/(duración de la pausa) de 2, en capas de baja porosidad, y de 14 en capas de alta porosidad.

La transmisión acústica y la distribución de la intensidad del campo se calculan mediante el MMT descrito antes, incluyendo el efecto de la muestra (SP-Sustrato de Si), los transductores (pilas de Si cristalino de $\sim 520 \mu\text{m}$) y la capa de líquido para acoplar los transductores a la muestra ($\sim 6 \mu\text{m}$); para estas mediciones se utilizó una mezcla eutéctica de In-Ga como líquido de acoplamiento. En la Fig. 6.2 se muestran los espectros teóricos de transmisión acústica para las muestras consideradas aquí. El gradiente lineal impuesto sobre el parámetro $\eta(z)$ en cada estructura, resulta en un conjunto de niveles de frecuencia localizados, es decir, la EWSA esperada. Estos niveles se observan claramente en las Figs. 6.2(a)-(c). En las Figs. 6.2(d)-(f), se muestra la distribución del campo de desplazamiento en función de la posición dentro de la muestra y la frecuencia de las ondas acústicas que inciden desde la izquierda sobre la superficie de las estructuras. Las líneas horizontales, brillantes y estrechas, corresponden a intensidades de campo acústico más grandes y son los modos acústicos correspondientes a la EWSA. Puede notarse que el doblamiento o inclinación de las bandas da lugar a estos modos localizados, espacial y espectralmente. El espaciado entre los niveles, (Δf) , depende de la inclinación de la estructura de bandas. Para la muestra A, que tiene una inclinación menor, el espaciado entre los niveles obtenidos es $\Delta f \sim 43$ MHz, para la muestra B de ~ 46 MHz, y ~ 50 MHz para la estructura C.

Las EWS son la contraparte en el dominio espectral de las OB. Un sistema que tiene una secuencia discreta de niveles de frecuencia con una separación entre niveles Δf , es el equivalente acústico de las EWS electrónicas, y se espera que presente OBA con un período $\tau_B = 1/\Delta f$. En las Figs. 6.2(g)-(i) se muestra la transmisión resuelta en el tiempo $T(t)$, que corresponde a la evolución temporal de un pulso gaussiano (Ec. (2.10)) en cada una de las muestras, calculada usando la ecuación (2.12). Se utilizaron valores de 1.197, 1.157 y 1.113 GHz para la frecuencia central del pulso gaussiano f_0 , para las estructuras A, B y C, respectivamente. Estos valores corresponden a las frecuencias en las que aparecen las EWSA y para todas las estructuras se utilizó $\sigma = 200$ MHz. En las Figs. 6.2(g)-(i), se puede ver claramente el comportamiento oscilatorio de los espectros de transmisión. La transmisión oscila en el tiempo con periodo constante τ_B : el periodo de las OBA. De estas figuras se observa que para la estructura A $\tau_B \sim 23.5$ ns, para la estructura B ~ 21.7 ns y ~ 19.9 ns para la estructura C; los valores calculados para el periodo de oscilación a partir de la separación entre los niveles de las EWSA usando $\tau_B = 1/\Delta f$, son: 23.3, 21.7 y 20.0 ns, respectivamente. Como se espera, diferentes pendientes en el gradiente introducido resultan en diferentes períodos de las oscilaciones de Bloch.

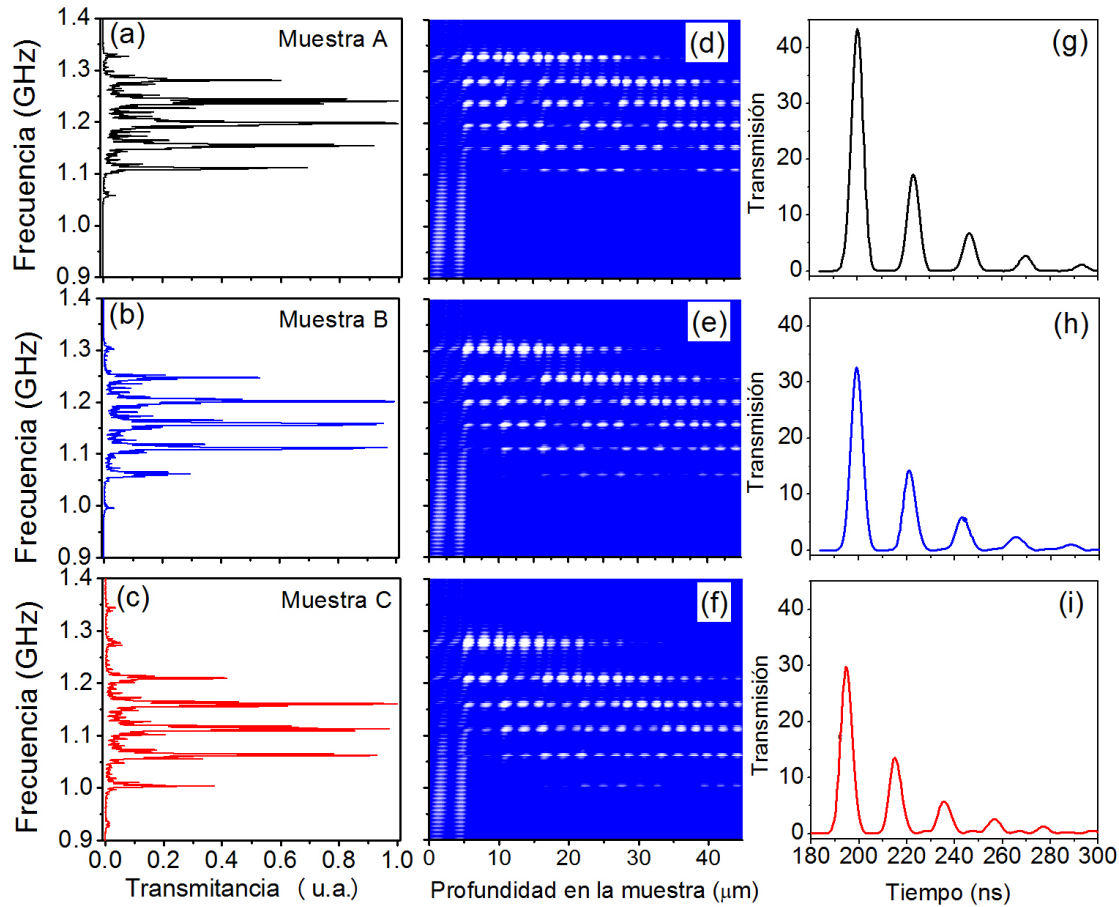


Figura 6.2: Cálculos teóricos utilizando el MMT para: (a)-(c) La transmisión acústica, (d)-(f) la distribución del campo de desplazamientos como función de la posición y la frecuencia, y (g)-(i) el espectro de transmisión resuelta en el tiempo, para las muestras *A*, *B* y *C*.

Las mediciones experimentales de la transmisión acústica, utilizando el montaje experimental descrito antes (ver Fig. 5.12), se muestran en la Fig. 6.3. Puede verse que las EWSA aparecen como modos localizados en los espectros de transmisión para las tres muestras. A pesar del pequeño corrimiento al azul, debido a pequeñas variaciones en la porosidades esperadas, hay un excelente acuerdo entre los cálculos teóricos (Figs. 6.2(a)-(c)) y los resultados experimentales.

Para investigar la presencia de OBA, se calculó la evolución temporal de un pulso gaussiano en cada muestra como se define en la ecuación (2.12), utilizando ahora las mediciones experimentales de $T(f)$. Este procedimiento permite obtener la transmisión resuelta

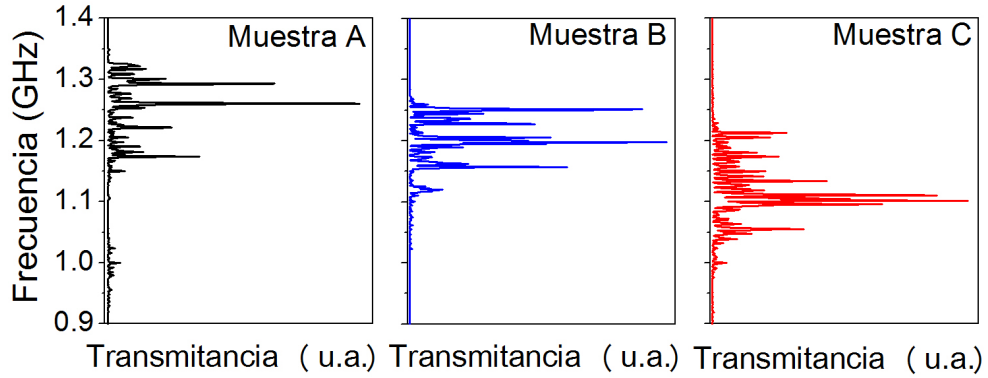


Figura 6.3: Espectros de la transmisión acústica $T(f)$ medida en cada una de las muestras: A, B y C, de izquierda a derecha.

en el tiempo, $T(t)$, a partir de los valores experimentales de $T(f)$, por lo que ésto se considera como una evidencia experimental de las OBA. En la Fig. 6.4 se presentan los espectros de transmisión en resolución temporal calculados para cada muestra. Pueden observarse claramente las oscilaciones de Bloch acústicas, pues el espectro de transmisión oscila en el tiempo con un período constante τ_B . Utilizando $\sigma=200$ MHz y f_0 de 1.260, 1.157 y 1.055 GHz, para las muestras A, B y C, respectivamente, se obtienen periodos de oscilación $\tau_B \sim 26.8$ ns para la muestra A, ~ 23.9 ns para la muestra B y ~ 19.1 ns para la muestra C, comparados con 23.5, 21.7 y 19.9 ns, que son los valores obtenidos a partir de los cálculos teóricos. Se observa claramente que el valor del periodo de oscilación, τ_B , disminuye cuando aumenta la inclinación o pendiente del gradiente aplicado, esto se debe a que la inclinación de las minibandas también se hace más pronunciada, dando lugar a EWS con mayor separación entre niveles, lo que se traduce en el dominio temporal en un periodo de oscilación menor.

