Universidade Estadual de Campinas Instituto de Física Gleb Wataghin Departamento de Física da Matéria Condensada

Cristais Fotônicos 2D: Projeto e Fabricação

Fabíola Azanha Quiñónez

Tese de Mestrado

Orientadora: Prof^a Dr^a Lucila Helena Deliesposte Cescato

Campinas, SP - 2006

FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA BIBLIOTECA DO IFGW - UNICAMP

Q45c	Quiñónez, Fabíola Azanha Cristais fotônicos 2 D : projeto e fabricação / Fabíola Azanha Quiñónez Campinas, SP : [s.n.], 2006. Orientador: Lucila Helena Deliesposte Cescato.			
	Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Física "Gleb Wataghin".			
	 Cristais fotônicos. Diagramas de bandas. Litografia holográfica. Cescato, Lucila Helena Deliesposte. Universidade Estadual de Campinas. Instituto de Física "Gleb Wataghin". Título. (vsv/ifgw) 			
- Título em inglês: 2D photonic crystals : design and fabrication				
- Palavras-chave em inglês (Keywords):				
1. Photonic crystals				
3. Holographic lithography				
Área de concentração: Propriedades óticas e Espectroscopia da Matéria Condensada ; Outras Inter. da Mat.Com Rad.e Part.				
Titulação: Mestre em física				
Banca examinadora: Prof. Lucila Helena Deliesposte Cescato Prof. Mauro Monteiro Garcia de Carvalho Prof. Mikiya Muramatsu				

- Data da defesa: 23/02/2006
- Programa de Pós Graduação em: Física

Resumo

Nesta tese foi utilizado um programa baseado em elementos finitos para projetar cristais fotônicos bidimensionais, assim como foram desenvolvidos processos de litografia holográfica para gravação destas estruturas fotônicas em filmes de carbono amorfo hidrogenado, depositados sobre substratos de vidro.

O projeto dos parâmetros geométricos das estruturas que apresentam um *gap* fotônico, numa dada região de interesse do espectro óptico, foi feito através do cálculo dos diagramas de bandas das estruturas, levando-se em consideração as dimensões e formas que possam ser fabricadas utilizando a técnica de litografia holográfica.

Para gravação dos cristais fotônicos bidimensionais, com simetrias cúbica e hexagonal, foi utilizada a técnica de superposições sucessivas de padrões, gerados pela interferência de duas ondas planas (exposições holográficas), associadas à litografia do filme de carbono por plasma reativo (RIE – *Reactive Ion Etching*).

Abstract

In this thesis, we employed a software based on finite element method to design two-dimensional photonic crystals, as well as we developed a holographic lithography process to record these photonic structures in amorphous carbon films, coated on glass substrates.

In order to present a photonic band gap in a desired region of the optical spectrum, the geometrical parameters of the structures were defined by analyzing the calculated band diagram of the structures. Such definition takes into account the dimensions and forms of the structures that can be fabricated using techniques of holographic lithography.

To record the two-dimensional photonic crystals, with cubic and hexagonal symmetries, we used the technique of successive superimposition of fringe patterns. The patterns were generated by the interference of two plane waves (holographic exposures), associated to the lithography of the carbon film by reactive ion etching.

Índice

Capítulo 1 – Introdução				
Capítulo 2 – Cristais Fotônicos				
2.1. Conceitos básicos				
2.2. Análise teórica de <i>band gaps</i> fotônicos				
2.2.a. Cristais fotônicos unidimensionais				
2.2.b. Cristais fotônicos bidimensionais				
2.2.c. Cristais fotônicos tridimensionais				
Capítulo 3 – O Projeto				
3.1. O programa para cálculo dos diagramas de bandas				
3.2. Representação das estruturas				
3.3. Diagramas de Bandas e Mapas de <i>Gap</i> calculados				
3.3.a. Rede cúbica				
3.3.b. Rede hexagonal – Colunas com perfil circular				
3.3.c. Rede hexagonal – Colunas com perfil elíptico				
3.3.d. O Mapa de <i>Gap</i> em função do índice de refração do material 31				
3.4. Projeto de cristais fotônicos				
Capítulo 4 – Desenvolvimento do Processo de Fabricação35				
4.1. A deposição dos filmes dielétricos				
4.1.a. Nitreto de silício (Si ₃ N ₄)				
4.1.b. Carbono amorfo hidrogenado (a-C:H)				
4.2. O processo de litografia holográfica				
4.3. Superposição de padrões de interferência de duas ondas planas				
4.4. Estruturas gravadas em fotorresina				

4.5. Transferência do padrão em fotorresina para o filme de a-C:H 4	9
4.5.a. Utilizando máscara de SiO ₂	9
4.5.b. <i>Lift-off</i>	1
Capítulo 5 – Conclusões e Perspectivas5	6
Apêndice 1 – Índice de Refração Efetivo da Camada5	9
Apêndice 2 – Sistema para Acoplamento de Luz na Camada6	1
Referências	4

Capítulo 1

Introdução

O Laboratório de Óptica do IFGW/Unicamp utiliza há muitos anos exposições holográficas para caracterização de materiais fotossensíveis [1][2] assim como para fabricação de componentes ópticos difrativos de alta freqüência espacial, tais como redes de difração, polarizadores, divisores de polarização, lâminas de onda, filtros de banda estreita, etc [3][4][5]. Estes componentes consistem em estruturas periódicas unidimensionais, que são gravadas utilizando a projeção de um padrão de interferência formado pela superposição de duas ondas planas coerentes, sobre um material fotossensível.

Numa tese de mestrado [6], concluída no laboratório em 2003, foi demonstrada a viabilidade de se gravar estruturas bidimensionais em relevo, em metais e dielétricos, utilizando-se a superposição de dois padrões de interferência. Estas estruturas bidimensionais em relevo podem se comportar como camadas anti-refletoras [6][7][8] ou ainda, no caso de estruturas metálicas, apresentar propriedades de ressonância plasmônica [6][9].

Por outro lado, estruturas dielétricas bi ou tridimensionais em relevo, apresentam uma forte modulação espacial no índice de refração (ou da constante dielétrica). Esta modulação pode ser interpretada como barreiras periódicas de potencial, podendo, em determinadas condições, apresentar bandas de energia proibida para fótons (PBG – *Photonic Band Gap*) de forma semelhante ao que acontece para elétrons em um cristal [10][11][12], por este motivo estes materiais são chamados de cristais fotônicos. Recentemente tem havido grande interesse em estruturas periódicas que apresentam propriedades de PBG, tanto para pesquisa fundamental [12][13] quanto para o desenvolvimento de aplicações tecnológicas [14].

A projeção de padrões de interferência, aliada a técnicas de litografia tem se mostrado uma alternativa interessante para a geração destes tipos de estruturas bi e tridimensionais [15][16]. Áreas de até dezenas de centímetros podem ser gravadas holograficamente, com um custo muito menor do que utilizando outros processos de alta resolução como, por exemplo, escrita por feixe de elétrons. Desta forma, o objetivo deste trabalho de mestrado foi desenvolver um processo para fabricação de cristais fotônicos bidimensionais, utilizando-se exposições holográficas.

Como nem toda estrutura bidimensional apresenta a propriedade de PBG, para a fabricação de um cristal com *gap* fotônico numa determinada região do espectro eletromagnético é necessário, primeiramente, projetar o cristal fotônico, isto é, definir os parâmetros geométricos e ópticos da estrutura a ser fabricada. Por este motivo uma parte significativa deste trabalho foi o projeto do cristal fotônico, levando-se em conta as limitações do processo de fabricação.

Desta forma, esta tese está dividida do seguinte modo: no capítulo 2 é feito um resumo dos conceitos básicos sobre cristais fotônicos que serão utilizados no decorrer da tese; o capítulo 3 trata do projeto dos cristais fotônicos enquanto que o capítulo 4 descreve o processo de fabricação utilizado. As conclusões são apresentadas no capítulo 5.

Capítulo 2

Cristais Fotônicos

2.1. Conceitos básicos

Ondas em meios estratificados ou com perturbações periódicas sofrem múltiplos espalhamentos quando seu comprimento de onda é comparável ao período destas perturbações. Por exemplo, elétrons – ou ondas eletrônicas – que se propagam num cristal sofrem espalhamentos múltiplos nos átomos da rede, distribuídos periodicamente no espaço. Em determinadas condições, as ondas espalhadas podem interferir construtivamente na direção oposta à direção de propagação da onda, gerando uma onda estacionária. Nesta situação, a onda não pode se propagar através do cristal, resultando em freqüências (energias) com propagação proibida. As energias eletrônicas permitidas formam, então, bandas separadas por gaps de estados de energia proibidos ou band gaps eletrônicos. Em analogia a elétrons num cristal, fótons - ou ondas eletromagnéticas sofrem espalhamento múltiplo em uma estrutura dielétrica cujo índice de refração (ou constante dielétrica) é espacialmente modulado com período espacial comparável ao comprimento de onda da onda eletromagnética [17]. Em algumas estruturas dielétricas com periodicidade tridimensional não há modos de propagação em quaisquer direções para um certo intervalo de freqüências, dando origem a um 'band gap fotônico' completo. Estas estruturas consistem, por exemplo, de esferas dielétricas de alto índice de refração suspensas em um meio de baixo índice ou furos de ar em um meio dielétrico de alto índice de refração, com constantes de rede da ordem do comprimento de onda eletromagnético.

Da mesma forma que *band gaps* eletrônicos estão relacionados a elétrons em um cristal, *band gaps* fotônicos estão relacionados a fótons em uma estrutura dielétrica periódica. Devido a essa analogia feita com elétrons em um cristal, essas estruturas dielétricas periódicas são chamadas de *cristais fotônicos*.

A teoria desenvolvida para os cristais fotônicos se baseia em alguns conceitos utilizados no caso eletrônico, como células unitárias, rede recíproca, zonas de Brillouin, relações de dispersão, *gaps* de energia, etc. Algumas comparações podem ser feitas: a função de onda eletrônica deve satisfazer a equação escalar de Schrödinger enquanto que a onda eletromagnética deve satisfazer as equações vetoriais de Maxwell; os campos são decompostos em modos harmônicos que oscilam com fator de fase $e^{i\omega t}$. No caso eletrônico, a função de onda $\Psi(\mathbf{r}, t)$ é um campo escalar complexo. No caso dos fótons, o campo magnético $\mathbf{H}(\mathbf{r}, t)$ é um campo vetorial real e a exponencial uma conveniência matemática.

Em ambos casos, os modos do sistema são determinados por uma equação de autovalores cujos operadores são hermitianos. É por causa deste fato que os cálculos para o caso dos fótons são feitos utilizando-se o campo magnético – utilizando-se o campo elétrico da onda obtemos um operador não hermitiano. Além disso, ambos sistemas possuem simetria translacional – no caso eletrônico o potencial $V(\mathbf{r})$ é periódico, no caso eletromagnético a <u>constante dielétrica $\varepsilon(\mathbf{r})$ </u> é a que possui periodicidade.

Para o caso eletrônico, a freqüência ω tem uma relação quadrática com o número de onda k; para fótons, a freqüência ω se relaciona com o módulo do vetor de onda k de forma linear. A tabela 2.1 mostra algumas dessas comparações entre elétrons numa rede cristalina e fótons em uma estrutura dielétrica periódica [11].