Las muestras que se fabricaron en este caso, las cuales incluyen un gradiente lineal en el parámetro $\eta(z)$ que simula el efecto que tiene un campo eléctrico externo sobre un potencial periódico, permitieron calcular teóricamente y obtener evidencia experimental de las EWSA, además de que pudieron observarse las OBA en el espectro de transmisión resuelta en el tiempo. Al cambiar la pendiente del gradiente fue posible sintonizar el periodo de las OBA en estructuras de SP. Además, con la variación en el contraste de porosidades y

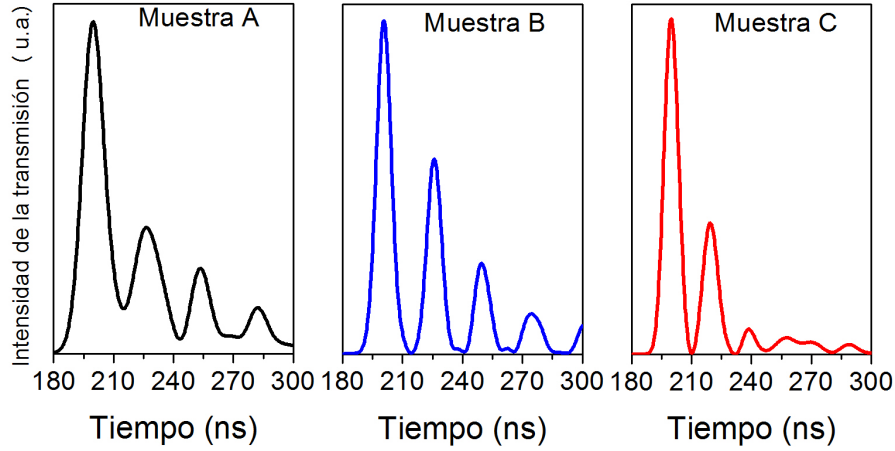


Figura 6.4: Espectros de la transmisión acústica resuelta en el tiempo calculada a partir de las mediciones experimentales utilizando un pulso gaussiano viajando a través de las muestras: A, B y C, de izquierda a derecha.

el espesor de las capas a y b se podría modificar la posición espectral de la EWSA en cada muestra, por lo que se puede concluir que este tipo de estructuras permiten tener control sobre las ondas acústicas, localizando modos en frecuencias alrededor de 1 GHz.

6.2 Escaleras de Wannier-Stark: Caso II

Puesto que el objetivo principal es observar las EWSA en sistemas que presenten una analogía mucho más estricta con el caso electrónico, se diseñaron estructuras que presentan perfiles con gradientes totalmente lineales en el parámetro $\eta(z)$, en analogía directa a lo que ocurre cuando se aplica un campo eléctrico al potencial periódico de un cristal, como se discute ampliamente en el capítulo 3. En la Fig. 6.5 se presenta el perfil de porosidades y del parámetro $\eta(z)$ en función de la posición (z) dentro de las muestras. El perfil en la figura de la izquierda corresponde al del sistema periódico formado por 8 periodos de capas alternadas de baja porosidad (capa A) y alta porosidad (capa B); la figura de la derecha corresponde al sistema cuando se ha introducido un gradiente lineal en el parámetro $\eta(z)$ de toda la estructura, es decir, se tiene una pendiente en todas las capas de la estructura (como en el caso electrónico). La introducción de este gradiente no modifica el espesor de las capas y el gradiente es uniforme a lo largo de la estructura, por lo tanto, se conservan

capas de baja y alta porosidad pero con una pendiente lineal en el potencial, estas capas o escalones inclinados, se etiquetarán con A'_i y B'_i , respectivamente, donde $i=1,2,\dots,8$.

Los espesores de las capas son: $d_A=d_{A'_i}=4.85 \mu\text{m}$ y $d_B=d_{B'_i}=4.40 \mu\text{m}$. Puesto que no es posible fabricar capas con una pendiente lineal continua, en cada capa, A y B en el caso periódico, y A'_i y B'_i en el caso con gradiente, se consideraron 100 “subcapas”, cada una con porosidad constante. La estructura periódica tiene porosidades $p_A=45\%$ y $p_B=70\%$, y un contraste $\eta_B - \eta_A$ en cada interfaz $A-B$ de 0.86. En la estructura con gradiente, la última subcapa de la capa B'_8 tiene una porosidad de 73%, sin embargo, el contraste $\eta_{B'_i} - \eta_{A'_i}$ entre la última subcapa de A'_i y la primera de B'_i se conserva igual a 0.86. El gradiente introducido corresponde a un gradiente lineal en el parámetro $\eta(z)$ del 12% en las capas A'_i y del 23% en las capas B'_i .

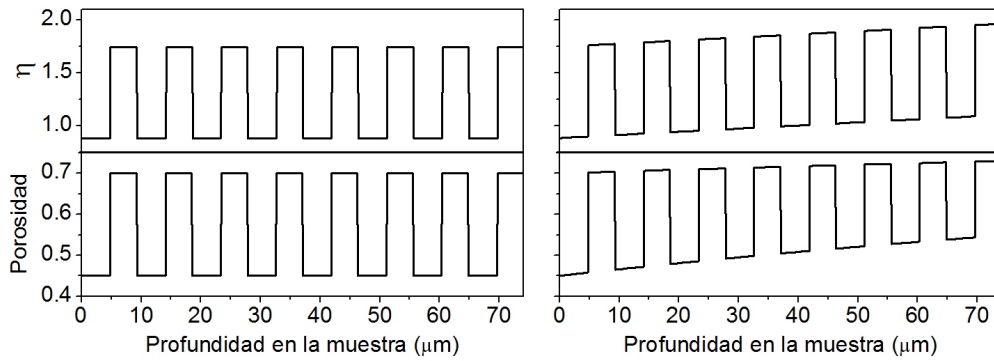


Figura 6.5: Perfiles del parámetro $\eta(z)$ y la porosidad, como función de la profundidad en la muestra, para el caso periódico (izquierda) y para el caso con gradiente (derecha).

El espectro de transmisión acústica y la distribución del campo de desplazamientos como función de la posición y la frecuencia calculados por el MMT, para la estructura periódica se presenta en la parte superior de la Fig. 6.6 y para la estructura con el gradiente en el potencial, en la parte inferior de la misma figura.

Por otra parte, como se mencionó, los detalles finos en el espectro de transmisión se deben a los modos acústicos provenientes de las pilas de Si de los transductores y del sustrato en la muestra. Con el propósito de mostrar el efecto que tienen las capas de Si adicionales en el arreglo experimental y que se consideran en los cálculos teóricos, en la Fig. 6.7 se muestran los espectros de transmisión acústica calculados para los dos casos: el caso periódico a la izquierda, y el caso con gradiente a la derecha. Los espectros en la parte

superior corresponden a los resultados para el sistema completo: Si-Líquido-SP-Sustrato-Líquido-Si, en los espectros en la parte central de la Fig. 6.7 no se han considerado las pilas de Si de los transductores, por lo que el sistema se reduce a: SP-Sustrato; y finalmente para los espectros en la parte inferior sólo se han considerado las capas de SP, es decir, no se incluye al sustrato ni a las pilas de Si en los transductores. Puede verse claramente que los detalles finos de los espectros, en el último caso, desaparecen cuando son eliminadas las capas de Si y el líquido de acoplamiento. En todas los cálculos teóricos que se presentan en este trabajo se considera el sistema completo, por lo que aparecen los modos acústicos correspondientes a las capas adicionales.

En la Fig. 6.6 se presentan los cálculos teóricos de la transmisión acústica y la distribución del campo de desplazamientos para las muestras cuyos perfiles de porosidad se encuentran graficados en la Fig. 6.5. El espectro de transmisión acústica de la estructura periódica (parte superior de la Fig. 6.6) se caracteriza, debido a la periodicidad, por la aparición de minibandas acústicas separadas por bandas prohibidas en las que no está permitida la propagación de ondas acústicas. En la región de frecuencias que se muestra se pueden observar tres de estas bandas prohibidas centradas alrededor de 0.80, 1.10 y 1.35 GHz. Cuando se introduce un gradiente lineal en el potencial periódico (η), las minibandas se inclinan. En la parte inferior de la Fig. 6.6 se presentan los cálculos teóricos de la transmisión acústica y la distribución del campo para la estructura en la que se ha introducido un gradiente lineal en $\eta(z)$. El efecto que tiene el gradiente introducido puede notarse en la distribución del campo (abajo a la izquierda de la Fig. 6.6). Las bandas prohibidas se han inclinado y como resultado aparecen modos acústicos localizados alrededor de 1.2 GHz, con una frecuencia de separación entre niveles $\Delta f \sim 27$ MHz, estos modos corresponden a los niveles de la EWSA. La localización espectral de los modos puede verse claramente en el espectro de transmisión, abajo y a la derecha de la figura 6.6.

Para demostrar teóricamente las OBA en el sistema con gradiente, se calculó la propagación temporal de un pulso gaussiano dentro de la estructura, utilizando la Ec. (2.11). Los resultados para $u(z, t)$ se muestran en la Fig. 6.8. En el cálculo se utilizó un pulso centrado a una frecuencia $f_0=1.15$ GHz y con un ancho $\sigma=200$ MHz, y puesto que se ha introducido el sistema completo, es decir, las pilas de Si en los transductores (de $520 \mu\text{m}$ de espesor) y la capa de acoplamiento de In-Ga (de $6 \mu\text{m}$), en el eje x la superficie de la muestra está en $526 \mu\text{m}$. Puede verse cómo el pulso oscila con un periodo constante $\tau_B \sim 37$ ns, el cual corresponde también al periodo calculado utilizando $\tau_B=1/\Delta f$.

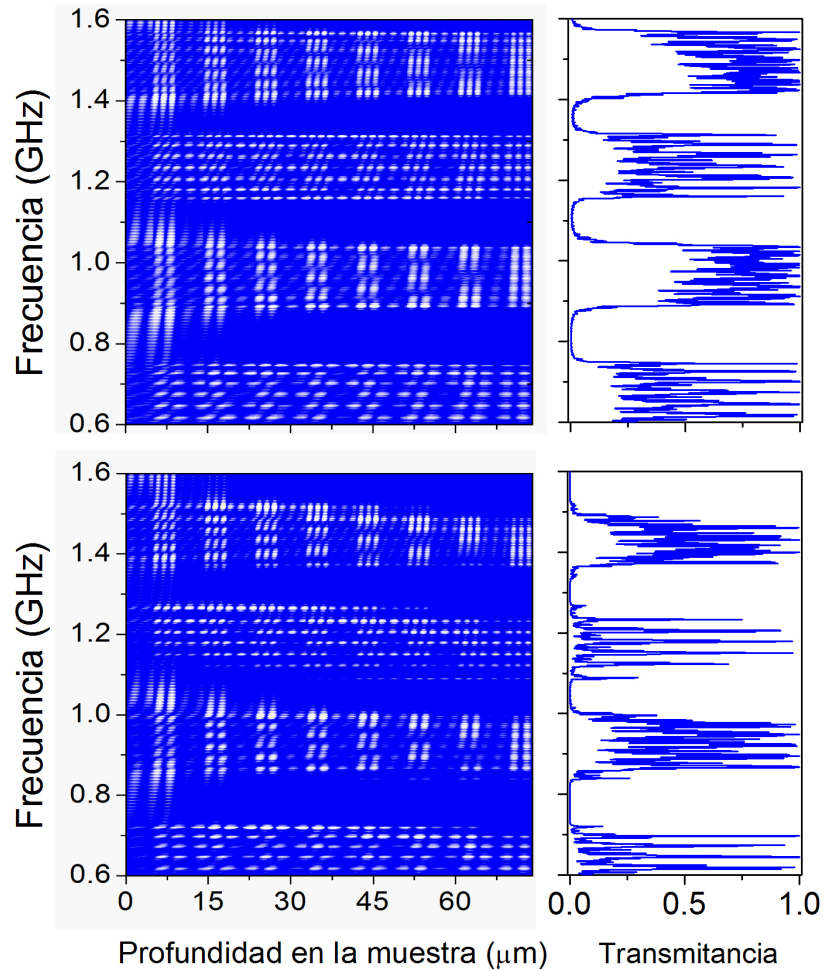


Figura 6.6: Cálculos teóricos de la transmisión acústica (a la derecha) y distribución del campo de desplazamientos como función de la posición y la frecuencia (a la izquierda), para la estructura periódica (arriba) y para la estructura con un perfil con un gradiente completamente lineal en el parámetro $\eta(z)$ (abajo).