Campo	$\Psi(\mathbf{r}, t) = \Psi(\mathbf{r})e^{i\omega t}$	$\mathbf{H}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{H}(\mathbf{r})e^{i\omega t}$
Equação de Autovalores	$H\Psi = (\hbar\omega)\Psi$	$\Theta \mathbf{H} = (\omega/c)^2 \mathbf{H}$
Operador hermitiano	$H = \frac{-\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V(\mathbf{r})$	$\Theta = \nabla \times \left(\frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} \nabla \times\right)$
Simetria translacional discreta	$V(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r} + \mathbf{R})$	$\varepsilon(\mathbf{r}) = \varepsilon(\mathbf{r} + \mathbf{R})$
Relação de dispersão	$\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$	$\omega = k v$



Uma propriedade importante das equações de Maxwell é que elas são independentes da escala. Se todas as dimensões do sistema são multiplicadas por uma constante, as soluções são exatamente as mesmas, com exceção das freqüências, que ficam divididas por esta mesma constante. Devido a essa invariância de escala é conveniente, para o caso fotônico, utilizar unidades adimensionais para distância e tempo. É assumida uma escala de comprimento natural do sistema: a periodicidade *a* da rede do cristal. Todas as distâncias são, então, expressas por múltiplos de *a* e todas as freqüências angulares como múltiplos de $2\pi c/a$ – estas relações serão utilizadas ao longo desta tese quando forem expressos os diagramas de banda fotônicos $\omega(k)$.

2.2. Análise teórica de band gaps fotônicos

2.2.a. Cristais fotônicos unidimensionais

Os cristais fotônicos podem apresentar simetria uni, bi ou tridimensional. Um cristal fotônico unidimensional tem periodicidade em uma única dimensão: consiste em camadas alternadas de materiais com diferentes constantes dielétricas. No entanto, este tipo de cristal pode apresentar a propriedade de *gap* fotônico (*Photonic Band Gap* – PBG) apenas para luz incidente atravessando perpendicularmente as múltiplas camadas periódicas – luz se propagando na direção z indicada na figura 2.1. Um cristal fotônico bidimensional tem periodicidade em duas direções e é homogêneo na terceira. Apresenta PBG apenas para luz incidente no plano de periodicidade (plano y-z, figura 2.1). O cristal fotônico tridimensional é periódico nas três dimensões, este sim é o análogo a um cristal real, pois pode apresentar PBG para quaisquer direções de incidência da luz – gerando um *band gap* fotônico completo.



Figura 2.1 – Exemplos de cristais fotônicos uni, bi e tridimensional. As diferentes cores representam materiais com diferentes constantes dielétricas.

Para analisar o comportamento da luz que se propaga através de um cristal fotônico vamos começar pelo caso mais simples: o cristal fotônico unidimensional. Na figura 2.2 temos um cristal periódico na direção z e homogêneo no plano x-y. O espaçamento entre as múltiplas camadas de materiais que compõem o cristal unidimensional é *a*.

Utilizando-se a mesma nomenclatura de Física do Estado Sólido [18][19], temos que: se o vetor primitivo da rede é $a \hat{z}$, então, o vetor primitivo da rede recíproca é $(2\pi/a)\hat{z}$ e a zona de Brillouin é $-\pi/a < k < \pi/a$.



Figura 2.2 – Cristal fotônico unidimensional – consiste em camadas alternadas de materiais (verde e azul) com diferentes constantes dielétricas, espaçadas por uma distância *a*. É suposto que o cristal se estende infinitamente na direção z.

Considere luz se propagando na direção z, com incidência normal, cruzando os planos formados pelas múltiplas camadas de material dielétrico. A figura 2.3 mostra a relação de dispersão $\omega(k)$ (diagrama de bandas fotônico) para três arranjos diferentes de camadas dielétricas. No diagrama à esquerda, todas as camadas têm a mesma constante dielétrica, logo, o meio é completamente homogêneo e a relação de dispersão é contínua. O diagrama central é para uma estrutura com constantes dielétricas alternadas de valor 13 e 12 (camadas de GaAs alternadas com camadas de GaAlAs), e o diagrama à direita, é para uma estrutura com um contraste de constante dielétrica maior: 13 e 1 (camadas de GaAs e ar).



Figura 2.3 – Diagramas de banda fotônicos para três arranjos diferentes de camadas dielétricas, todos com camadas de espessura 0,5*a*. À esquerda: cada camada tem a mesma constante dielétrica $\varepsilon = 13$. No centro: camadas alternadas de $\varepsilon = 13$ e $\varepsilon = 12$. À direita: camadas alternadas de $\varepsilon = 13$ e $\varepsilon = 1$.

O diagrama à esquerda é para um meio dielétrico uniforme, ao qual foi atribuída "artificialmente" uma periodicidade *a*. Para um meio uniforme temos:

$$\omega(k) = \frac{ck}{\sqrt{\varepsilon}} \tag{1}$$

Devido à atribuição de uma periodicidade ao meio, temos que k se repete fora da zona de Brillouin, logo, as linhas são rebatidas para dentro da zona ao atingirem os limites.

O diagrama ao centro, referente a um meio quase uniforme, é semelhante ao da esquerda com uma importante diferença: há um *gap* em freqüência entre os ramos superior (banda n = 2) e inferior das linhas (banda n = 1) – um *gap* de freqüência em que nenhum modo, independentemente do valor de k, pode existir no cristal. Este *gap* é o chamado *gap* fotônico (PBG). Como pode ser visto à direita, à medida que se aumenta o contraste entre as constantes dielétricas, o *gap* se alarga consideravelmente.

Quando luz incide no cristal (na direção z, com incidência normal), ao cruzar os planos formados pelas múltiplas camadas de material dielétrico, ocorre refração no meio e uma reflexão parcial nas interfaces entre os dois materiais diferentes. A onda resultante é a superposição dos padrões de onda refletidos nas múltiplas interfaces com a onda incidente. Quando o comprimento de onda da luz incidente é o dobro da constante de rede do cristal,

 $\lambda = 2a$, a onda resultante é uma onda estacionária que não se propaga através do material. Como a energia deve ser conservada, a luz é refletida – como se incidisse em um espelho. De fato, este tipo de arranjo é muito utilizado em espelhos dielétricos, filtros ópticos e dispositivos opto-eletrônicos [20][21][22].

A figura 2.4 ilustra uma situação para luz incidindo no cristal unidimensional para comprimentos de onda no PBG e a figura 2.5, ilustra a situação para comprimentos de onda fora do PBG [23].



Figura 2.4 – (1) Onda incidente no cristal unidimensional com comprimento de onda no PBG. (2) As ondas refletidas parcialmente em cada camada de material dielétrico estão em fase e reforçam umas às outras. (3) A superposição do padrão das ondas refletidas com a onda incidente produz uma onda estacionária que não se propaga através do material.



Figura 2.5 – (1) Onda incidente no cristal unidimensional com comprimento de onda fora do PBG. (2) As ondas refletidas parcialmente em cada camada de material dielétrico estão fora de fase e cancelam umas às outras. (3) A onda resultante se propaga através do cristal com uma pequena atenuação.

Temos, então, que para $\lambda = 2a$ os modos são ondas estacionárias. Essa condição é satisfeita no limite da zona de Brillouin ($k = \pi/a$). Uma onda estacionária deste tipo pode se localizar de duas únicas maneiras dentro do cristal: seus nodos podem estar centrados no

material de mais baixa constante dielétrica ε , como mostrado na figura 2.6-a, ou no material de ε mais elevada, como na figura 2.6-b.

A energia E_D da onda eletromagnética é dada por:

$$E_{D} = \left(\frac{1}{8\pi}\right) \int d\mathbf{r} \frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} |\mathbf{D}(\mathbf{r})|^{2}$$
(2)

Para a onda estacionária com nodos no material de ε mais baixa (figura 2.6-a) o campo elétrico e o vetor deslocamento elétrico **D** se concentram no material com ε mais elevada como ilustra a figura 2.6-c, já para a onda estacionária com nodos no material de ε mais elevada (figura 2.6-b), o vetor deslocamento elétrico **D** se concentra no dielétrico de ε mais baixa (figura 2.6-d). Desta forma, embora o comprimento de onda seja o mesmo, há uma freqüência diferente associada para os dois casos, por isso o *gap* surge exatamente no limite da zona de Brillouin.



Figura 2.6 – Esquema dos modos associados ao *gap* do diagrama de bandas ao centro da figura 2.3. (a) Campo elétrico da banda 1; (b) campo elétrico da banda 2; (c) energia local (associada ao campo elétrico) da banda 1; (d) energia local da banda 2. As regiões em azul representam as camadas do material de maior constante dielétrica ($\varepsilon = 13$).

Como E_D é inversamente proporcional a ε , o modo abaixo do *gap* tem sua energia concentrada nas regiões com $\varepsilon = 13$, resultando numa energia e freqüência mais baixa que a do modo acima do *gap* que tem sua energia concentrada nas regiões com $\varepsilon = 12$.

Os modos acima e abaixo do *gap* podem ser distinguidos pela localização da energia da onda – nas regiões de ε mais elevada ou nas regiões de ε mais baixa. Em geral, as regiões de mais baixa ε são regiões de ar. Por esta razão, a banda acima do gap é

chamada de "banda de ar" e a banda abaixo do *gap*, "banda do dielétrico". A situação é análoga à estrutura de banda eletrônica de semicondutores, na qual o *gap* fundamental localiza-se entre a "banda de condução" e a "banda de valência".

Foi descrita a situação referente ao diagrama de bandas no centro da figura 2.3, para um meio quase uniforme. O mesmo pode ser estendido para o caso da configuração com contraste de constante dielétrica maior (diagrama de bandas à direita da figura 2.3). Neste caso, os campos para ambas as bandas estão fundamentalmente concentrados nas camadas de alta ε , mas de diferentes maneiras – a banda abaixo do *gap* estando mais concentrada do que a banda de cima. O *gap* resulta desta diferença na localização da energia. Conseqüentemente, também para este caso, a banda acima do *gap* é referida como "banda de ar" e a abaixo, "banda do dielétrico".

Em uma dimensão, o *gap* pode ocorrer entre quaisquer conjuntos de bandas, tanto no limite da zona de Brillouin quanto no seu centro, dependendo da simetria da célula unitária da estrutura. A figura 2.7 mostra o diagrama de bandas para uma configuração de múltiplas camadas alternadas também de GaAs e ar, mas com geometria diferente da exemplificada na figura 2.2. No exemplo anterior, as camadas de GaAs e ar estão espaçadas de *a* e têm espessura de 0,5a cada uma. O diagrama da figura 2.7 é para uma configuração de mesmo período *a*, mas espessuras de camadas diferentes: 0,2a para a camada de GaAs e 0,8a para a de ar. Note que o PBG não só depende do contraste de constante dielétrica dos materiais, como ilustrado na figura 2.3, mas também tem dependência forte com a geometria da estrutura.



Figura 2.7 – Diagrama de bandas fotônico de camadas múltiplas com constante de rede *a* e diferentes espessuras. A espessura da camada com $\varepsilon = 13 \text{ é } 0,2a \text{ e a}$ espessura da camada com $\varepsilon = 1 \text{ é } 0,8a$.

10

Finalmente, vale a pena observar que *band gaps* sempre surgem em cristais fotônicos unidimensionais independentemente do contraste das constantes dielétricas. Quanto menor o contraste, menor o *gap*, mas os *gaps* podem surgir bastando que $\varepsilon_1/\varepsilon_2 \neq 1$.

2.2.b. Cristais fotônicos bidimensionais

Cristais fotônicos bidimensionais, periódicos em duas dimensões e homogêneos na terceira, comportam-se de maneira diferente. O gap fotônico surge no plano de periodicidade. Neste caso, o PBG depende não só do contraste de constante dielétrica dos materiais e da geometria da estrutura, mas também da polarização da luz.

O surgimento do *gap* pode ser explicado de forma análoga ao cristal unidimensional: luz atravessando o material será refratada e parcialmente refletida nas interfaces entre os diferentes materiais (ou entre o material e o ar). O padrão complexo da superposição das ondas irá reforçar ou cancelar uma a outra de acordo com o comprimento de onda da luz, sua direção de propagação através do cristal, o índice de refração dos materiais, e o tamanho e arranjo das estruturas (geometria) [23].

Existe um grande número de possíveis células unitárias que formam um arranjo bidimensional com propriedades fotônicas, entretanto vamos nos restringir a dois tipos de estruturas: a de célula cúbica (ou quadrada) e a de célula hexagonal (ou triangular).

Um exemplo de cristal fotônico bidimensional é um arranjo de colunas dielétricas dispostas numa rede quadrada, como mostra a figura 2.8. O arranjo é homogêneo na direção z (cilindros supostos de altura infinita) e periódico no plano x-y com constante de rede *a*. O *inset* à esquerda mostra a rede quadrada vista de cima, com célula unitária destacada em vermelho.



Figura 2.8 – Exemplo de cristal fotônico bidimensional: arranjo em rede quadrada de colunas dielétricas de raio r e constante dielétrica ε .

Para certos valores do espaçamento entre as colunas, este cristal pode apresentar um *gap* fotônico no plano x-y. Dentro do *gap*, nenhum modo de propagação é permitido, e a luz incidente é refletida. Enquanto que o cristal unidimensional reflete luz apenas para incidência normal, o cristal bidimensional pode refletir luz incidente para quaisquer direções no plano.

As simetrias do cristal podem ser utilizadas para caracterizar seus modos eletromagnéticos. Pelo fato de o sistema ser homogêneo na direção z, os modos devem oscilar nesta direção sem restrições no vetor de onda k_z . O sistema tem simetria translacional no plano x-y, especificamente, a constante dielétrica $\varepsilon(\mathbf{r}) = \varepsilon(\mathbf{r} + \mathbf{R})$, onde \mathbf{R} é qualquer combinação linear dos vetores primitivos da rede $a \hat{\mathbf{x}} e a \hat{\mathbf{y}}$. Aplicando o teorema de Bloch [18] podemos analisar apenas os valores de $\mathbf{k}_{t/t}$ restritos à zona de Brillouin.

Se $k_z = 0$, de forma que a onda se propague estritamente no plano x-y, o sistema é invariante por reflexão no plano x-y, o que nos permite classificar os modos separando-os em duas polarizações distintas: transversal-elétrica (TE) para a qual os modos têm **H** normal ao plano, $\mathbf{H} = H(\mathbf{r}) \hat{\mathbf{z}}$, e **E** no plano, $\mathbf{E}(\mathbf{r}) \cdot \hat{\mathbf{z}} = 0$; e transversal-magnética (TM) para a qual os modos têm justamente o reverso: $\mathbf{E} = E(\mathbf{r}) \hat{\mathbf{z}}$ e $\mathbf{H}(\mathbf{r}) \cdot \hat{\mathbf{z}} = 0$.

Os diagramas de bandas para os modos TE e TM podem ser completamente diferentes; pode existir *gap* fotônico para uma das polarizações e para a outra não, e também pode ocorrer PBG para ambas as polarizações simultaneamente, dependendo do tipo de estrutura analisada.

Considere luz propagando-se no plano x-y de uma estrutura como a mostrada na figura 2.8. O diagrama de bandas para um cristal consistindo de hastes de alumina ($\varepsilon = 8.9$) com r/a = 0,2 é mostrado na figura 2.9. Ambas as polarizações TE e TM são indicadas. Ao longo do eixo horizontal o vetor de onda no plano \mathbf{k}_{ll} varre os limites da zona irredutível de Brillouin, de Γ a X a M, como indicado no *inset* da figura 2.9.



Figura 2.9 – Estrutura de bandas fotônica para um arranjo quadrado de colunas dielétricas com r = 0,2a. As curvas em azul representam os modos TM e as em vermelho, os modos TE. O *inset* à esquerda mostra a zona de Brillouin, com a zona irredutível destacada em azul. O *inset* à direita mostra a seção transversal do cristal – os círculos ($\varepsilon = 8.9$) estão dispostos no ar ($\varepsilon = 1$).

O arranjo quadrado tem zona de Brillouin quadrada, mostrada no *inset* da figura 2.9. A zona irredutível de Brillouin é a cunha triangular no canto superior à direita; o resto da zona de Brillouin está relacionado a esta cunha por simetria rotacional. Os três pontos especiais Γ , X e M correspondem, respectivamente, a $\mathbf{k}_{ll} = 0$, $\mathbf{k}_{ll} = \pi/a \,\hat{\mathbf{x}} = \mathbf{k}_{ll} = \pi/a \,\hat{\mathbf{x}} + \pi/a \,\hat{\mathbf{y}}$.

Note que este cristal fotônico tem *band gap* completo para polarização TM (entre a primeira e a segunda banda), mas não apresenta PBG para polarização TE. Estudos mostram que há certa tendência no aparecimento de PBG para polarização TM quando a estrutura é um arranjo do tipo exemplificado, de regiões de material dielétrico isolado (colunas dielétricas em ar), enquanto que há tendência maior de aparecimento de PBG para polarização TE para uma estrutura inversa, uma rede de material dielétrico conectado e regiões isoladas de ar (furos de ar no material dielétrico) [11].

Embora exista essa tendência, como dito anteriormente, para determinado tipo de estrutura pode haver PBG para as duas polarizações simultaneamente. Ajustando as dimensões a rede, pode se fazer com que os *gaps* de ambas polarizações se sobreponham, resultando num PBG completo para ambas polarizações [11][13].

Considere um arranjo triangular de colunas de ar em material dielétrico como o mostrado na figura 2.10.



Figura 2.10 – Cristal fotônico bidimensional de colunas de ar em material dielétrico. As colunas têm raio r e constante dielétrica $\varepsilon = 1$. O *inset* à esquerda mostra a vista de cima da rede triangular, com célula unitária destacada em vermelho. A constante de rede é a.

A estrutura de bandas para esta rede é mostrada na figura 2.11 e, como pode ser visto, tem PBG para ambas as polarizações TE e TM. Há superposição dos *gaps* de cada uma das polarizações para condições particulares: r/a = 0.48 e constante dielétrica $\varepsilon = 13$.



Figura 2.11 – Estrutura de bandas fotônica para um arranjo triangular de colunas de ar em meio dielétrico ($\varepsilon = 13$). O *inset* à esquerda mostra os pontos de maior simetria nos cantos da zona irredutível de Brillouin (destacada em azul).

Outro exemplo de cristal fotônico bidimensional são as chamadas fibras fotônicas. Fibras ópticas convencionais têm núcleo com alto índice de refração e o confinamento de luz é dado por reflexão interna total. Em 1996, Philip St. J. Russel da Universidade de Bath na Inglaterra demonstrou como fazer fibras com *band gap* fotônico [24]. Uma das versões deste tipo de fibra é mostrada na figura 2.12-a – luz se propaga ao longo de um furo central na fibra, confinada por *band gap* do material de periodicidade bidimensional que envolve o núcleo.



Figura 2.12 – Fibras fotônicas (seção transversal): utilizam o princípio de PBG para o guiamento de luz – exemplo de cristal fotônico bidimensional.

Inúmeros trabalhos têm sido realizados na fabricação de filmes finos de cristais fotônicos bidimensionais [25-29]. É alta a viabilidade de se fabricar filmes de cristais fotônicos 2D para aplicação em óptica integrada, uma vez que se pode utilizar técnicas já conhecidas de processos de fabricação de dispositivos planares convencionais.

2.2.c. Cristais fotônicos tridimensionais

O análogo óptico a um cristal real é um cristal fotônico tridimensional – um dielétrico que é periódico nas três dimensões. Pode apresentar PBG para quaisquer direções de incidência da luz, gerando um *band gap* fotônico completo.

Em geral, PBG's tendem a aparecer em estruturas com alto contraste de constante dielétrica entre os materiais do qual é feito o cristal fotônico. Quanto mais significativo o espalhamento da luz, maior a tendência de surgir um *gap*. No entanto, nem toda geometria de estrutura com alto contraste de constante dielétrica apresenta PBG.

Cristais fotônicos tridimensionais que apresentam PBG completo são, na realidade, um tanto quanto raros. É difícil que haja separação entre bandas para todas as três dimensões da zona de Brillouin [11][30]. Por exemplo, a figura 2.13 mostra o diagrama de bandas para uma rede cúbica de face centrada (FCC) de esferas de ar em um meio de alta constante dielétrica ($\varepsilon = 13$). Embora a constante dielétrica seja alta, não há existência de *band gap* fotônico completo. Há um grande espaçamento entre a segunda e a terceira banda em quase toda a região da zona de Brillouin (mostrada na figura 2.14), mas a distribuição das freqüências em torno dos vetores de onda U e W não permitem que o *gap* seja completo.



Figura 2.13 – Diagrama de bandas para os modos de mais baixa freqüência para uma rede cúbica de face centrada de esferas de ar em meio dielétrico com $\varepsilon = 13$. Note a ausência de PBG completo. O vetor de onda varre a zona irredutível de Brillouin de Γ a X, a W, a K, retornando a Γ por X, U e L.



Figura 2.14 – Zona de Brillouin para rede cúbica de face centrada. A rede recíproca é uma rede cúbica de corpo centrado e a zona de Brillouin é um octaedro truncado com centro em Γ. A zona irredutível de Brillouin é o poliedro amarelo de cantos Γ, X, U, L, W e K.

Ho, Chan e Soukoulis foram os primeiros teóricos a prever corretamente uma estrutura tridimensional particular que apresentasse um *band gap* completo [12]. Tal estrutura consiste de esferas em uma rede do tipo diamante. Um PBG completo pode ocorrer tanto para esferas dielétricas suspensas no ar quanto para esferas de ar num meio dielétrico, desde que o raio das esferas seja escolhido apropriadamente.

O diagrama de bandas para a rede de esferas de ar é mostrado na figura 2.15. A fim de maximizar o tamanho do *gap*, o raio r das esferas foi escolhido como sendo 0,325a, onde a é a constante de rede. O *gap* está localizado entre a segunda e a terceira banda.



Figura 2.15 – Diagrama de bandas para uma rede do tipo diamante de esferas de ar em meio dielétrico com $\varepsilon = 13$. O vetor de onda varre a zona irredutível de Brillouin de Γ a X, a W, a K, retornando a Γ por X, U e L, como na rede FCC.

A maior parte desta estrutura é composta de ar (81% do volume total). De fato, o diâmetro das esferas de ar é maior do que a distância entre elas, $0,65a > \sqrt{3}/2a$, logo, as esferas se sobrepõem. Ambas regiões, a de ar e a de material dielétrico, são conectadas, não havendo regiões isoladas de quaisquer um dos meios. O cristal pode, então, ser imaginado como duas redes do tipo diamante interpenetradas, uma composta por esferas de ar conectadas e outra composta pelos restos de material dielétrico conectados.

Como já mencionado, nem toda geometria de estrutura, mesmo com alto contraste de constante dielétrica, apresenta PBG. Para projetar um cristal fotônico, seja ele bi ou tridimensional, se faz necessário determinar os parâmetros geométricos da estrutura de forma que ela apresente *gap* fotônico numa região desejada do espectro. No próximo capítulo serão descritos os métodos utilizados ao longo deste trabalho para o projeto dos cristais bidimensionais.

Todas figuras mostradas neste capítulo, com exceção das figuras 2.4, 2.5 e 2.12, foram retiradas da referência [11].

Capítulo 3

O Projeto

Projetar um cristal fotônico consiste em definir os parâmetros geométricos de uma estrutura para que esta apresente um *gap* fotônico numa região de interesse do espectro eletromagnético. Para isto é necessário dispor de uma ferramenta matemática que faça o cálculo do diagrama de bandas de uma dada estrutura periódica. Assim, analisando o comportamento dos diagramas de bandas é feita uma variação iterativa dos parâmetros geométricos e do índice de refração desta estrutura, visando à obtenção do *gap* fotônico.

3.1. O programa para cálculo dos diagramas de bandas

Para o cálculo do diagrama de bandas utilizamos um programa cedido pelo Prof. Dr. Hugo E. H. Figueroa da Faculdade de Engenharia Elétrica e Computação da Unicamp, baseado no método dos elementos finitos [31-34] no domínio da freqüência, que foi desenvolvido durante a tese de doutorado de Vitaly F. R. Esquerre [35]. Este programa faz o cálculo do diagrama de bandas de estruturas bidimensionais definidas a partir de seus parâmetros geométricos e índices de refração.