Estas estructuras diseñadas teóricamente, fueron fabricadas siguiendo el procedimiento experimental investigado y optimizado durante el desarrollo de esta tesis. Ambas estructuras, la periódica y el caso con gradiente, se fabricaron utilizando pausas de corriente de 6s entre cada “subcapa”, de tal forma que la relación (tiempo de ataque)/(duración de la pausa) es de 2 en capas de baja porosidad, y de 15 en las capas de más alta porosidad. Las micrografías SEM de la Fig. 6.9 corresponden a la sección transversal de la muestra

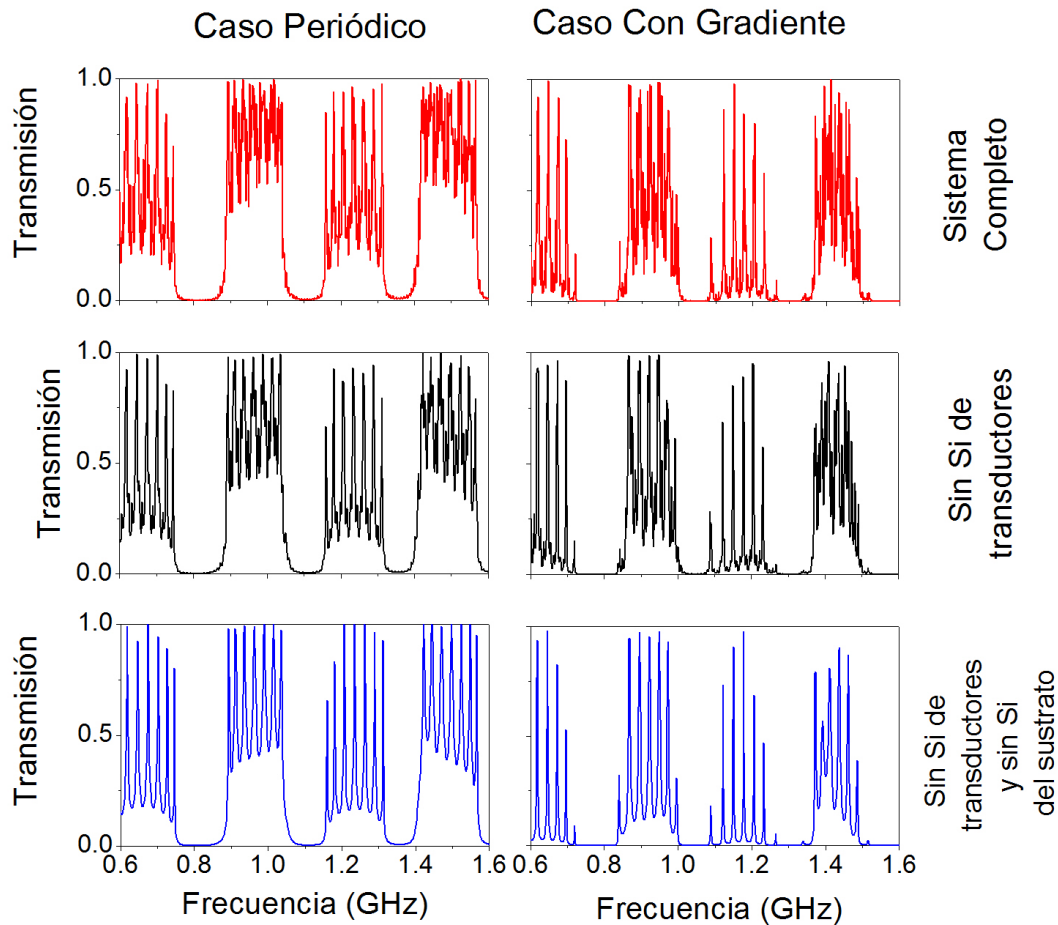


Figura 6.7: Cálculos teóricos de la transmisión acústica para la estructura periódica (a la izquierda) y para la estructura con un gradiente lineal (a la derecha), en los que han considerado tres casos: el sistema completo (arriba), sin el Si de los transductores (parte central) y las capas de SP únicamente, sin sustrato ni el Si de los transductores (abajo).

con gradiente. En la imagen de la izquierda pueden verse las 16 capas que constituyen la estructura, la superficie de la muestra se encuentra a la derecha y el sustrato a la izquierda de la imagen. En la imagen de la derecha se ha hecho un acercamiento para mostrar que el espesor de las capas se mantiene constante y que puede notarse la presencia de las subcapas como líneas delgadas en cada capa, sobre todo, en las capas de alta porosidad. Cabe mencionar que, debido a que las estructuras tienen espesores muy grandes y porosidades altas,

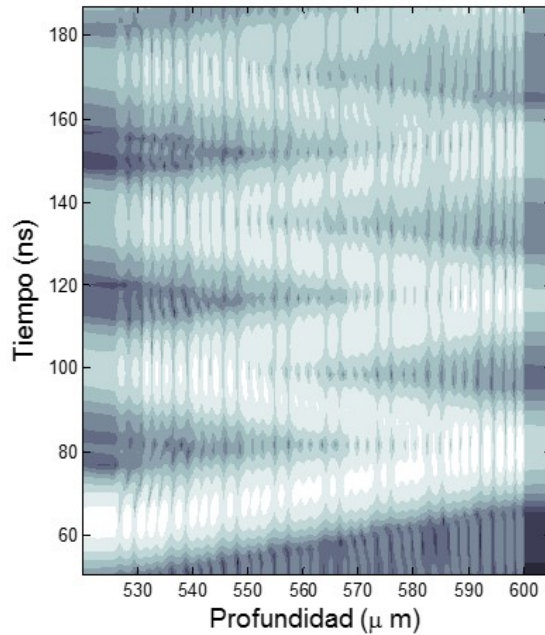


Figura 6.8: Evolución temporal de un pulso gaussiano calculada dentro de la estructura con gradiente lineal en el potencial periódico. Pueden verse claramente las OBA con un periodo de ~ 37 ns. El pulso está centrado a una frecuencia $f_0=1.15$ GHz y tiene un ancho $\sigma=200$ MHz.

en el momento de cortar las muestras para observar la sección transversal aparecen rupturas entre capas, lo que ha dificultado la obtención de estas imágenes. Los espectros de transmisión acústica medidos para ambas estructuras se muestran en la Fig. 6.10, a la izquierda para el caso periódico y a la derecha para la muestra con gradiente. En línea continua se muestran los resultados experimentales y en líneas punteadas los cálculos teóricos, con el objetivo de poner en evidencia el excelente acuerdo que hay entre las mediciones experimentales y los cálculos teóricos, no solo en la posición de las bandas prohibidas acústicas en el caso periódico, sino también en la posición y espaciamiento de los modos localizados, correspondientes a los niveles de la EWSA.

Ya que se tiene evidencia experimental de las EWSA, se utilizan los resultados experimentales $T(f)$ de la muestra con gradiente en la porosidad en la región de frecuencias entre 1.05 GHz y 1.25 GHz para calcular la transmisión resuelta en el tiempo $T(t)$. Los resultados se muestran en la Fig. 6.11(a). Pueden verse claramente las oscilaciones en el espectro de transmisión, correspondientes a las OBA esperadas. El periodo de estas oscilaciones es de ~ 37 ns, igual que el periodo proveniente de los cálculos teóricos. En la Fig. 6.11(b) se ha calculado $T(t)$ a partir del espectro teórico de la transmisión acústica, para hacer notar el excelente acuerdo entre ambos resultados, el teórico y el experimental.

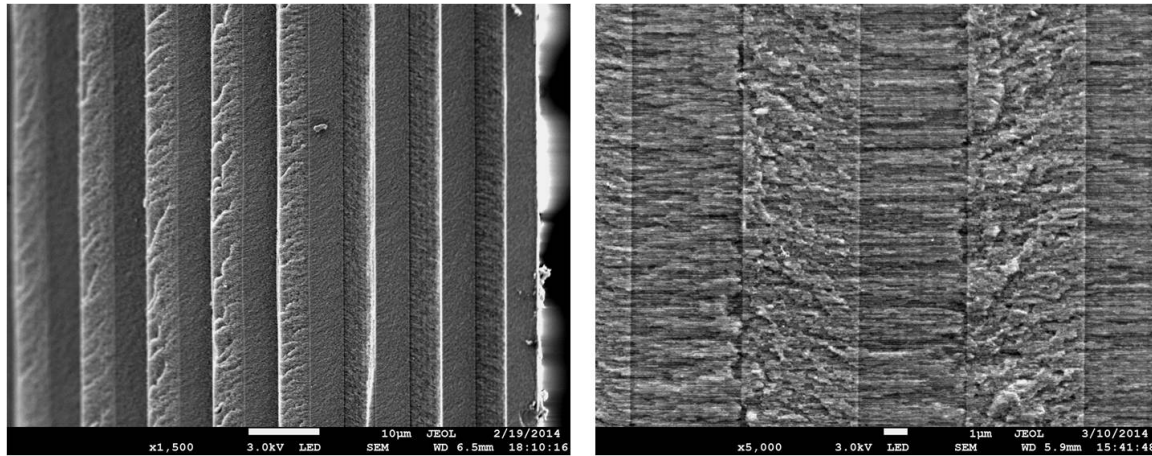


Figura 6.9: Micrografías SEM de la sección transversal de la muestra con gradiente, cuyo perfil de porosidad aparece en la parte derecha de la Fig. 6.5. La imagen de la izquierda corresponde a 1500x y la de la derecha a 5000x.