O método dos elementos finitos (FEM – *Finite Element Method*) é um método numérico utilizado na resolução de equações diferenciais parciais em domínios finitos. Através de uma discretização dos domínios originais contínuos dos problemas físicos obtém-se sistemas de equações lineares que, em geral, são esparsos e, portanto, de fácil resolução – estas últimas podem ser encontradas utilizando-se técnicas eficientes. É um método preciso e flexível, pois permite analisar estruturas com domínios arbitrários (em particular, geometrias curvas). Além disso, como o método gera matrizes esparsas que são resolvidas de maneira eficiente, há otimização dos recursos computacionais, pois o esforço computacional e o tempo de processamento são diminuídos.

Como estamos interessados em analisar a propagação da luz através das estruturas fotônicas bidimensionais, devemos encontrar soluções para a equação de onda

$$\nabla \times \left(\frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} \nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r})\right) = \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \mathbf{H}(\mathbf{r})$$
 (3)

impondo-se as devidas condições de contorno – lembrando que os cálculos são feitos para uma única célula unitária da estrutura.

O primeiro passo no FEM consiste em se dividir o domínio (célula unitária) em elementos bidimensionais. São utilizados elementos triangulares como os da figura 3.1. Para esta divisão, não deve existir superposição nem buracos entre elementos e estes podem se conectar apenas pelos vértices, não podendo haver conexão entre um vértice de um elemento e um lado de outro. Além disso, deve-se evitar elementos com ângulos internos pequenos, pois o erro é inversamente proporcional ao seno dos ângulos internos [35].



Figura 3.1 – Divisão do domínio em elementos triangulares no FEM 2D.

Uma vez discretizado o domínio, deve-se aproximar a função desconhecida dentro de cada elemento. A partir daí, o método gera as matrizes esparsas cujas soluções numéricas são encontradas.

Para o nosso caso, a inserção da geometria da estrutura (célula unitária) com os respectivos valores de índices de refração dos materiais que compõem o cristal fotônico bidimensional e a geração da malha de elementos triangulares são feitos com a utilização do programa *Geometry and Data* (GiD) [36]. As matrizes são geradas em Fortran e os cálculos para obtenção das soluções numéricas rodam numa plataforma do MatLab [37].

3.2. Representação das Estruturas

Foram analisados dois tipos de estruturas: arranjos periódicos de colunas dielétricas em ar e arranjos de furos de ar em material dielétrico. Em ambos casos, o índice de refração do material é considerado constante e as estruturas de altura infinita. A direção paralela à altura das estruturas é o eixo z e o plano de periodicidade (plano de propagação das ondas eletromagnéticas) é o plano x-y.

Dois tipos de arranjos periódicos foram considerados: o cúbico (quadrado) e o hexagonal (triangular). Esta escolha deve-se ao fato de que ambas geometrias podem ser fabricadas utilizando-se a técnica de litografia holográfica. As figuras 3.2 e 3.3 mostram as células unitárias e correspondentes zonas de Brillouin para o arranjo cúbico e o hexagonal, respectivamente.



Figura 3.2 – (a) Célula unitária (quadrado de lado *a* em destaque) para um arranjo cúbico e (b) respectiva zona de Brillouin. A zona irredutível é a cunha triangular de vértices Γ , X e M.



Figura 3.3 – (a) Célula unitária (paralelogramo de lado *a* em destaque) para um arranjo hexagonal e (b) respectiva zona de Brillouin. A zona irredutível é a cunha triangular de vértices Γ , K e M.

Para os arranjos cúbicos, os diagramas de banda foram calculados para o vetor de onda na zona irredutível de Brillouin (plano x-y) percorrendo o caminho Γ-X-M-Γ. Como pode ser verificado na figura 3.2-b, as coordenadas na rede recíproca são: $\Gamma(0, 0)$, $X(\pi/a, 0)$ e $M(\pi/a, \pi/a)$.

Já para os arranjos hexagonais, os diagramas de banda foram calculados para o vetor de onda na zona irredutível de Brillouin (correspondente a 1/12 da zona de Brillouin), percorrendo o caminho K- Γ -M-K. Pode-se verificar na figura 3.3-b que, para estes pontos as coordenadas na rede recíproca são: K(0, $2\pi\sqrt{3}/3a$), $\Gamma(0, 0) \in M(2\pi/3a, 2\pi\sqrt{3}/3a)$.

As situações até aqui descritas correspondem a estruturas de colunas ou furos cuja seção transversal ("átomos" da rede) possui simetria circular. No entanto, como veremos no capítulo 4, para o arranjo hexagonal, o processo de fabricação por litografia holográfica gera colunas com seção transversal aproximadamente elíptica. Este fato gera uma quebra de simetria na estrutura e as três linhas K-Γ-M-K, não são mais suficientes para representar a zona irredutível de Brillouin para esta rede.

Para representar este caso é necessário adicionar dois novos pontos de simetria do sistema, K' e M', para descrever a zona irredutível de Brillouin, cujas linhas agora representam 1/4 da zona de Brillouin [38]. A figura 3.4 mostra a célula unitária e correspondente zona de Brillouin para um arranjo hexagonal com "átomos" elípticos. As elipses são consideradas com semi-eixo maior duas vezes o semi-eixo menor, pois é, aproximadamente, a razão obtida no processo de fabricação.



Figura 3.4 – (a) Célula unitária (paralelogramo de lado *a*) para um arranjo hexagonal com "átomos" elípticos e (b) respectiva zona de Brillouin. A zona irredutível de vértices Γ , K, M, K' e M' corresponde a 1/4 da zona de Brillouin.

A inserção destes novos pontos de simetria precisou ser introduzida no programa de cálculo de diagrama de bandas [35] para permitir o estudo deste tipo de estrutura. Desta forma, os diagramas de banda puderam ser calculados para o vetor de onda na zona irredutível de Brillouin (plano x-y) percorrendo o caminho M- Γ -K-M-K'- Γ -M'-K'. Como pode ser verificado na figura 3.4-b, as coordenadas correspondentes na rede recíproca são: M($2\pi/3a$, $2\pi\sqrt{3}/3a$), $\Gamma(0, 0)$, K($0, 2\pi\sqrt{3}/3a$), K'(π/a , $\pi\sqrt{3}/3a$) e M'($4\pi/3a$, 0).

3.3. Diagramas de Banda e Mapas de Gap Calculados

Os diagramas de bandas dos diferentes arranjos estudados foram calculados para ambos os estados de polarização da luz, TE e TM. A polarização TE corresponde a modos cujo vetor campo elétrico é paralelo ao plano de periodicidade, plano x-y; e TM corresponde a modos cujo campo elétrico é paralelo ao eixo z.

Os diversos tipos de estruturas fotônicas, descritas na seção anterior, foram analisadas variando-se o índice de refração do material e a geometria dos arranjos – em particular, a razão r/a – razão entre o raio dos cilindros (ou furos) e o período da estrutura. Para o caso dos arranjos com simetria elíptica, as dimensões dos eixos da elipse são variadas, mantendo-se a razão entre elas (semi-eixo maior é o dobro do menor).

3.3.a. Rede cúbica

A figura 3.5 representa o diagrama de bandas calculado para um arranjo de colunas dielétricas de secção circular no ar com a razão entre o raio das colunas e período da estrutura r/a = 0,2, para um material com índice de refração n = 2. Estes valores foram escolhidos porque este é o índice de refração esperado para os filmes de carbono amorfo hidrogenado, utilizados para fabricação das estruturas bidimensionais, e este valor de r/a é realizável utilizando a técnica de litografia holográfica [39]. Como pode ser observado nestes diagramas, não há ocorrência de PBG para polarização TE e, para polarização TM, o PBG aparece para um intervalo estreito de freqüências: $0,46 < (\omega a/2\pi c) < 0,48$ – que corresponde a $0,46 < a/\lambda < 0,48$.



Figura 3.5 – Diagrama de bandas calculado para um arranjo cúbico de colunas dielétricas (n = 2) no ar, com r/a = 0,2: (a) polarização TE e (b) polarização TM.

A partir da análise dos diagramas de bandas calculados para cada conjunto de parâmetros n, r/a, é possível representar estes resultados na forma de um diagrama conhecido com Mapa de *Gap* [11]. Os mapas de *gap*, conforme proposto por Joannopoulos, são interessantes pois permitem avaliar diretamente a largura e posição do PBG em função do parâmetro r/a da estrutura para um dado índice de refração do material dielétrico. Para se construir um mapa de *gap* é necessário obter diagramas de bandas como os mostrados na fígura 3.5. Considerando um determinado material, ou seja, um dado valor de índice de refração, cada diagrama de bandas gerado para um específico valor de r/a fornece um intervalo de freqüências que corresponde ao *gap* fotônico da estrutura. De posse de vários desses diagramas, constrói-se, então, um mapa de *gap*. A figura 3.6 mostra o mapa de *gap* construído para uma rede cúbica de colunas dielétricas de índice de refração n = 2 em função do parâmetro r/a das colunas dielétricas.



Figura 3.6 – Mapa de *gap* para rede cúbica de colunas dielétricas (n = 2) em ar.

Para esta estrutura de colunas dielétricas (n = 2) em rede cúbica, o mapa revela que a posição central do *gap* decresce em freqüência à medida que r/a aumenta. Este é um resultado esperado, pois, como discutido na seção 2.2.a do capítulo anterior, a freqüência é proporcional a $1/\sqrt{\epsilon}$ em um meio de constante dielétrica ϵ , e, quanto maior o valor de r/a, a constante dielétrica efetiva do meio aumenta. Note que para este valor do índice de refração do material, n = 2, há ocorrência de PBG apenas para polarização TM, <u>no</u> <u>intervalo 0,17 < r/a < 0,38</u>. À medida que o índice de refração do dielétrico diminui, a área do *gap* no mapa diminui, até que desapareça completamente para <u>materiais com n < 1.9</u>.

Note que para este tipo de arranjo com um material de n = 2, <u>mão ocorre</u> o aparecimento de *gaps* para polarização TE, independentemente do valor de r/a. O mesmo acontece se substituirmos este material por um de n = 3,4 [11]. Isto indica que para um arranjo de colunas dielétricas isoladas em ar, há uma tendência ao aparecimento de PBG para polarização TM. Entretanto quando a estrutura é formada por furos de ar no material dielétrico (material dielétrico conectado) há tendência no aparecimento de PBG para polarização TE, conforme discutido no capítulo anterior.

Embora este tipo de estrutura possa ser fabricado utilizando-se a técnica de litografia holográfica, sua utilização como um guia fotônico planar não é possível porque o índice de refração efetivo correspondente à camada fotônica (formada por cilindros dielétricos no ar) é muito próximo de 1, portanto, não seria possível haver guiamento de luz

na direção z por reflexão interna total desta camada confinada entre o ar e o substrato – este assunto está discutido em detalhe no Apêndice 1. Por outro lado, como se tratam de cilindros isolados, não seria possível construir uma camada desta estrutura de forma auto-sustentada.

Considerando-se agora a estrutura inversa: arranjo cúbico de furos de ar no dielétrico com n = 2, os diagramas de bandas calculados mostram que <u>há ocorrência de</u> <u>PBG, para polarização TM, apenas para 0,45 < r/a < 0,50</u>. (Note que para r/a > 0,5 os furos já se sobrepõem, gerando uma estrutura de regiões isoladas de material similares ao caso das colunas dielétricas).

Neste caso, embora, para estas condições de r/a o índice de refração efetivo da camada furada de material dielétrico seja próximo de 1, já seria possível construir uma camada auto-sustentada. Entretanto, as geometrias necessárias (0,45 < r/a < 0,50) são de difícil realização utilizando a técnica de litografia holográfica [39].

3.3.b. Rede hexagonal – Colunas com perfil circular

Para o caso de uma estrutura com periodicidade hexagonal (ou triangular), foram analisados também dois casos: arranjos periódicos de colunas dielétricas em ar e arranjos de furos de ar no material dielétrico. A figura 3.7 representa o diagrama de bandas calculado para um arranjo hexagonal de furos circulares de ar em um material com índice de refração n = 2, com r/a = 0,35. Como pode ser observado, o PBG para polarização TE aparece para o intervalo de freqüências $0,37 < a/\lambda < 0,45$; enquanto que, para polarização TM, não há ocorrência de PBG.



Figura 3.7 – Diagrama de bandas calculado para um arranjo hexagonal de furos circulares de ar em material dielétrico com n = 2 e r/a = 0,35: (a) polarização TE e (b) polarização TM.

A figura 3.8 mostra o mapa de *gap* construído para uma rede hexagonal de furos circulares de ar num material com índice de refração n = 2. O raio do furo é r e o período da estrutura, a. Para esta estrutura, o mapa revela que a posição do centro do *gap* cresce em freqüência à medida que r/a aumenta, pois a constante dielétrica efetiva do meio diminui conforme se aumenta o raio dos furos. Conforme pode ser observado neste mapa de *gap*, para n = 2, há ocorrência de PBG apenas para polarização TE, no intervalo 0,20 < r/a < 0,49. E não há *gap* para polarização TM, independentemente do valor de r/a.

Variando-se também o índice de refração e fazendo-se o cálculo dos diagramas de bandas, verificou-se que para arranjos hexagonais com furos circulares de ar <u>ocorre</u> aparecimento de *gap* apenas para materiais com n > 1,6.



Figura 3.8 – Mapa de *gap* para rede hexagonal de furos circulares (n = 2).

Para um material dielétrico de índice de refração n = 2, com furos circulares de ar, temos que o índice de refração efetivo n_{eff} é superior ao índice de refração de um substrato de vidro ($n_s = 1,5$) apenas se a estrutura tiver razão r/a < 0,37. Assim, para satisfazer a condição $n_{eff} > 1,5$ temos que restringir o intervalo de ocorrência do PBG para 0,20 < r/a < 0,37. Este tipo de estrutura permitiria o guiamento direto de luz, podendo ser utilizado diretamente como cristal fotônico (Apêndice 1).

Considerando-se ainda um material com n = 2, mas a estrutura inversa, ou seja, arranjo hexagonal de colunas dielétricas com perfil circular, os diversos diagramas de bandas calculados mostram que há ocorrência de PBG apenas para polarização TE para 0,10 < r/a < 0,44 – intervalo bastante amplo, mostrando grande liberdade quanto à geometria da estrutura no aparecimento de PBG. O índice de refração efetivo da camada de colunas dielétricas, neste caso, é superior ao índice de refração de um substrato de vidro para r/a > 0,37 – assim, temos para 0,37 < r/a < 0,44 valores dentro do intervalo de ocorrência de PBG que satisfazem a condição $n_{eff} > 1,5$. Logo, este tipo de estrutura também permitiria o guiamento direto de luz através do cristal.

3.3.c. Rede hexagonal – Colunas com perfil elíptico

O cálculo dos diagramas de bandas e de mapas de gap mostra que a região de parâmetros r/a onde ocorre PBG (área dos diagramas de mapa de gap) é muito maior para redes hexagonais do que para redes cúbicas. O mesmo acontece em função do índice de

refração, isto é, há ocorrência de PBG para uma faixa mais larga de índices de refração para redes hexagonais do que cúbicas. Isto indica que a geometria hexagonal é mais adequada para a fabricação de cristais fotônicos com PBG. Em particular, a geometria de furos de ar num material dielétrico possui a vantagem de poder apresentar um índice efetivo para a camada maior do que o do substrato, além de poder também ser autosustentada.

A gravação de redes hexagonais, utilizando o processo de superposição de padrões de interferência, resulta, entretanto, em estruturas cuja secção transversal não é circular e sim elíptica (conforme descrito no próximo capítulo). Desta forma, foram feitos nesta seção cálculos de arranjos periódicos de furos de ar com perfil elíptico num material dielétrico. Para as colunas, ou "átomos" elípticos, como são chamados, foi considerado que o semi-eixo maior é igual a duas vezes o semi-eixo menor, pois é, aproximadamente, a razão obtida no processo de fabricação.

Para a análise dos diversos diagramas de bandas, as dimensões dos eixos da elipse foram variadas mantendo-se a razão entre elas (semi-eixo maior é o dobro do menor). Sendo r o semi-eixo maior da elipse, r/2 corresponde ao seu semi-eixo menor e, desta forma, seguiremos tratando as mudanças na geometria da estrutura com a razão r/a.

A figura 3.9 representa o diagrama de bandas calculado para um arranjo hexagonal de furos elípticos de ar em um material com índice de refração n = 2, para r/a = 0,4: o PBG para polarização TE aparece para o estreito intervalo de freqüências $0,36 < a/\lambda < 0,38$; e, para polarização TM, não há ocorrência de PBG. Note que, conforme explicado na seção 3.2, o diagrama de bandas apresenta uma quantidade muito maior de direções, necessárias devido à redução de simetria para o caso do perfil elíptico dos furos (ou colunas dielétricas).

A Figura 3.10 mostra o mapa de gap para o caso de um arranjo hexagonal de furos com perfil elíptico num material de n = 2. Conforme pode ser observado, verifica-se que ocorre o aparecimento de *gap* para polarização TE para 0.32 < r/a < 0.59 e para polarização TM, no intervalo 0.55 < r/a < 0.65. (Note que r/a = 0.65 é o valor limite para o tamanho dos furos, sem que haja sobreposição).





Figura 3.10 – Mapa de *gap* para rede hexagonal de furos elípticos (n = 2).

Considerando-se n = 2, temos que o índice de refração efetivo da camada furada é superior ao índice de refração do substrato utilizado (vidro) para r/a < 0,53 – assim, certos valores de r/a pertencentes aos intervalos de ocorrência de PBG, tanto para polarização TE quanto para TM, satisfazem a condição $n_{eff} > 1,5$. Logo, este tipo de estrutura permite o guiamento direto de luz através do cristal. Sua fabricação por litografia holográfica é viável, uma vez que nosso processo gera estruturas com "átomos" de geometria elíptica.
3.3.d. O Mapa de *Gap* em função do índice de refração do material

O mapa de *gap* é um diagrama muito útil, como veremos na próxima seção, para o projeto de cristais fotônicos. Quando os cristais são gravados em substratos ou camadas semicondutoras, as características do material, como o índice de refração, por exemplo, são muito bem estabelecidas e repetitivas de uma amostra para outra. As constantes ópticas de camadas dielétricas depositadas, entretanto, variam fortemente com as condições de deposição, e podem variar de um dado conjunto de amostras para outro.

Levando este fato em consideração, é interessante sabermos qual o efeito destas variações de índice de refração no PBG. Para isto, construímos, a partir dos diagramas de bandas, um mapa de *gap* em função do índice de refração *n* do dielétrico para uma dada geometria r/a da estrutura.

O mapa de *gap* em função do *n*, é gerado a partir dos diagramas de bandas para um específico valor de r/a, variando-se o *n* do material. A figura 3.11 mostra o mapa de *gap* em função de *n*, construído para uma rede hexagonal de furos elípticos de r/a = 0,37 (razão obtida no processo de fabricação).



Figura 3.11 – Mapa de *gap* para rede hexagonal de furos elípticos (r/a = 0,37).

Para esta estrutura de furos elípticos de ar em rede hexagonal com r/a = 0,37, o mapa revela que a posição em freqüência do centro do *gap* decresce à medida que *n* aumenta – resultado esperado, uma vez que, quanto maior o valor de *n*, a constante

dielétrica efetiva do meio aumenta e as freqüências do gap diminuem pois são inversamente proporcionais à raiz quadrada de ε .

O mapa também mostra que quanto maior *n*, maior a largura do *gap*, o que já foi discutido no capítulo anterior. Assim, quanto maior *n*, mais facilmente ocorrerá o aparecimento do PBG, embora o seu centro se desloque para baixas freqüências. Dessa forma, este mapa de *gap* em função do índice de refração nos fornece informação do quão afastado está um *gap* do previsto, caso o índice de refração do material não seja exatamente o considerado no momento do projeto. Como consideramos para fabricação um material com n = 2, para a construção do mapa de *gap* da figura 3.11, *n* foi variado em torno deste valor.

3.4. Projeto de cristais fotônicos

Uma das principais aplicações dos mapas de *gap* é auxiliar no projeto do cristal fotônico, já que o mapa fornece a localização dos *gaps* em função do parâmetro geométrico r/a, para um dado material. Para exemplificar o uso destes mapas vamos supor que dispomos de um material com n = 2. Para gravarmos neste material um cristal que apresente um gap fotônico, para $\lambda = 1,5\mu$ m, considere o mapa de *gap* da figura 3.8. Para um arranjo hexagonal de furos com secção circular, há ocorrência de PBG apenas para polarização TE, para 0,20 < r/a < 0,49. Considere r/a = 0,35, como indicado no mapa. Para esta geometria, o *gap* é centrado em $\omega a/2\pi c = 0,41$. Como escolhemos $\lambda = 2\pi c/\omega = 1,5\mu$ m:

$$\frac{\omega a}{2\pi c} = \frac{a}{\lambda} = \frac{a}{1.5} = 0.41 \qquad \Rightarrow \qquad a = 0.62 \mu m \tag{4}$$

A escolha do comprimento de onda $\lambda = 1,5\mu$ m implica que a estrutura hexagonal de furos circulares deve ter período $a = 0,62\mu$ m. Como foi considerado r/a = 0,35, o raio dos furos deve estar em torno de $r = 0,22\mu$ m. Como pode ser visto na mesma figura 3.8, o *gap* está no intervalo de freqüências $0,37 < \omega a/2\pi c < 0,45$; que corresponde em comprimento de onda a $1,38\mu$ m $< \lambda < 1,67\mu$ m. Conforme discutido nas seções anteriores, embora redes hexagonais de furos circulares sejam mais apropriadas que redes cúbicas de colunas dielétricas para fabricação de camadas fotônicas ($n_{eff} > 1,5$), o processo de fabricação por litografia holográfica gera estruturas com furos com secção elíptica. Sendo assim, para fabricar um cristal fotônico por litografia holográfica, é necessário utilizar o mapa de *gap* da Figura 3.10 para uma rede hexagonal de furos elípticos.

Neste caso, o mapa de *gap* da figura 3.10 mostra a existência de PBG tanto para polarização TE quanto para polarização TM. No entanto, nosso processo de fabricação não nos permite gerar uma estrutura com geometria de razão *r/a* maior que 0,55 pois os furos já são muito largos, portanto, não é viável a construção de um cristal fotônico com este tipo de estrutura para polarização TM.

Conforme foi observado experimentalmente (e pode também ser simulado) o processo de litografía holográfica das fotorresinas apresenta uma boa repetibilidade numa determinada faixa de razão entre a largura da estrutura e seu período. Para o caso de arranjos cúbicos, a razão ideal entre o raio r do cilindro e o período a da estrutura é em torno de r/a = 0,2 [39]. Para o caso de furos elípticos esta razão $r/a \approx 0,37$ (lembrando que r equivale ao semi-eixo maior da elipse; o semi-eixo menor é r/2).