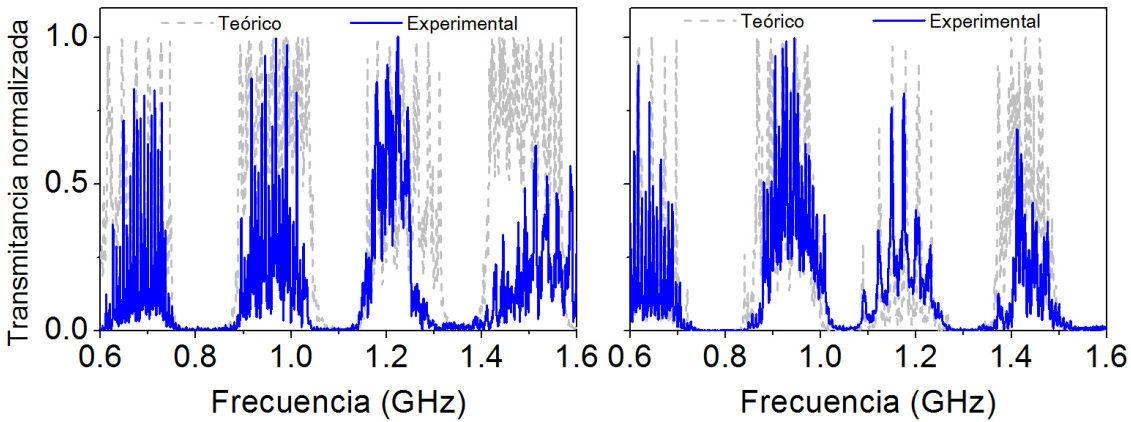


Figura 6.10: Espectros de la transmisión acústica medida para la estructura periódica (a la izquierda) y con gradiente (a la derecha). En líneas punteadas se muestran los espectros teóricos para fines comparativos.

El caso que se consideró en esta sección representa un análogo mucho más estricto del efecto que tiene un campo eléctrico externo sobre el potencial periódico de un cristal, y que hasta ahora no se había reportado. La introducción de este gradiente permitió encontrar teóricamente y obtener evidencia experimental de las EWSA y las OBA en frecuencias en el orden de GHz y periodos de oscilación en el orden de ns. La calidad de los resultados

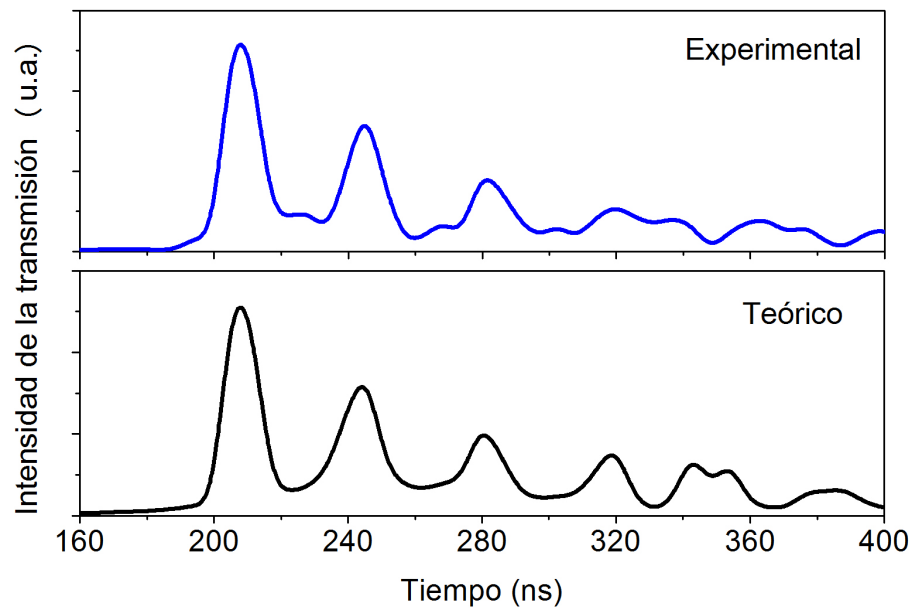


Figura 6.11: Transmisión resuelta en el tiempo calculada a partir de las mediciones experimentales de transmisión acústica (arriba) y la calculada a partir de los resultados teóricos (abajo), correspondientes a la muestra con gradiente en la porosidad, las cuales muestran las OBA con un periodo de ~ 37 ns.

experimentales que se muestran aquí, es consecuencia del alto nivel de control que se tiene sobre los parámetros de fabricación y la técnica de caracterización acústica implementada en el laboratorio.

Conclusiones

En los capítulos anteriores se presentaron los resultados de las investigaciones que se han llevado a cabo durante el desarrollo de este trabajo de tesis, sobre el diseño y la fabricación de estructuras de multicapas de SP para aplicaciones acústicas en la región ultrasónica con frecuencias en el orden de los GHz. Para esto, se fabricaron por anodización electroquímica de obleas de Si p^{++} , multicapas de SP con capas individuales homogéneas en espesor y porosidad a través de la introducción de pausas de corriente durante el ataque. Se llevó a cabo un estudio sistemático sobre el efecto de la introducción de estas pausas de corriente en monocapas y estructuras periódicas. Se encontraron los parámetros óptimos para obtener estructuras homogéneas, con respuestas ópticas y acústicas de acuerdo con los resultados teóricos esperados (calculados utilizando el MMT) para ambos casos: el electromagnético y el acústico. Para esta investigación fue necesario implementar un nuevo laboratorio en donde se llevó a cabo la caracterización acústica de las muestras de SP fabricadas. En este laboratorio se realizaron las mediciones de transmisión acústica utilizando un par de transductores piezoeléctricos cuya respuesta está centrada alrededor de 1 GHz. Se determinó la dependencia de la velocidad longitudinal del sonido con la porosidad en monocapas con espesores entre 50 y 100 μm , de porosidades entre 42 y 73%, a través de mediciones de transmisión acústica y el análisis de la respuesta en el dominio temporal, encontrando valores de 8.44 km/s y 0.56 para la velocidad longitudinal del sonido en el Si cristalino y para el parámetro de ajuste k , respectivamente. Haciendo uso de estos resultados fueron diseñadas y fabricadas diferentes estructuras periódicas con brechas acústicas alrededor de 1 GHz.

Observar el fenómeno de las EWSA y las OBA, objetivo principal de esta tesis, fué demostrado en dos tipos de estructuras. En el primer caso, se consideró un gradiente lineal en el parámetro $\eta(z)$ de una de las capas que forma la estructura. La introducción

del gradiente permitió encontrar teóricamente las EWSA y observarlas en los espectros de transmisión experimentales, así como obtener evidencia teórica y experimental de las OBA en el espectro de transmisión resuelto en el tiempo. También fue posible sintonizar el período de las OBA cambiando la pendiente del gradiente introducido, como sucede en los casos electrónico y electromagnético. En el segundo caso, y con el objetivo de observar las EWSA en un sistema que presenta una analogía mucho más estricta con el caso electrónico, se diseñó y fabricó una estructura con un perfil cuyo gradiente es totalmente lineal en el parámetro $\eta(z)$, en analogía directa a lo que ocurre cuando se aplica un campo eléctrico al potencial periódico de un cristal y que hasta ahora no se había considerado. Se observó teórica y experimentalmente la formación de las EWSA, con lo que se obtuvo evidencia de las OBA en los espectros de transmisión resuelta en el tiempo en frecuencias alrededor de 1 GHz y con periodos de oscilación de ns.

La calidad de los resultados experimentales y su excelente acuerdo con los cálculos teóricos que se han mostrado en esta tesis, es consecuencia del alto nivel de control que se tiene sobre los parámetros de fabricación de multicapas de SP con capas individuales gruesas del orden de micras, así como de la experiencia que se ha alcanzado en la técnica de caracterización acústica implementada en el laboratorio.

Con este tipo de estructuras es posible tener control en la propagación de ondas acústicas con frecuencias en el orden de GHz, ya que la variación en el contraste de porosidades y el espesor de las capas individuales permite modificar la posición espectral de la EWSA en cada muestra, mientras que la pendiente en el gradiente introducido, permite sintonizar el periodo de las OBA, por lo que podrían utilizarse en nuevos dispositivos capaces de modular la propagación de ondas acústicas en estas frecuencias.

Apéndice A

Elementos de matriz

Para el caso general de incidencia oblicua, la matriz $[\mathbf{D}]$ definida en la ecuación (1.17) para la j -ésima capa, está dada por:

$$[\mathbf{D}] = \begin{bmatrix} k_x e^{i\Omega_L z} & k_x e^{-i\Omega_L z} & \Omega_T e^{i\Omega_T z} & -\Omega_T e^{-i\Omega_T z} \\ \Omega_L e^{i\Omega_L z} & -\Omega_L e^{-i\Omega_L z} & -k_x e^{i\Omega_T z} & -k_x e^{-i\Omega_T z} \\ i\rho C e^{i\Omega_L z} & i\rho C e^{-i\Omega_L z} & -2i\rho k_x v_T^2 \Omega_T e^{i\Omega_T z} & 2i\rho k_x v_T^2 \Omega_T e^{-i\Omega_T z} \\ 2i\rho k_x v_T^2 \Omega_L e^{i\Omega_L z} & -2i\rho k_x v_T^2 \Omega_L e^{-i\Omega_L z} & i\rho C e^{i\Omega_T z} & i\rho C e^{-i\Omega_T z} \end{bmatrix} \quad (\text{A.1})$$

donde,

$$\begin{aligned} \Omega_L &= (\omega^2/v_L^2 - k_x^2)^{1/2}, \\ \Omega_T &= (\omega^2/v_T^2 - k_x^2)^{1/2}, \\ &\text{y} \\ C &= \omega^2 - 2v_T^2 k_x^2. \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

Los elementos de la matriz $[\mathbf{L}]$, la cual fue definida en la ecuación (1.20), son:

$$\begin{aligned} L_{11} &= L_{44} = \frac{v_T^2 k_x^2}{\omega^2} (e^{i\Omega_L z} + e^{-i\Omega_L z}) + \frac{C}{2\omega^2} (e^{i\Omega_T z} + e^{-i\Omega_T z}), \\ L_{12} &= L_{34} = \frac{k_x C}{2\omega^2 \Omega_L} (e^{i\Omega_L z} - e^{-i\Omega_L z}) + \frac{k_x^2 v_T^2 \Omega_T}{\omega^2} (-e^{i\Omega_T z} + e^{-i\Omega_T z}), \\ L_{13} &= L_{24} = \frac{k_x}{2i\omega^2 \rho} (e^{i\Omega_L z} + e^{-i\Omega_L z} - e^{i\Omega_T z} - e^{-i\Omega_T z}), \\ L_{14} &= \frac{k_x^2}{2i\omega^2 \rho \Omega_L} (e^{i\Omega_L z} - e^{-i\Omega_L z}) + \frac{\Omega_T}{2i\omega^2 \rho} (e^{i\Omega_T z} - e^{-i\Omega_T z}), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
L_{21} = L_{43} &= \frac{\Omega_L v_T^2 k_x^2}{\omega^2} (e^{i\Omega_L z} - e^{-i\Omega_L z}) + \frac{C k_x}{2\omega^2 \Omega_T} (-e^{i\Omega_T z} + e^{-i\Omega_T z}), \\
L_{22} = L_{33} &= \frac{C}{2\omega^2} (e^{i\Omega_L z} + e^{-i\Omega_L z}) + \frac{v_T^2 k_x^2}{\omega^2} (e^{i\Omega_T z} + e^{-i\Omega_T z}), \\
L_{23} &= \frac{\Omega_L}{2i\omega^2 \rho} (e^{i\Omega_L z} - e^{-i\Omega_L z}) + \frac{k_x^2}{2i\omega^2 \rho \Omega_T} (e^{i\Omega_T z} - e^{-i\Omega_T z}), \\
L_{31} = L_{42} &= \frac{i\rho C v_T^2 k_x}{\omega^2} (e^{i\Omega_L z} + e^{-i\Omega_L z} - e^{i\Omega_T z} - e^{-i\Omega_T z}), \\
L_{32} &= \frac{i\rho C^2}{2\omega^2 \Omega_L} (e^{i\Omega_L z} - e^{-i\Omega_L z}) + \frac{2i\rho v_T^4 k_x^2 \Omega_T}{\omega^2} (e^{i\Omega_T z} - e^{-i\Omega_T z}), \\
L_{41} &= \frac{2i\rho v_T^4 k_x^2 \Omega_L}{\omega^2} (e^{i\Omega_L z} - e^{-i\Omega_L z}) + \frac{i\rho C^2}{2\omega^2 \Omega_T} (e^{i\Omega_T z} - e^{-i\Omega_T z}).
\end{aligned} \tag{A.3}$$