Desta forma, se fixarmos esta razão $r/a \approx 0,37$, o *gap* (para polarização TE) é centrado em $a/\lambda = 0,36$, como pode ser observado na figura 3.10. Portanto, para haver um *gap* para polarização TE em torno de $\lambda = 1,5\mu$ m:

$$\frac{a}{\lambda} = \frac{a}{1,5} = 0,36 \qquad \Rightarrow \qquad a = 0,54 \mu \text{m} \tag{5}$$

Logo, a estrutura hexagonal de furos elípticos deve ter período $a = 0,54\mu$ m. O semieixo-maior da elipse deve ter dimensões em torno de $r = 0,20\mu$ m (r/a = 0,37) e, conseqüentemente, o semi-eixo menor $r/2 = 0,10\mu$ m. Estruturas nestas dimensões estão na faixa que podem ser gravadas no nosso sistema holográfico.

Na realidade, este estudo é apenas um ponto de partida para a fabricação do cristal fotônico. Embora tenhamos um excelente controle do período das estruturas, e um bom controle da razão r/a na estrutura gravada em fotorresina, a razão r/a no filme dielétrico

depende também do processo de corrosão por plasma. Dependendo da espessura do filme a razão r/a resultante pode ser bem diferente da inicialmente calculada. Desta forma, os parâmetros medidos na estrutura final precisam ser medidos experimentalmente e considerados novamente para estimar a posição e o tamanho do *gap* resultante.

Além disso, erros de processo muito comuns, como, por exemplo, a variação da razão r/a com a espessura do filme (direção z), não podem ser calculados utilizando este programa.

Capítulo 4

Desenvolvimento do Processo de Fabricação

Conforme discutido no final do capítulo anterior, para que possamos ter um cristal fotônico com *gap* em torno de $\lambda = 1,5\mu$ m, o período de uma estrutura em rede hexagonal de furos circulares de ar em material dielétrico (n = 2) deve estar em torno de $a = 0,62\mu$ m. Por sua vez, se a estrutura em rede hexagonal for de furos elípticos, o período deve ser de dimensão $a = 0,54\mu$ m. Para que se possa fabricar uma estrutura com estas dimensões é necessária a utilização de processos de alta resolução, como, por exemplo, a técnica de escrita por feixe de elétrons (*electron-beam*).

O processo de escrita por feixe de elétrons oferece, além da resolução necessária, flexibilidade na fabricação de estruturas bidimensionais que podem ser utilizadas como cristais fotônicos, pois permite a fabricação de padrões arbitrários – incluindo os arranjos cúbicos e hexagonais. Inúmeros trabalhos têm sido realizados na fabricação de filmes finos de cristais fotônicos bidimensionais utilizando-se a técnica de escrita por feixe de elétrons [26][29][40][41].

Em geral, a fabricação de cristais fotônicos 2D utilizando *e-beam* é feita em materiais semicondutores do grupo III-V, como GaAs, InP, AlGaAs e InGaAsP. A utilização destes materiais, operando nas regiões do infravermelho e infravermelho próximo, permite a fabricação de dispositivos ativos. Nestes tipos de dispositivos a medida do PBG é torna-se mais fácil pois não é necessária a injeção de luz [42][43][44]. Por exemplo, a fotoluminescência de *quantum dots* de InAs embebidos no núcleo de uma heteroestrutura de GaAs pode ser excitada e a luz guiada através da estrutura pode ser coletada na saída do dispositivo para análise e verificação de ocorrência do PBG [45].

Embora a técnica de escrita por feixe de elétrons para fabricação de cristais fotônicos em semicondutores seja muito eficiente, o custo destes equipamentos é muito alto. Em particular, no Brasil, não dispomos de facilidades de litografia de alta resolução aliada a facilidades de fabricação, deposição e corrosão de materiais semicondutores num

mesmo laboratório, o que acarreta grande dificuldade em se fabricar cristais fotônicos por esta técnica utilizando tais materiais.

A projeção de padrões de interferência, aliada a técnicas de litografia tem se mostrado uma alternativa interessante para a geração de estruturas periódicas de alta resolução, tanto bi quanto tridimensionais. Áreas de até dezenas de centímetros podem ser gravadas holograficamente, com um custo muito menor do que utilizando escrita por feixe de elétrons.

A interferência de múltiplos feixes tem sido utilizada com sucesso na fabricação de cristais fotônicos tridimensionais [15][46-48] e bidimensionais [16][49], em metais e materiais dielétricos. Embora esta técnica gere perfís de alto contraste em intensidade luminosa, as formas e modulações de profundidade desses perfís são sensíveis a variações relativas de fase entre os feixes – o que complica sua aplicação na geração de perfís uniformes em grandes áreas e o desenvolvimento de um processo de produção adequado [50]. Na interferência de apenas dois feixes, por outro lado, as variações de fase resultam na translação do perfíl luminoso, que, se corrigido [51], não implica em uma alteração significativa dos perfís das estruturas resultantes. Além disso, a interferência de dois feixes não requer condições extremas de alinhamento e colimação de feixes para gerar estruturas uniformes, como é o caso da interferência de múltiplos feixes.

Além do padrão unidimensional obtido pela interferência de dois feixes, é possível gerar estruturas bidimensionais utilizando-se a superposição de dois padrões de interferência [6] e até estruturas tridimensionais, utilizando-se a superposição de três padrões de interferência [52]. Para que estas estruturas possam se comportar como um cristal fotônico, o material no qual as estruturas são gravadas deve ser transparente e apresentar alto índice de refração (constante dielétrica) na região eletromagnética do PBG [53].

Há muitos laboratórios que depositam filmes dielétricos de alto índice de refração e boa qualidade óptica, que podem ser utilizados para gravação de cristais fotônicos 2D. Exemplos destes materiais são: TiO₂, Si₃N₄ e a-C:H. No entanto, para se gravar estruturas em relevo nestes materiais é necessário também se desenvolver um processo de corrosão adequado. Devido à facilidade tanto de deposição como de corrosão de filmes de carbono amorfo hidrogenado (a-C:H) e de nitreto de silício (Si₃N₄) optamos por tentar utilizar estes materiais para fabricação de cristais fotônicos. Existe uma outra tese de mestrado em andamento no Laboratório de Óptica na qual estão sendo feitas outras tentativas de fabricação de cristais fotônicos em filmes de Si amorfo e Si policristalino.

4.1. A deposição dos filmes dielétricos

4.1.a. Nitreto de silício (Si₃N₄)

Os filmes de nitreto de silício foram depositados no Laboratório de Pesquisa em Dispositivos (LPD) – DFA/IFGW da Unicamp, pelo então aluno de mestrado Cleber Biasotto, sob orientação do Prof. Dr. José Alexandre Diniz (DSIF/FEEC). Embora este material se apresentou transparente para uma ampla faixa do espectro eletromagnético, com elevado índice de refração ($n \sim 1,9$) e de boa aderência ao substrato, os testes de corrosões não foram satisfatórios.

Foram utilizadas máscaras de ouro e alumínio em processos de corrosão com plasma de SF₆, e ambas não apresentavam aderência suficiente ao Si₃N₄, o que provocava a ruptura da máscara durante o processo, não permitindo que fossem encontradas as condições adequadas para transferência do padrão desejado ao filme.

Os testes iniciais para desenvolver um processo de corrosão deste material foram feitos juntamente com o Prof. Dr. Marco Antônio Robert Alves (DEMIC/FEEC). A figura 4.1 apresenta resultados de alguns testes de corrosão utilizando uma máscara de ouro de furos circulares com aproximadamente 10μ m de diâmetro. Como pode ser observado, o filme não foi atacado em sua espessura total, até que atingisse o substrato e, além disso, a máscara de ouro não resistiu à corrosão – o que pode ser comprovado pela textura apresentada pela superfície do filme. Uma vez que a corrosão por plasma de SF₆ não ataca o ouro, a maior probabilidade é que este seja um problema de aderência do ouro ao nitreto de silício, o que provoca a descolagem da máscara durante o processo de corrosão.



Figura 4.1 – Corrosões em filmes de Si₃N₄: (a) vista de cima, (b) profundidade do círculo em detalhe e (c) secção transversal: filme não corroído até atingir o substrato. A textura apresentada em toda a superfície do filme indica sua corrosão, provocada pela ausência da máscara em determinado momento durante o processo.

4.1.b. Carbono amorfo hidrogenado (a-C:H)

Os filmes de carbono amorfo hidrogenado foram depositados no Laboratório de Sistema Integráveis (LSI), na Escola Politécnica da USP, junto ao Prof. Dr. Ronaldo Domingues Mansano. A deposição é feita em um sistema de plasma que consiste de um equipamento de *sputtering* (espirramento catódico) reativo que utiliza um alvo de grafite e gases do tipo CH₄ e Ar. A injeção de argônio influencia no índice de refração resultante do filme depositado. Uma das vantagens da utilização deste equipamento é que os filmes depositados podem atingir até alguns microns de espessura [54]. No entanto, os parâmetros ópticos do filme são sensíveis às condições do processo de deposição, em particular, o valor do índice de refração – importante para o projeto dos cristais fotônicos.

A figura 4.2 mostra espectros de transmitância para duas amostras depositadas com as mesmas condições de pressão, potência, vazão de CH₄ e tempo de deposição, exceto porcentagem de injeção de argônio: o espectro da figura 4.2-a é de uma amostra para a qual não houve injeção de Ar ("Série A" – tabela 4.1) durante sua deposição, e o espectro da figura 4.2-b é para uma amostra com 10% de injeção Ar ("Série B"). Como pode ser observado, a figura 4.2-b apresenta maior número de picos de interferência que a figura 4.2-a, o que indica que as espessuras dos filmes de a-C:H são diferentes, embora o tempo de deposição tenha sido o mesmo para ambas – indicando influência da injeção de Ar não só no índice de refração, mas também na espessura dos filmes. Também pode ser verificado que o material é transparente para uma ampla faixa do espectro eletromagnético, atendendo uma das necessidades de utilização deste material para fabricação de estruturas bidimensionais que possam se comportar como um cristal fotônico.



Figura 4.2 – Espectros de transmitância para diferentes amostras de filmes de carbono amorfo hidrogenado sob mesmas condições de deposição, exceto a porcentagem de injeção de Ar: (a) 0% e (b) 10%.

A tabela 4.1 mostra uma relação de dados para algumas das amostras com as quais realizamos os testes de corrosão. A espessura das amostras foi medida diretamente por microscopia eletrônica e o índice de refração medido por dois métodos diferentes: elipsometria e técnica de "*m-lines*".

Série de Amostras	Espessura Média (µm)	Índice de refração
А	1,5	1,75
В	2,3	2,0
С	7,5	1,58

Tabela 4.1 – Dados de amostras de a-C:H utilizadas nos testes de corrosão.

Os parâmetros utilizados no processo de deposição da amostras foram: 5mTorr de pressão, 150W de potência, $0,8\mu$ Torr de pressão de fundo, 40 sccm de vazão de CH₄ e 10% de injeção de Ar (exceto amostras da "Série A"). O tempo de deposição variou de acordo

com a espessura das amostras, observando-se uma taxa média de deposição em torno de 1µm por hora, para a maioria dos casos.

4.2. O processo de litografia holográfica

O processo de gravação holográfica consiste basicamente em expor um filme de fotorresina a um padrão luminoso obtido pela interferência de dois feixes de luz coerentes. O padrão holográfico gerado pela interferência de duas ondas planas corresponde a franjas de interferência (franjas "claras e escuras") cuja intensidade luminosa apresenta variação senoidal ao longo das franjas.

No processo de gravação holográfica utilizado em nosso laboratório o filme de fotorresina é depositado por centrifugação em um *spinner* da Headway Reseach Inc. em lâminas de vidro previamente depositadas com o filme de a-C:H. A espessura da fotorresina é controlada de acordo com sua diluição e ajuste da velocidade do *spinner*. Ao longo deste trabalho foram utilizados dois tipos de fotorresina, a AZ 1518 (Hoescht) e a SC 1827 (Rohm and Haas).

As exposições da fotorresina são realizadas na montagem holográfica esquematizada na figura 4.3, utilizando-se a linha 457,9nm (azul) de um *laser* de argônio, marca Spectra Physics. Para geração das estruturas bidimensionais, as duas exposições holográficas sucessivas são iguais: mesmo padrão luminoso e mesma energia de exposição. Embora as exposições para diferentes amostras possam ser idênticas, o perfil resultante em relevo na fotorresina depende de diversos parâmetros, como: a energia de exposição, o tempo de revelação, concentração e temperatura do revelador, espessura inicial da fotorresina, condições de preparação dos filmes, etc. [6].



Figura 4.3 – Esquema da montagem holográfica utilizada para gravação das estruturas bidimensionais em fotorresina.

Diferentes espessuras do filme de fotorresina podem ser utilizadas para a obtenção de estruturas com diferentes alturas ou razão de aspecto (altura dividida pelo período da estrutura). Para o nosso caso, quanto maior a altura da estrutura resultante, mais eficiente sua utilização no processo de transferência do padrão em resina para o filme de a-C:H. Nesse sentido, também a exposição no azul é interessante, pois permite a gravação de estruturas em relevo com alta razão de aspecto devido à baixa absorção da fotorresina neste comprimento de onda.

O maior problema das exposições holográficas é as perturbações de fase entre as ondas interferentes durante o processo de gravação, causadas por vibrações mecânicas do sistema. Estas perturbações "borram" o padrão gravado na fotorresina, o que impede a gravação de estruturas com alta razão de aspecto. Para realizar a estabilização deste padrão, é utilizado um sistema eletrônico [51]. O sinal de autodifração (detector), utilizado para estabilizar o padrão das franjas de interferência, pode também ser utilizado para monitorar a gravação nos filmes de fotorresina [1][2]. Desta forma é possível gravar estruturas com alto contraste e grande repetibilidade.

A energia das exposições holográficas pode ser utilizada tanto para controlar a linearidade do processo de revelação, quanto para evitar a utilização de tempos de revelação muito pequenos (< 20s) ou exagerados (> 2 min).

O processo de revelação consiste na imersão da amostra já exposta em um revelador apropriado. Ao longo deste trabalho foram utilizados dois tipos reveladores: o AZ 312 MIF (Hoescht), para revelação das estruturas gravadas na fotorresina AZ 1518, e o revelador Microposit 351 (Rohm and Haas), para revelação das estruturas em SC 1827. A agitação da amostra deve ser feita cuidadosamente para garantir a remoção homogênea do material sensibilizado (regiões da fotorresina expostas à luz – "franjas claras"). O tempo de revelação é controlado de forma a obter-se estruturas cuja profundidade atinja o substrato. A caracterização do perfil gravado em relevo na fotorresina é realizada utilizando-se um microscópio eletrônico de varredura (MEV) da Jeol, modelo 5440.

4.3. Superposição de padrões de interferência de duas ondas planas

O padrão holográfico gerado pela interferência de duas ondas planas corresponde a franjas de interferência cuja intensidade luminosa apresenta variação senoidal ao longo das franjas. Se um filme de fotorresina for exposto a dois padrões de interferência, sucessivamente, as regiões do filme de fotorresina serão sensibilizadas seguindo o padrão resultante da soma ou superposição dos dois padrões senoidais de luz incidentes no material. Após a revelação o padrão luminoso resultante da superposição é convertido num padrão em relevo.

As figuras 4.4 e 4.5 mostram uma simulação da superposição de dois padrões de interferência idênticos rotados entre si de 90°, utilizando-se o programa Mathematica. Note que para este ângulo a estrutura resultante é um arranjo bidimensional de picos com o mesmo período de repetição nas duas direções e igual ao período do padrão de interferência. Note também que o padrão obtido na fotorresina é inverso ao padrão de luz, porque se trata de uma resina positiva para a qual as regiões expostas são removidas após a revelação. Para tempos de revelação maiores (figura 4.4-c), as estruturas em fotorresina apresentam uma seção transversal circular, o que também pode ser visto na figura 4.5.



Figura 4.4 – Simulação da superposição de padrões de interferência para rotação de 90° entre duas exposições (estrutura cúbica): (a) padrão de luz, (b) e (c) estruturas resultantes na fotorresina para tempos diferentes de revelação.



Figura 4.5 – Vista superior da simulação da superposição de padrões de interferência para rotação de 90°: (a) padrão de luz e (b) estrutura na fotorresina.

As figuras 4.6 e 4.7 mostram uma simulação feita da superposição de dois padrões de interferência idênticos, para rotação de 60° entre si. Note que neste caso, a estrutura bidimensional resultante apresenta uma simetria hexagonal, cuja periodicidade é agora 1,155 vezes o período do padrão de interferência. Como pode ser observado na figura 4.7, a seção transversal, tanto do padrão luminoso como das estruturas em fotorresina, é aproximadamente elíptica, devido à inclinação (60°) de um dos padrões em relação ao outro.



Figura 4.6 – Simulação da superposição de padrões de interferência para rotação de 60° entre duas exposições (estrutura hexagonal): (a) padrão de luz e (b) estrutura resultante na fotorresina.



Figura 4.7 – Vista superior da simulação da superposição de padrões de interferência para rotação de 60°: (a) padrão de luz e (b) estrutura na fotorresina.

4.4. Estruturas gravadas em fotorresina

No processo de gravação para geração das estruturas bidimensionais com rede cúbica foram utilizadas duas exposições holográficas sucessivas, girando-se a amostra de 90° entre elas. O período *a* da estrutura resultante na fotorresina é igual ao período Λ das franjas de interferência ($\Lambda = a$). A figura 4.8 mostra uma estrutura resultante gravada em fotorresina AZ 1518 para um arranjo cúbico.



Figura 4.8 – Microscopia eletrônica de estrutura cúbica, em fotorresina AZ 1518.

Até o início desta tese de mestrado, haviam sido gravadas no laboratório apenas estruturas bidimensionais com simetria cúbica, utilizando-se rotação de 90° entre as duas exposições. Durante este trabalho, concluímos que a gravação de redes com simetria hexagonal é de maior interesse para fabricação de cristais fotônicos. Por este motivo nos dedicamos a desenvolver um processo que permitisse a obtenção de tais estruturas. Com o uso das simulações e dados da literatura concluímos que era possível gravar estruturas bidimensionais com rede hexagonal, girando-se a amostra com um ângulo de 60°, em vez de 90°. Para realizar esta rotação foi construído um novo suporte no qual a amostra é fixada. A primeira exposição é feita no mesmo suporte utilizado no caso de gravações de redes cúbicas. Para a segunda exposição, é, então, utilizado o novo suporte, projetado de forma que, para esta segunda exposição, a amostra tivesse a rotação de 60° em relação à primeira.

Devido à inclinação de 60° de um dos padrões em relação ao outro, o período da estrutura resultante na fotorresina em rede hexagonal não é o mesmo período das franjas de interferência, como no caso das redes cúbicas. Neste caso, $\Lambda = 0,866a$ (o período das franjas corresponde à altura dos triângulos formados pelas estruturas em relevo). A figura 4.9 mostra uma estrutura resultante em fotorresina AZ 1518 para um arranjo hexagonal.



Figura 4.9 – Microscopia eletrônica de estrutura hexagonal (triangular), em fotorresina AZ 1518. Em destaque, os períodos da estrutura (*a*) e o correspondente ao das franjas de interferência do padrão luminoso (Λ).

A estrutura mostrada na figura 4.9 foi gravada em fotorresina AZ 1518. O período das franjas de interferência utilizado neste caso foi $\Lambda = 1 \mu m$, gerando uma estrutura com período de aproximadamente $a = 1,15 \mu m$. No capítulo 3, vimos que para uma estrutura hexagonal apresentar *gap* fotônico em $\lambda = 1,5 \mu m$ precisamos de um período $a = 0,54 \mu m$ e, portanto, o período das franjas de interferência utilizado nas gravações holográficas deste tipo de estrutura deve estar em torno de $\Lambda = 0,46 \mu m$. Note que se trata de um período extremamente pequeno e, praticamente, no limite do nosso sistema holográfico que utiliza a linha 458nm de um *laser* de Ar.

Os vários testes realizados em fotorresina AZ 1518 para gravações holográficas com $\Lambda = 0,46\mu$ m não foram satisfatórios pois geravam estruturas pouco profundas, inviabilizando sua utilização no processo de transferência do padrão em resina para o filme de a-C:H. A figura 4.10 mostra estruturas obtidas com a fotorresina AZ 1518 para gravações utilizando $\Lambda = 0,46\mu$ m. Note que para as estruturas bidimensionais (4.10-b) as bases das colunas mostram-se conectadas, impossibilitando sua utilização no processo para obtenção dos furos no filme de carbono ("*lift-off*"). O processo de *lift-off* será discutido na próxima seção.



Figura 4.10 – Estruturas em fotorresina AZ 1518 para Λ = 0,46μm:
(a) unidimensional e (b) bidimensional – hexagonal. As estruturas não são suficientemente profundas para garantir o processo de *lift-off*.

Dessa forma, foi necessária a aquisição de uma nova fotorresina (SC 1827), sensível também no azul, mas com maior resolução (que permitisse a gravação de estruturas menores). Os testes na nova fotorresina mostraram-se bastante satisfatórios. A figura 4.11 mostra estruturas obtidas com a fotorresina SC 1827, utilizando um filme com 0,6 µm de espessura, para gravações utilizando um período das franjas de interferência de $\Lambda = 0,46$ µm. Note que para as estruturas bidimensionais (4.11-b) as colunas se apresentam isoladas, não havendo conexão entre bases, resultando em perfis que garantem o processo de *lift-off*.



Figura 4.11 – Estruturas em fotorresina SC 1827 para $\Lambda = 0,46\mu$ m: (a) unidimensional e (b) bidimensional – hexagonal. As estruturas têm perfil que garante o processo de *lift-off*.

Utilizando esta mesma espessura de filmes de SC 1827 e este mesmo período das franjas de interferência $\Lambda = 0,46\mu$ m foram feitas várias gravações holográficas de estruturas hexagonais. A figura 4.12 mostra a estrutura resultante em fotorresina SC 1827 utilizando energia de exposição de 355mJ (ambas exposições), reveladas durante 1 minuto no revelador AZ 351, diluído 1: 4 em água deionizada. As estruturas têm $a = 0,54\mu$ m e seção transversal aproximadamente elíptica, com eixo maior igual a aproximadamente 0,4 μ m, enquanto que o eixo menor é aproximadamente igual a metade (0,2 μ m), o que resulta num $r/a \approx 0,37$ (com r = semi-eixo maior). Estes dados foram utilizados no projeto do cristal.



Figura 4.12 – Estrutura hexagonal resultante em fotorresina SC 1827 utilizando energia de 355mJ para ambas exposições e tempo de revelação de 1 minuto. Os parâmetros geométricos estão em concordância com os utilizados no projeto do cristal fotônico em carbono amorfo hidrogenado.

Note na figura 4.12 que a estrutura em SC 1827 apresenta paredes bem verticais e o topo mais largo do que a base. Este tipo de perfil indica que a revelação está ocorrendo em condições de grande não linearidade. Observe também que as estruturas obtidas apresentam uma razão de aspecto (razão entre a altura e o eixo menor da elipse) em torno de 3, valor que pode ser considerado bastante elevado, o que facilita o processo de *lift-off*. Além disso, as amostras gravadas nestas condições apresentaram uma excelente homogeneidade ao longo de toda a área da amostra (substrato de vidro quadrado de 2,5 cm de lado) e o processo se mostrou bastante repetitivo.

4.5. Transferência do padrão em fotorresina para o filme de a-C:H

4.5.a. Utilizando máscara de SiO₂

A estrutura em relevo gravada em fotorresina pode ser utilizada como máscara para litografia em diferentes substratos ou filmes. Nesta seção, descreveremos a transferência do padrão da fotorresina em filmes de carbono amorfo hidrogenado, a-C:H, por corrosão por plasma reativo (RIE – *Reactive Ion Etching*).