Para el caso de incidencia normal, las matrices $[\mathbf{D}]$ y $[\mathbf{L}]$ se reducen a matrices de 2×2 , y están dadas por,

$$[\mathbf{D}] = \begin{bmatrix} \Omega_L e^{i\Omega_L z} b & -\Omega_L e^{-i\Omega_L z} \\ i\rho\omega^2 e^{i\Omega_L z} & i\rho\omega^2 e^{-i\Omega_L z} \end{bmatrix}, \tag{A.4}$$

$$[\mathbf{L}] = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} (e^{i\Omega_L z} + e^{-i\Omega_L z}) & \frac{\Omega_L}{2i\omega^2 \rho} (e^{i\Omega_L z} - e^{-i\Omega_L z}) \\ \frac{i\rho}{2\Omega_L} (e^{i\Omega_L z} - e^{-i\Omega_L z}) & \frac{1}{2} (e^{i\Omega_L z} + e^{-i\Omega_L z}) \end{bmatrix}. \tag{A.5}$$

Apéndice B

Método de la matriz global

En 1964, Knopoff [19] publicó una formulación diferente para sistemas de multicapas que provee una alternativa al MMT, el cual evita el problema fd . Este método es robusto y puede utilizarse la misma matriz para todas las categorías de solución; es decir, si la componente del vector de onda k_z es real o complejo, o si el medio de incidencia y transmisión es sólido o el vacío. La desventaja de este método es que la matriz puede ser muy grande, haciendo que el método de solución sea relativamente lento, comparado con el tiempo de cálculo usando el MMT.

La propuesta del método de la matriz global (MMG), consiste en ensamblar una sola matriz que representa al sistema completo. La matriz del sistema consta de $4(n + 1)$ ecuaciones, donde n es el número total de capas. Las ecuaciones (en grupos de cuatro) están basadas en las condiciones de frontera en cada interfaz. Por lo tanto, no se hace ninguna suposición acerca de la interdependencia entre los grupos de ecuaciones de cada interfaz. La matriz se soluciona se forma completa, abordando todas las ecuaciones simultáneamente. Esto no significa que todas las interfaces sean independientes, dado que las ecuaciones en una interfaz son influenciadas por las ondas provenientes de las interfaces vecinas. Sin embargo, como el producto frecuencia-espesor aumenta, la influencia de una onda no-homogénea sobre los desplazamientos y esfuerzos en la siguiente interfaz simplemente se reduce. El grado de influencia está determinado por los términos exponenciales en la matriz global. Estos términos son siempre funciones decrecientes para ondas no homogéneas, por lo que en el límite cuando fd tiende a infinito desaparecen, de modo que una onda no homogénea que viaja por una interfaz no tiene influencia sobre las ondas de la siguiente interfaz, es decir, las capas se comportan como espacios semi-infinitos. Por lo tanto, el método permanece

perfectamente estable para cualquier valor del producto frecuencia-espesor debido a que no depende del acoplamiento de ondas no-homogéneas de una interfaz a otra.

Los desplazamientos y esfuerzos de la interfaz a la derecha de la j -ésima capa pueden escribirse como una función de las amplitudes de las ondas, al igual que para la interfaz a la izquierda de la capa $j + 1$. Utilizando la Ec. (1.17) se tiene:

$$\begin{Bmatrix} u_x \\ u_z \\ \sigma_{zz} \\ \sigma_{xz} \end{Bmatrix}_{j+1,I} = [\mathbf{D}]_{j+1,I} \begin{Bmatrix} A_L^+ \\ A_L^- \\ A_T^+ \\ A_T^- \end{Bmatrix}_{j+1} \quad \text{y} \quad \begin{Bmatrix} u_x \\ u_z \\ \sigma_{zz} \\ \sigma_{xz} \end{Bmatrix}_{j,D} = [\mathbf{D}]_{j,D} \begin{Bmatrix} A_L^+ \\ A_L^- \\ A_T^+ \\ A_T^- \end{Bmatrix}_j. \quad (\text{B.1})$$

Debido a que deben cumplirse las condiciones de contorno que establecen la continuidad de los desplazamientos y esfuerzos, las expresiones en la Ec. (B.1) deben ser iguales, es decir:

$$[\mathbf{D}]_{j,D} \begin{Bmatrix} A_L^+ \\ A_L^- \\ A_T^+ \\ A_T^- \end{Bmatrix}_j = [\mathbf{D}]_{j+1,I} \begin{Bmatrix} A_L^+ \\ A_L^- \\ A_T^+ \\ A_T^- \end{Bmatrix}_{j+1}. \quad (\text{B.2})$$

Esto puede expresarse en una sola matriz,

$$[[\mathbf{D}]_{j,D} \quad [-\mathbf{D}]_{j+1,I}] \begin{Bmatrix} A_{L,j}^+ \\ A_{L,j}^- \\ A_{T,j}^+ \\ A_{T,j}^- \\ A_{L,j+1}^+ \\ A_{L,j+1}^- \\ A_{T,j+1}^+ \\ A_{T,j+1}^- \end{Bmatrix} = 0. \quad (\text{B.3})$$

Esta ecuación describe la interacción de las ondas en la interfaz entre las capas j y $j + 1$. Para la matriz $[\mathbf{D}]$ definida en la Ec. (1.17), se ha considerado el origen de todas las ondas a la izquierda de la capa. Aquí se va a considerar que las ondas viajando de izquierda a derecha tienen su origen a la izquierda de la capa, mientras que las ondas viajando de derecha a izquierda tienen su origen a la derecha de la capa, por lo que existe una matriz para el lado izquierdo $[\mathbf{D}_{j,I}]$ y otra para el lado derecho de la capa $[\mathbf{D}_{j,D}]$. Una ecuación

y

$$[\mathbf{R}] = \begin{bmatrix} [-\mathbf{D}_0^+] & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & [\mathbf{D}_{n+1}^-] \end{bmatrix}. \quad (\text{B.7})$$

Los superíndices + y - denotan las partes de las matrices o vectores que corresponden a las ondas + y -, respectivamente, y las particiones correspondientes son:

$$\{A^+\} = \begin{Bmatrix} \{A_L^+\} \\ \{A_T^+\} \end{Bmatrix}, \quad \{A^-\} = \begin{Bmatrix} \{A_L^-\} \\ \{A_T^-\} \end{Bmatrix},$$

$$[\mathbf{D}^+] = \begin{bmatrix} D_{11} & D_{13} \\ D_{21} & D_{23} \\ D_{31} & D_{33} \\ D_{41} & D_{43} \end{bmatrix}, \quad [\mathbf{D}^-] = \begin{bmatrix} D_{12} & D_{14} \\ D_{22} & D_{24} \\ D_{32} & D_{34} \\ D_{42} & D_{44} \end{bmatrix}. \quad (\text{B.8})$$

La matriz del sistema $[\mathbf{G}]$ en la Ec. (B.5) y la matriz del lado derecho $[\mathbf{R}]$, son matrices cuadradas de tamaño $4(n+1)$. Si las amplitudes de las ondas que entran al sistema se conocen, entonces el lado derecho de la ecuación puede evaluarse inmediatamente, resultando en un vector de coeficientes conocidos:

$$\begin{Bmatrix} \{A_0^-\} \\ \{A_1\} \\ \{A_2\} \\ \vdots \\ \{A_j\} \\ \vdots \\ \{A_n\} \\ \{A_{n+1}^+\} \end{Bmatrix} = [\mathbf{G}]^{-1}[\mathbf{R}] \begin{Bmatrix} \{A_0^+\} \\ \{0\} \\ \{0\} \\ \vdots \\ \{0\} \\ \vdots \\ \{0\} \\ \{A_{n+1}^-\} \end{Bmatrix}. \quad (\text{B.9})$$

Los coeficientes de reflexión y transmisión pueden calcularse fácilmente de esta ecuación de la misma forma que en el método de la Matriz de Transferencia descrito en el capítulo 1.

Bibliografía

- [1] M.S. Kushwaha, P. Halevi, G. Martínez, Theory of acoustic band structure of periodic elastic composites, *Phys. Rev. B* **49**, 2313 (1994).
- [2] Eli Yablonovitch, Inhibited spontaneous emission in solid-state physics and electronics, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 2059 (1987).
- [3] A. Y. Livshits, A. G. Boganiuk, Device for reducing the energy of acoustic vibrations from hard surfaces. Patente WO2000066847 (2000).
- [4] G. Lee Cody, Therapeutic ultrasonic device, Patente US05558623A (1996).
- [5] R. Martínez-Sala, J. Sancho, J. V. Sánchez, V. Gómez, J. Llinares, and F. Meseguer, Sound attenuation by sculpture, *Nature* **378**, 241 (1995).
- [6] Lord Rayleigh, On the Maintenance of Vibrations by Forces of Double Frequency, and on the Propagation of Waves Through a Medium Endowed with a Periodic Structure, *Phil. Mag. S.* **5**, 24 (147), 145-59 (1887). Lord Rayleigh, On the Remarkable Phenomenon of Crystalline Reflexion described by Professor Stokes, *Phil. Mag. S.* **5**, 26 (160), 256-65 (1888).
- [7] M M Sigalas and E N Economou, Band structure of elastic waves in two-dimensional systems, *Solid State Commun.* **86**, 141 (1993).
- [8] J.B. Pendry, Metamaterials in the sunshine, *Nature Materials* **5**, 599 (2006). JB Pendry and DR Smith, The quest for the superlens, *Scientific American* **295**, 60-67, (2006).
- [9] S. Zhang, L. Yin and N. X. Fang, Focusing Ultrasound with an Acoustic Metamaterial Network, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 194301 (2009).

-
- [10] P. A. Fokker, J. I. Dijkhuis, and H. W. de Wijn, Stimulated emission of phonons in an acoustical cavity, *Phys. Rev. B* **55**, 2925 (1997).
- [11] I. Camps S. S. Makler H. M. Pastawski and L. E. F. Foa Torres, GaAs-Al_xGa_{1-x}As double-barrier heterostructure phonon laser: A full quantum treatment, *Phys. Rev. B* **64**, 125311 (2001).
- [12] R.P. Beardsley, A.V. Akimov, M. Henini, and A.J. Kent, Coherent Terahertz Sound Amplification and Spectral Line Narrowing in a Stark Ladder Superlattice, *Phys. Rev. Lett.* **104**, 085501 (2010).
- [13] L.D Landau, M Lifshitz, Theory of Elasticity, Bristol, Pergamon (1975).
- [14] J. Miklowitz, The Theory of Elastic Waves and Waveguides, North-Holland Publishing Company (1978).
- [15] M. J. S. Lowe, Matrix techniques for modeling ultrasonic waves in multilayered media, *IEEE Transactions on Ultrasonics, Ferroelectrics and Frequency Control*, **42**(4), 525 (1995).
- [16] J. W. Dunkin, Computation of modal solutions in layered elastic media at high frequencies, *Bull. Seism. Soc. Am.*, **55**, 335358 (1965).
- [17] D. Lévesque, L. Piché, A robust transfer matrix formulation for the ultrasonic response of multilayered absorbing media, *J. Acoust. Soc. Am.*, **92**, 452467 (1992).
- [18] B. Hosten and M. Castaings, Transfer matrix of multilayered absorbing and anisotropic media. Measurements and simulations of ultrasonic wave propagation through composite materials, *J. Acoust. Soc. Am.*, **94**, 14881495 (1993).
- [19] L. Knopoff, A matrix method for elastic wave problems, *Bull. Seism. Soc. Am.*, **54**, 431438 (1964).
- [20] A.-Li Chen, Yue-Sheng Wang, Study on band gaps of elastic waves propagating in one-dimensional disordered phononic crystals, *Physica B*, **392**, 369-378 (2007).
- [21] F. Bloch, Über die Quantenmechanik der Elektronen in Kristallgittern, *Z Phys.* **52**, 555 (1928).

-
- [22] C. Zener, A theory of the electrical breakdown of solid dielectrics, *Proc R Soc London A* **145**, 523 (1934).
- [23] E. E. Méndez, F. Agulló-Rueda, and J. M. Hong, Stark Localization in GaAs-GaAlAs Superlattices under an Electric Field, *Phys. Rev. Lett.* **60**, 2426 (1988); J. Bleuse, G. Bastard, and P. Voisin, Electric-Field-Induced Localization and Oscillatory Electro-optical Properties of Semiconductor Superlattices, *Phys. Rev. Lett.* **60**, 220 (1988); C. Waschke, H. G. Roskos, R. Schwedler, K. Leo, H. Kurz, and K. Köhler, Coherent submillimeter-wave emission from Bloch oscillations in a semiconductor superlattice, *Phys. Rev. Lett.* **70** 3319 (1993).
- [24] G. H. Wannier, Wave Functions and Effective Hamiltonian for Bloch Electrons in an Electric Field, *Phys. Rev.* **117**, 42 (1960).
- [25] M. Ben Dahan, E. Peik, J. Reichel, Y. Castin, C. Salomon, Bloch Oscillations of Atoms in an Optical Potential, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 4508 (1996).
- [26] Steven R. Wilkinson *et al*, Experimental evidence for non-exponential decay in quantum tunnelling, *Nature* **387**, 575 (1997).
- [27] O. Morsch *et al*, Bloch Oscillations and Mean-Field Effects of Bose-Einstein Condensates in 1D Optical Lattices, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 140402 (2001).
- [28] A. R. Davoyan *et al*, Plasmonic Bloch oscillations in chirped metal-dielectric structures, *Appl. Phys. Lett.* **94**, 161105 (2009).
- [29] R. Sapienza, P. Costantino, D. Wiersma, M. Ghulinyan, C. J. Oton, and L. Pavesi, Optical Analogue of Electronic Bloch Oscillations, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 263902 (2003).
- [30] V. Agarwal, J. A. del Río, G. Malpuech, M. Zamfirescu, A. Kavokin, D. Coquillat, D. Scalbert, M. Vladimirova, and B. Gil, Photon Bloch Oscillations in Porous Silicon Optical Superlattices, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 097401 (2004).
- [31] Helios Sanchis-Alepuz, Yuriy A. Kosevich, and Jose Sanchez-Dehesa, Acoustic Analogue of Electronic Bloch Oscillations and Resonant Zener Tunneling in Ultrasonic Superlattices, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 134301 (2007).

- [32] Zhaojian He, Shasha Peng, Feiyan Cai, Manzhu Ke, and Zhengyou Liu, Acoustic Bloch oscillations in a two-dimensional phononic crystal, *Phys. Rev. E* **76**, 056605 (2007).
- [33] L. Gutierrez, A. Díaz-de-Anda, J. Flores, R. A. Méndez-Sánchez, G. Monsivais, and A. Morales, Wannier-Stark Ladders in One-Dimensional Elastic Systems, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 114301 (2006).
- [34] N. D. Lanzillotti Kimura, A. Fainstein, and B. Jusserand, Phonon Bloch oscillations in acoustic-cavity structures, *Phys. Rev. B* **71**, 041305(R) (2005).
- [35] N. D. Lanzillotti Kimura, A. Fainstein, C. A. Balseiro, and B. Jusserand, Acoustic phonon nanowave devices based on aperiodic multilayers: Experiments and theory, *Phys. Rev. B* **75**, 024301 (2007).
- [36] N. D. Lanzillotti-Kimura, A. Fainstein, B. Perrin, B. Jusserand, O. Mauguin, L. Largeau, and A. Lemaitre, Bloch Oscillations of THz Acoustic Phonons in Coupled Nanocavity Structures, *Phys. Rev. Lett.* **104**, 197402 (2010).
- [37] M. Trigo, A. Bruchhausen, A. Fainstein, B. Jusserand, and V. Thierry-Mieg, Confinement of Acoustical Vibrations in a Semiconductor Planar Phonon Cavity, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 227402 (2002).
- [38] P. Lacharmoise A. Fainstein B. Jusserand and V. Thierry-Mieg, Optical cavity enhancement of lightsound interaction in acoustic phonon cavities, *Appl. Phys. Lett.* **84**, 3274 (2004).
- [39] G. Nenciu, Dynamics of band electrons in electric and magnetic fields: rigorous justification of the effective Hamiltonians, *Reviews of Modern Physics*, **63**, 91-128, (1991).
- [40] J. Feldmann, K. Leo, J. Shah, D. A. B. Miller, J-E. Cunningham, T. Meier, G. von Plessen, A. Schulze, P. Thomas, and S. Schmitt-Rink, Optical investigation of Bloch oscillations in a semiconductor superlattice, *Phys. Rev. B* **46**, 7252 (1992).
- [41] E. E. Méndez, and G. Bastard, Wannier-Stark Ladders and Bloch Oscillations in Superlattices, *Physics Today* **46**(6), 34 (1993).
- [42] Ping Sheng, Introduction to Wave Scattering, Localization and Mesoscopic Phenomena, Academic Press, New York, (1995).

-
- [43] J.D. Joannopoulos, R.D. Meade, and J.N. Winn, Photonic Crystals, Princeton University Press, Princeton, NJ, (1995).
- [44] W. Gellermann, M. Kohmoto, B. Sutherland, and P.C. Taylor, Localization of light waves in Fibonacci dielectric multilayers, *Phys. Rev. Lett.* **72**, 633 (1994).
- [45] L. Dal Negro *et al*, Light transport through the band-edge states of Fibonacci quasicrystals, *Phys. Rev. Lett.* **90**, 055501 (2003).
- [46] Y. Kuga and A. Ishimaru, Retroreflectance from a dense distribution of spherical particles, *J. Opt. Soc. Am. A* **8**, 831 (1984); M. P. van Albada and A. Lagendijk, Observation of Weak Localization of Light in a Random Medium, *Phys. Rev. Lett.* **55**, 2692 (1985); P. E. Wolf and G. Maret, Weak localization and coherent backscattering of photons in disordered media, *Phys. Rev. Lett.* **55**, 2696 (1985).
- [47] R. Dalichaouch *et al*, Microwave localization by two-dimensional random scattering, *Nature* **354**, 53 (1991); A. Z. Genack and N. Garcia, Observation of photon localization in a three-dimensional disordered system, *Phys. Rev. Lett.* **66**, 2064 (1991); D.S. Wiersma *et al*, Localization of light in a disordered medium, *Nature* **390**, 671 (1997).
- [48] N. Garcia and A. Z. Genack, Crossover to strong intensity correlation for microwave radiation in random media, *Phys. Rev. Lett.* **63**, 1678 (1989); M. P. van Albada, J. F. de Boer, and A. Lagendijk, Observation of long-range intensity correlation in the transport of coherent light through a random medium, *Phys. Rev. Lett.* **64**, 2787 (1990).
- [49] F. Scheffold and G. Maret, Universal Conductance Fluctuations of Light, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 5800 (1998).
- [50] G. Monsivais, M. del Castillo-Mussot, and F. Claro, Stark-ladder resonances in the propagation of electromagnetic waves, *Phys. Rev. Lett.* **64**, 1433 (1990)
- [51] G. Lenz, I. Talanina, and C.M. de Sterke, Bloch oscillations in an array of curved optical waveguides, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 963 (1999); A. Kavokin *et al*, Photonic Bloch oscillations in laterally confined Bragg mirrors, *Phys. Rev. B* **61**, 4413 (2000).
- [52] P. B. Wilkinson, Photonic Bloch oscillations and Wannier-Stark ladders in exponentially chirped Bragg gratings, *Phys. Rev. E* **65**, 056616 (2002).

-
- [53] G. Malpuech, A. Kavokin, G. Panzarini, and A. Di Carlo, Theory of photon Bloch oscillations in photonic crystals, *Phys. Rev. B* **63**, 035108, (2001)
- [54] Yuriy A. Kosevich, Anomalous Hall velocity, transient weak supercurrent, and coherent Meissner effect in semiconductor superlattices, *Phys. Rev. B* **63**, 205313 (2001).
- [55] J. L. Mateos and G. Monsivais, Stark-Ladder resonances in Elastic Waves, *Physica A* **207**, 445-451 (1994).
- [56] G. N. Aliev, B. Goller, D. Kovalev, and P. A. Snow, Hypersonic acoustic mirrors and microcavities in porous silicon, *Appl. Phys. Lett.* **96**, 124101 (2010).
- [57] A. Uhlir, Electrolytic shaping of germanium and silicon, *Bell Syst. Tech. J* **35**, 333 (1956).
- [58] D. R. Turner, Electropolishing silicon in hydrofluoric acid solutions, *J. Electrochem. Soc.* **105**(7):402, (1958).
- [59] Y. Watanabe and T. Sakai, Application of a thick anode film to semiconductor devices, *Rev. Elec. Commun. Lab.* **19**, 899 (1971).
- [60] M. J. J. Theunissen, Etch channel formation during anodic dissolution of n-type silicon in aqueous hydrofluoric acid, *J. Electrochem. Soc.* **119**, 351 (1972).
- [61] Y. Watanabe, Y. Arita, T. Yokoyama, and Y. Igarashi, Formation and properties of porous silicon and its application, *J. Electrochem. Soc.* **122**, 1351 (1975).
- [62] T. Unagami, Oxidation of porous silicon and properties of its oxide film, *Jpn. J. Appl. Phys.* **19**, 231, (1980).
- [63] L. T. Canham, Silicon quantum wire array fabrication by electrochemical and chemical dissolution of wafers, *Appl. Phys. Lett.* **57**, 1046 (1990).
- [64] N. Koshida and H. Koyama, Visible electroluminescence from porous silicon, *Appl. Phys. Lett.* **60**, 347 (1992).
- [65] O. Bisi, S. Ossicini, and L. Pavesi, Porous silicon: A quantum sponge structure for silicon based optoelectronics, *Surf. Sci. Rep.* **38**, 5 (2000).

- [66] M. I. J. Beale, J. D. Benjamin, M. J. Uren, N. G. Chew, and A. G. Cullis, An experimental and theoretical-study of the formation and microstructure of porous silicon, *J. Cryst. Growth* **73**, 622 (1985).
- [67] C. Pickering, M. I. J. Beale, D. J. Robbins, P. J. Pearson, and R. Greef, Optical-properties of porous silicon films, *Thin Solid Films* **125**, 157 (1985).
- [68] G. Vincent, Optical-properties of porous silicon superlattices, *Appl. Phys. Lett.* **64**, 2367 (1994).
- [69] M. G. Berger, C. Dieker, M. Thönissen, L. Vescan, H. Lüth, H. Münder, W. Theiss, M. Wernke, and P. Grosse, Porosity superlattices - a new class of Si heterostructures, *J. Phys. D Appl. Phys.* **27**, 1333 (1994).
- [70] C. Mazzoleni and L. Pavesi, Application to optical-components of dielectric porous silicon multilayers, *Appl. Phys. Lett.* **67**, 2983 (1995).
- [71] L. Pavesi, C. Mazzoleni, A. Tredicucci, and V. Pellegrini, Controlled photon-emission in porous silicon microcavities, *Appl. Phys. Lett.* **67**, 3280 (1995).
- [72] Y. Zhou, P. A. Snow, and P. S. J. Russell, Strong modification of photoluminescence in erbium-doped porous silicon microcavities, *Appl. Phys. Lett.* **77**, 2440 (2000).
- [73] M. Thönissen, M. Marso, R. Arens-Fischer, D. Hunkel, M. Krüger, V. Ganse, H. Lüth, and W. Theiss, Electrical control of the reflectance of porous silicon layers, *J. Porous Mat.* **7**, 205 (2000).
- [74] M. V. Wolkin, S. Chan, and P. M. Fauchet, Porous silicon encapsulated nematic liquid crystals for electro-optic applications, *Phys. Stat. Sol. a* **182**, 573 (2000).
- [75] S. M. Weiss and P. M. Fauchet, Electrically tunable porous silicon active mirrors, *Phys. Stat. Sol. a* **197**, 556 (2003).
- [76] S. Weiss, M. Molinari, and P. Fauchet. Temperature stability for silicon-based photonic band-gap structures. *Appl. Phys. Lett.* **83**, 1980 (2003).
- [77] J. Diener, N. Kunzer, E. Gross, D. Kovalev, and M. Fujii, Planar silicon-based light polarizers, *Opt. Lett.* **29**, 195 (2004).

- [78] M. Thust, M. J. Schöning, S. Frohnhoff, R. Arens-Fischer, P. Kordos, and H. Lüth, Porous silicon as a substrate material for potentiometric biosensors, *Meas. Sci. Technol.* **7**, 26 (1996).
- [79] V. S. Y. Lin, K. Motesharei, K. P. S. Dancil, M. J. Sailor, and M. R. Ghadiri, A porous silicon-based optical interferometric biosensor, *Science* **278**, 840 (1997).
- [80] E. Lorenzo, C. J. Oton, N. E. Capuj, M. Ghulinyan, D. Navarro-Urrios, Z. Gaburro, and L. Pavesi, Porous silicon-based rugate filters, *Applied Optics* **44**, 5415 (2005).
- [81] M. G. Berger, R. Arens-Fischer, M. Thonissen, M. Krüger, S. Billat, H. Lüth, S. Hilbrich, W. Theiss, and P. Grosse, Dielectric filters made of ps: Advanced performance by oxidation and new layer structures, *Thin Solid Films* **297**, 237 (1997).
- [82] R. J. M. Fonseca, J. M. Saurel, A. Foucaran, J. Camassel, E. Massone, and T. Taliercio, Acoustic investigation of porous silicon layers, *J. Mat. Sci.*, **30**, 3539 (1995).
- [83] G. N. Aliev, Bernhard Goller, Dmitry Kovalev, and Paul A. Snow, Porosity dependence of the acoustic longitudinal velocity in heavily doped p^{++} porous silicon layers, *Phys. Status Solidi C* **6**, 7, 1670-1674 (2009).
- [84] G. N. Aliev, B. Goller, and P. A. Snow, Elastic properties of porous silicon studied by acoustic transmission Spectroscopy, *J. Appl. Phys.* **110**, 043534 (2011).
- [85] L. Thomas, G. N. Aliev, and P. A. Snow, Hypersonic rugate filters based on porous silicon, *Appl. Phys. Lett.* **97**, 173503 (2010).
- [86] G. N. Aliev, B. Goller, P. A. Snow, H. Heinrich, B. Yuan and R. Aigner, Porous silicon bulk acoustic wave resonator with integrated transducer, *Nanoscale Research Letters* **7**, 378 (2012).
- [87] H. Föll, M. Christophersen, J. Carstensen, and G. Hasse, Formation and application of porous silicon, *Mat. Sci. Eng. R*, **39**(4):93, (2002).
- [88] X. G. Zhang, Morphology and formation mechanisms of porous silicon, *J. Electrochem. Soc.* **151**, (1):C69 (2004).
- [89] R. L. Smith and S. D. Collins, Porous silicon formation mechanisms, *J. Appl. Phys.* **71**, (8):R1 (1992).

-
- [90] V. Lehmann and U. Gosele, Porous silicon formation - a quantum wire effect, *Appl. Phys. Lett.*, **58**(8):856, (1991).
- [91] V. Lehmann and S. Ronnebeck, The physics of macropore formation in low-doped p-type silicon, *J. Electrochem. Soc.*, **146**(8):2968, (1999).
- [92] V. Lehmann, R. Stengl and A. Luigart, On the morphology and the electrochemical formation mechanism of mesoporous silicon, *Materials Science and Engineering B*, **69**, 11 (2000).
- [93] Kurt W. Kolasinski, Justin D. Hartline, Bryan T. Kelly, Julia Yadlovskiy, Dynamics of porous silicon formation by etching in HF + V₂O₅ solutions, **108**, 7-9 10331043, (2010).
- [94] L. Pavesi, Influence of dispersive exciton motion on the recombination dynamics in porous silicon, *J. Appl. Phys.* **80**, 216 (1996).
- [95] V. Lehmann, *Electrochemistry of Silicon: Instrumentation, Science, Materials and Applications*, WileyVCH, Weinheim, Germany (2002).
- [96] B. A. Auld, *Acoustic Fields and Waves in Solids*, 2nd ed. Krieger, Malabar Florida, Vol. 1, (1990).
- [97] A. Bruyant, G. Léronnel, P.J. Reece, and M. Gal, All-silicon omnidirectional mirrors based on one-dimensional photonic crystals, *Appl. Phys. Lett.* **82**, 3227 (2003).
- [98] H. S. Nalwa, *Silicon Based Materials and Devices*, Vol. 2: Properties and Devices, Academic Press, San Diego (2001).
- [99] J. Charrier, M. Guendouz, L. Haji, and P. Joubert, Porosity Gradient Resulting from Localised Formation of Porous Silicon: The Effect on Waveguiding, *Phys. Stat. Sol. (a)* **182**, 431 (2000).
- [100] L. De Stefano, L. Moretti, A.M. Rossi, and I. Rendina, Porous silicon microcavities for optical hydrocarbons detection, *Sen. Actuators A* **104**, 179 (2003).
- [101] J. Volk, J. Balázs, A.L. Tóth, and I. Bársony, Porous silicon multilayers for sensing by tuneable IR-transmission filtering, *Sen. Actuators B* **100**, 163 (2004).

- [102] E.K. Squire, P.A. Snow, P.St. Russell, L.T. Canham, A.J. Simons, and C.L. Reeves, Light emission from porous silicon single and multiple cavities, *J. Luminescence* **80**, 125 (1999).
- [103] P. Allongue, Porous silicon formation mechanisms, in Properties of Porous Silicon, L. Canham, ed., (INSPEC, London, UK, 1997) 311.
- [104] A. Halimaoui, Porous Silicon formation by anodization (in Properties of Porous Silicon), L. Canham, Ed., Short Run Press Ltd., London (1997).
- [105] S. E. Foss, P. Y. Y. Kann, and T. G. Finstad, Single beam determination of porosity and etch rate in situ during etching of porous silicon, *J. Appl. Phys.* **97**, 114909-1-14909-11, (2005).
- [106] L. Pavesi, and V. Mulloni, All porous silicon microcavities: growth and physics, *J. Luminescence*, **80**, 43 (1999).
- [107] G. Lerondel, R. Romestain, and S. Barret, Roughness of the porous silicon dissolution interface, *J. Appl. Phys.* **81** (9), 6171 (1997).
- [108] S. Setzu, G. Lerondel, and R. Romestain, Temperature effect on the roughness of the formation interface of ptype porous silicon, *J. Appl. Phys.* **84**, 31293133 (1998).
- [109] S. Setzu, P. Ferrand, R. Romestain, Optical properties of multilayered porous silicon, *Materials Science and Engineering B* **69-70**, 34-42 (2000).
- [110] R. J. M. Da Fonseca, J. M. Saurel, G. Despaux, A. Foucaran, E. Massonne, T. Taliercio, and P. Lefebvre, Elastic characterization of porous silicon by acoustic microscopy, *Superlattices Microstruct.* **16**, 21 (1994); R. J. M. Da Fonseca, J. M. Saurel, A. Foucaran, J. Camassel, E. Massone, T. Taliercio, and Y. Boumaiza, Acoustic investigation of porous silicon layers, *J. Mater. Sci.* **30**, 35 (1995).
- [111] D. Bellet, P. Lamagnère, A. Vincent, and Y. Bréchet, Nanoindentation investigation of the Youngs modulus of porous silicon, *J. Appl. Phys.* **80**, 3772 (1996).
- [112] G. T. Andrews, J. Zuk, H. Kieft, M. J. Clouter, and E. Nossarzewska-Orlowska, Elastic characterization of a supported porous silicon layer by Brillouin scattering, *Appl. Phys. Lett.* **69**, 1217 (1996).

- [113] M. A. Biot, Theory of propagation of elastic waves in a fluid-saturated porous solid, I. Low frequency range, *J. Acoust. Soc. Am.* **28**, 168 (1956); M. A. Biot, Theory of propagation of elastic waves in a fluid-saturated porous, II. High frequency range, *J. Acoust. Soc. Am.* **28**, 179 (1956).
- [114] J. F. Allard, Propagation of Sound in Porous Media Modelling Sound Absorbing Materials, Elsevier Applied Science, London (1993).
- [115] H. J. Fan, M. H. Kuok, S.C. Ng, R. Boukherroub, J.-M. Baribeau, J.W. Fraser and D.J. Lockwood, Brillouin scattering of acoustic modes in porous silicon films, *Phys. Rev. B*, **65**, p. 165330.1-8 (2002).
- [116] K. K. Phani, S. K. Niyogi, A.K. Maitra, and M. Roychaudhury, Strength and elastic modulus of a porous brittle solid: an acousto-ultrasonic study, *J. Mater. Sci.* **21**, 4335 (1986); A.K. Maitra and K.K. Phani, *J. Mater. Sci.* **29**, 4415 (1994).
- [117] G. T. Andrews, A. M. Polomska, E. Vazsony, and J. Volk, Brillouin light scattering from porous silicon films and multilayers, *Phys. Status Solidi A* **204**, 1372 (2007).
- [118] N. Künzner, J. Diener, E. Gross, D. Kovalev, V. Yu. Timoshenko, and M. Fujii, Form birefringence of anisotropically nanostructured silicon, *Phys. Rev. B* **71**, 195304 (2005).
- [119] R. J. M. Da Fonseca, J. M. Saurel, A. Foucaran, E. Massone, T. Talierco and J. Camassel, Acoustic microscopy investigation of porous silicon, *Thin Solid Films*, **225**, p. 155-158 (1995).
- [120] G. Sotgiu, L. Schirone, and F. Rallo, On the use of surfactants in the electrochemical preparation of porous silicon, *Thin Solid Films*, **297**, 1821 (1997).
- [121] Pochi Yeh, Optical Waves in Layered Media, Jhon Wiley and Sons (1998).
- [122] M. V. Wolkin, J. Jorne, P. M. Fauchet, G. Allan and C. Delerue, Electronic States and Luminescence in Porous Silicon Quantum Dots: The Role of Oxygen, *Phys. Rev. Lett.*, **82**, 1 (1999).
- [123] S. Ilyas, T. Böcking, K. Kilian, P. J. Reece, J. Gooding, K. Gaus, and M. Gal, Porous silicon based narrow line-width rugate filters, *Opt. Mater.*, **29**, 619 (2007).

- [124] P. A. Snow, E. K. Squire, P. St. J. Russell, and L. T. Canham, Vapor sensing using the optical properties of porous silicon Bragg mirrors, *J. Appl. Phys.*, **86**, 1781 (1999).
- [125] V. Torres Costa and R. J. Palmer, Application of nanostructured porous silicon in the field of optics. A review, *J. Mater. Sci.*, **45**, 2823 (2010).
- [126] F. Cunin, T. A. Schmedake, J. R. Link, Y. Y. Li, J. Koh, S. N. Bhatia, and M. J. Sailor, Biomolecular screening with encoded porous-silicon photonic crystals, *Nature Mater.*, **1**, 39 (2002).
- [127] A. de Bernabé, R. Jiménez, M. García-Hernández, and C. Prieto, Elastic Behaviour of Si/Ge Superlattices Determined by Brillouin Light Scattering, *Thin Solid Films*, **317**, 255 (1998).
- [128] M. Grimsditch, R. Bhadra, I. K. Schuller, F. Chambers, and G. Devane, Elastic properties of GaAs/AlAs superlattices, *Phys. Rev. B*, **42**, 2923 (1990).
- [129] M. Thönissen, M. G. Berger, S. Billat, R. Arens-Fischer, M. Krüger, H. Lüth, W. Theiss, S. Hillbrich, P. Grosse, G. Lerondel, and U. Frotscher, Analysis of the depth homogeneity of p-PS by reflectance measurements, *Thin Solid Films* **297**, 92 (1997).
- [130] A. Halimaoui, *Surf. Sci. Lett.* **306**, L550, (1994).
- [131] V. Lehmann, *J. Electrochem. Soc.* **140**, 2836, (1993).
- [132] S. Billat, M. Thönissen, R. Arens-Fischer, M.G. Berger, M. Krüger, and H. Lüth, Influence of etch stops on the microstructure of porous silicon layers, *Thin Solid Films* **297**, 22-25 (1997).
- [133] M. Thönissen, S. Billat, M. Krüger, H. Lüth, M. G. Berger U. Frotscher, and U. Rossow, Depth inhomogeneity of porous silicon layers, *J. Appl. Phys.* **80**, 2990 (1996).
- [134] R. Herino, G. Bomchil, K. Barla, C. Bertry, and J.L. Ginoux, Porosity and Pore Size Distributions of Porous Silicon Layers, *J. Electrochem. Soc.* **134**, 1994-2000, (1987).
- [135] E. Lorenzo, C.J. Oton, B.J. González Díaz, C. Hernández Rodríguez, R. Guerrero Lemus, and N.E. Capuj, Fabrication and optimization of rugate filters based on porous silicon, *phys. stat. sol. (c)* **2**, 3227 (2005).

-
- [136] M. Born, and E. Wolf, Principle of Optics, Pergamon, Oxford (1980).
- [137] S. Bosch, J. Ferré-Borrull, J. Sancho-Parramon, A general-purpose software for optical characterization of thin films: specific features for microelectronic applications. *Solid-State Electronics*, 45:703709, (2001).
- [138] E. D. Palik. Handbook of Optical Constants of Solids. Academic, Orlando, FL, USA (1985).
- [139] D. J. Bergman, Dielectric-constant of a composite-material - problem in classical physics, *Phys. Rep.* **43**, (9):378 (1978).
- [140] J. C. Maxwell Garnett, Colours in metal glasses and in metallic films, *Philos. Trans. R. Soc. London A* **203**, 385-420, (1904).
- [141] H. Looyenga, Dielectric constants of heterogeneous mixtures, *Physica* **31**, (3):401 (1965).
- [142] D. A. G. Bruggeman, Berechnung verschiedener physikalischer Konstanten von heterogenen Substanzen. I. Dielektrizitätskonstanten und Leitfähigkeiten der Mischkörper aus isotropen Substanzen, *Ann. Phys.* **24**, 636 (1935).
- [143] W. Theiss, Optical properties of porous silicon, *Surf. Sci. Rep.* **29**, 95 (1997).
- [144] W. Theiss and S. Hilbrich. Refractive index of porous silicon. In L. Canham, editor, Properties of Porous Silicon, volume 18 of Emis Datareviews Series, page 223. INSPEC, IEE, London, United Kingdom, (1997).
- [145] D. E. Aspnes and J. B. Theeten, Investigation of effective-medium models of microscopic surface-roughness by spectroscopic ellipsometry, *Phys. Rev. B* **20**, 3292 (1979).
- [146] B. M. Lempriere. Ultrasound and elastic waves, Academic Press, USA (2002).
- [147] O. Madelung, U. Rössler, and M. Schulz (ed.), Landolt-Börnstein - Group III Condensed Matter, Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology, Group IV Elements, IV-IV and III-V Compounds. Part a - Lattice Properties (2001).

Publicaciones

- Z. Lazcano, J. Arriaga, “High Quality Porous Silicon Multilayer Structures for Infra-red Applications”, *Progress In Electromagnetics Research Symposium PIERS*, ISSN 1559-9450, 1404, (2013).
- Z. Lazcano, G. N. Aliev, J. Arriaga, “Experimental and theoretical demonstration of acoustic Bloch oscillations in porous silicon structures”, *J. Appl. Phys.* **115**, 154505 (2014).
- Z. Lazcano, J. Arriaga, “Acoustic Wannier-Stark ladders and Bloch oscillations in porous silicon structures”, Artículo enviado a *Physical Review Letters*.
- Z. Lazcano, O. Meza, J. Arriaga, “Localization of acoustic modes in periodic porous silicon structures”, Artículo enviado a *Nanoscale Research Letters*.
- Z. Lazcano, P.L. Valdés Negrín, D. Villegas, J. Arriaga, R. Pérez-Álvarez, “Tunneling times of acoustic phonon packets through a distributed Bragg reflector”, Artículo enviado a *Nanoscale Research Letters*.

Participación en eventos

- Localization of acoustic modes in periodic porous silicon structures, Z. Lazcano, O. Meza, J. Arriaga, Porous Semiconductors - Science and Technology 2014, Alicante, Spain (2014).
- Tunneling times of acoustic phonon packets through a distributed Bragg reflector, Z. Lazcano, D. Villegas, R. Pérez, J. Arriaga, Porous Semiconductors - Science and Technology 2014, Alicante, Spain (2014).
- Estudio de las propiedades acústicas del silicio poroso, escaleras de Wannier-Stark y Oscilaciones de Bloch en sistemas multicapas, Z. Lazcano, O. Meza, J. Arriaga, Séptimo Taller de Física de la Materia Condensada y Molecular, Morelos, México (2014).
- Estudio de las propiedades acústicas en estructuras periódicas de silicio poroso, Z. Lazcano, O. Meza, J. Arriaga, Encuentro Nacional de Ciencias “Luis Rivera Terrazas”, FCFM, BUAP, Puebla, México (2013).
- Estudio óptico de monocapas y multicapas de silicio poroso para aplicaciones acústicas, Z. Lazcano, J. Arriaga, Quinta Reunión Universitaria de Fotónica y Óptica, Puebla, México (2012).
- Parámetros efectivos de una distribución de cilindros fluidos viscosos en un medio viscoso, E. Reyes-Ayona, Z. Lazcano, LV Congreso Nacional de Física, Morelia, Michoacán, México (2012).
- Theoretical study of acoustic Wannier-Stark ladders in porous silicon, Z. Lazcano, J. Arriaga, XX International Materials Research Congress, Cancún, México (2011).
- Estudio teórico de escaleras de Wannier-Stark acústicas en multicapas de silicio poroso, Primer Taller del Cuerpo Académico: Propiedades Electrónicas, Ópticas y Magnéticas de Materiales en la Universidad Autónoma de Zacatecas, Zacatecas, México (2011).

Notas