A corrosão do a-C:H utiliza plasma de O_2 . No entanto, o plasma de O_2 também ataca a fotorresina, o que dificulta sua utilização como máscara direta na transferência do padrão em relevo para o filme, no caso de estruturas profundas. Faz-se, então, necessária a utilização de uma máscara intermediária de alta seletividade (razão entre a taxa de ataque do filme e a taxa de ataque da máscara).

No processo de transferência do mesmo padrão da fotorresina para o filme de a-C:H foi utilizada máscara intermediária de SiO₂. De posse do filme de a-C:H, já depositado no substrato de vidro, uma fina camada (< 200nm) de SiO₂ foi depositada previamente à deposição da fotorresina, de forma a termos a disposição: substrato, a-C:H, SiO₂, fotorresina, como mostra a figura 4.13. A máscara intermediária de SiO₂ foi depositada no Laboratório de Pesquisa em Dispositivos (LPD) – DFA/IFGW da Unicamp pelo técnico Antônio Augusto Von Zuben.



Figura 4.13 – Esquema da disposição dos filmes de a-C:H, SiO₂ e fotorresina sobre o substrato para utilização no processo de litografia.

A amostra esquematizada na figura acima foi então levada para que fossem realizadas as exposições holográficas. Neste caso, foram gravadas estruturas cúbicas de períodos de 1µm, como a mostrada na figura 4.8 da seção anterior. As gravações foram feitas em fotorresina AZ 1518 utilizando energia de exposição de 300mJ (ambas

exposições) e tempo de revelação de 40s (revelador AZ 312 MIF – diluído 1:1 em água deionizada).

De posse das estruturas em fotorresina, a amostra foi submetida inicialmente a um ataque por plasma reativo de CH_4 para que o padrão da fotorresina fosse transferido primeiramente para a camada de SiO_2 . As condições de corrosão utilizadas foram: 100W de potência de r.f., 100 sscm de vazão de CH_4 e 11 minutos de duração.

Uma vez transferido o padrão em relevo da fotorresina para o SiO₂, a amostra foi novamente submetida a um ataque por plasma reativo, desta vez de O₂, para transferência do padrão para o filme de a-C:H. As condições de corrosão aqui utilizadas foram: 60W de potência de r.f., 10^{-1} mbar de pressão de O₂ e 32 minutos de duração. A figura 4.14 mostra a estrutura resultante no filme de a-C:H. As pequenas estruturas de coloração mais escura no topo das colunas de a-C:H são a máscara intermediária de SiO₂.



Figura 4.14 – Estrutura cúbica resultante em a-C:H, após as corrosões: (a) vista lateral e (b) vista superior. O período da estrutura é $a = 1 \mu m$.

Embora a corrosão tenha se dado em toda a espessura do filme de a-C:H, notam-se resíduos do material entre as estruturas. Foram feitas tentativas de remoção de tais resíduos, sem sucesso.

As condições de corrosão aqui apresentadas foram, dos diversos testes feitos, as que apresentaram maior anisotropia no ataque, implicando em estruturas com paredes verticais. Todas elas foram realizadas no Laboratório de Plasma da FEEC da Unicamp, junto ao Prof. Marco Antônio R. Alves.

4.5.b. *Lift-off*

Uma outra possibilidade de utilização da estrutura em relevo gravada em fotorresina é no processo de *lift-off*. Um esquema geral deste processo está mostrado na Figura 4.15. Este processo gera no filme de carbono a estrutura inversa do padrão da fotorresina, ou seja, gera furos no material ao invés de colunas. Com base no projeto descrito no capítulo anterior, foi este o processo utilizado na obtenção dos cristais fotônicos bidimensionais.



Figura 4.15 – Esquema geral do processo de *lift-off* utilizado para fabricação das estruturas bidimensionais nos filmes de a-C:H.

A transferência do padrão inverso ao da fotorresina nos filmes de carbono amorfo hidrogenado, por corrosão por RIE, foi feita utilizando-se máscara intermediária de alumínio. A máscara intermediária de Al (50-100nm de espessura) foi depositada por evaporação térmica, também no LPD – DFA/IFGW pelo técnico Antônio Von Zuben.

O processo de *lift-off* requer estruturas em fotorresina como as obtidas para a fotorresina AZ 1827 (figura 4.16) – um tanto quanto altas e de paredes bem verticais: de posse da estrutura em fotorresina gravada sobre o filme de a-C:H a amostra é levada para que seja feita a deposição do alumínio; como o processo de evaporação térmica utilizado é

bem direcional (verticalmente), ocorre deposição de Al apenas no topo das estruturas e entre elas, sem que haja deposição nas paredes.



Figura 4.16 – Estrutura hexagonal em fotorresina SC 1827. As estruturas de paredes verticais garantem o processo de *lift-off*. Note a presença de um padrão vertical de ondas estacionárias formado devido à reflexão das ondas interferentes no filme.

A fotorresina é então removida obtendo-se a estrutura inversa no filme de Al: um padrão hexagonal de furos (figura 4.17). Se as estruturas em fotorresina não tiverem paredes verticais, o alumínio recobrirá a estrutura como um todo no momento de sua deposição, impossibilitando a posterior remoção da resina. Note que os furos elípticos gravados na máscara de alumínio apresentam dimensões ligeiramente menores do que as das estruturas em fotorresina, porque conforme visto nas figuras 4.12 e 4.16, a base das estruturas em fotorresina são mais estreitas do que seu topo. Esta máscara de furos em alumínio é então utilizada no processo de corrosão por plasma reativo de O₂, para transferência do padrão para o filme de a-C:H.



Figura 4.17 – Estrutura resultante na máscara de alumínio após remoção da fotorresina: padrão hexagonal de furos. À direita: notam-se algumas colunas em fotorresina (tombadas) que não foram removidas – defeitos na máscara.

Desta vez, as corrosões foram feitas no mesmo local onde os filmes de a-C:H foram depositados: LSI-EPUSP, junto ao técnico Nelson Ordonez, em colaboração com o Prof. Dr. Ronaldo Mansano. As condições de corrosão utilizadas foram: 100W de potência, 50 sccm de O₂, 100mTorr de pressão. O tempo de duração variou de acordo com a espessura dos filmes. A figura 4.18 mostra uma estrutura resultante obtida no filme de a-C:H.



Figura 4.18 – Estruturas hexagonais resultantes em a-C:H, após corrosões: (a) e (b) secção transversal e (c) vista superior. O período das estruturas é $a = 0.54 \mu m$.

A figura 4.18-c mostra uma estrutura em filme de a-C:H com período $a = 0,54\mu$ m e furos aproximadamente elípticos, de semi-eixo maior aproximadamente igual ao dobro do menor e parâmetro $r/a \approx 0,37$. Entretanto, como pode ser observado na microscopia da secção transversal desta amostra (figura 4.18-a), para estas condições e tempo de corrosão de 10 minutos, os furos atingiram apenas uma profundidade em torno de 1,5 μ m, enquanto que o filme de carbono tinha espessura em torno de 2,3 μ m. Note que para esta profundidade de 1,5 μ m as paredes dos furos se apresentam bem verticais (figuras 4.18-a e 4.18-b).

Quando esta mesma série de amostras foi submetida a novas corrosões, aumentando-se o tempo de corrosão com objetivo de se atacar o filme em toda sua espessura, as dimensões e formas dos furos elípticos foram bastante alteradas (figura 4.19-c), assim como apresentaram um afunilamento, como mostram as figuras 4.19-a e 4.19-b. Na figura 4.19-c, pode-se fazer a comparação das dimensões dos furos na máscara de alumínio (à esquerda) com os furos obtidos no a-C:H.



Figura 4.19 – Estruturas hexagonais resultantes em a-C:H, após corrosões: (a) e (b) vista lateral sem máscara de Al e (b) vista superior com a comparação entre os furos na máscara de Al e os obtidos no filme de a-C:H.

Como pode ser observado, para filmes de a-C:H muito espessos, o processo de corrosão alterou significativamente os parâmetros geométricos das estruturas: ocorreu um alargamento dos furos na parte superficial do filme e, além disso, o semi-eixo maior das elipses já não corresponde ao dobro do semi-eixo menor. Essa alteração da geometria das estruturas resultantes nos filmes de carbono teve que ser re-inserida no programa para o cálculo do diagrama de bandas para avaliação das mudanças no PBG. Os resultados dos cálculos mostraram a mudança da razão entre os eixos da elipse tem maior influência sobre o PBG do que o alargamento dos furos, a ponto de a estrutura com as dimensões apresentadas na figura 4.19-c não apresentarem mais *gap* fotônico.

Além da alteração da geometria dos furos, nota-se a não verticalidade das paredes, havendo estreitamento dos furos em direção ao substrato. Como essa condição não pode ser levada em consideração em nossos cálculos dos diagramas de banda, não há como avaliar teoricamente sua influência no PBG. Também não é possível avaliarmos teoricamente a influência de termos uma espessura finita nas camadas de cristais fotônicos bidimensionais, embora alguns trabalhos mostrem que é possível considerar este efeito [25][55].

A única forma de verificar a validade dos cálculos dos projetos, assim como a influência dos erros experimentais no processo de fabricação é fazendo-se a medida do *gap* fotônico da estrutura. É interessante, também, que possam ser realizadas medidas de referência, construindo-se no mesmo substrato um guia convencional com as mesmas dimensões do guia planar fotônico.

Uma das formas de se verificar a existência do PBG é fazendo-se a medida do espectro de transmitância da luz guiada através destas estruturas. Uma vez que trabalhamos com filmes dielétricos – materiais não-ativos – a medida de luz guiada requer sistemas ópticos dedicados [56][57]. Alguns dos esforços feitos durante este trabalho de mestrado para desenvolver um sistema que permitisse medidas em modo guiado estão descritos no Apêndice 2. A maior dificuldade deste tipo de medida está em se realizar o acoplamento da luz da fonte dentro do guia fotônico, e, conseqüentemente, coletar o sinal na saída.

Outra técnica de verificação de ocorrência de *gap* fotônico para estruturas bidimensionais é a medida do espectro de refletividade da estrutura planar. Luz polarizada é incidida na amostra, em diferentes ângulos, ao longo das direções de maior simetria do cristal (definidas pela zona irredutível de Brillouin). O acoplamento de modos no guia planar, em determinados ângulos, gera picos ou pequenos vales (*"sharp features"*) no espectro de refletividade das amostras que permitem a identificação de bandas de energia do cristal [58]. A vantagem desta técnica é que a luz incide de cima sobre a camada fotônica e não necessita ser guiada através da camada, entretanto, requer detectores muito sensíveis. Por este motivo estamos tentando interagir com a Profa. Domenique Coquillat, do *Groupe d'Etude des Semiconducteurs*, na França, que utiliza a técnica de medida do espectro de refletividade descrita em [58], para onde enviamos as amostras mostradas na figuras 4.18 e 4.19.

Capítulo 5

Conclusões e Perspectivas

Ao longo deste trabalho de mestrado foram utilizadas técnicas de exposições holográficas, associadas à litografia, para fabricação de cristais fotônicos bidimensionais em filmes de carbono amorfo hidrogenado. Para que uma estrutura periódica apresente a propriedade de *gap* fotônico em uma determinada região do espectro eletromagnético é necessário definir a priori seus parâmetros ópticos e geométricos, assim como após a fabricação é preciso reavaliar se os erros de processo modificaram suas propriedades fotônicas.

As propriedades fotônicas das estruturas periódicas bidimensionais foram analisadas através dos cálculos dos diagramas de bandas realizados utilizando um programa baseado no método dos elementos finitos no domínio da freqüência.

Utilizando este programa foram analisados dois tipos de estruturas bidimensionais: arranjos periódicos de colunas dielétricas em ar e arranjos de furos de ar em material dielétrico. Para ambos casos, foram considerados dois tipos particulares de geometria: a cúbica (quadrada) e a hexagonal (triangular). Em todos os cálculos feitos, o índice de refração do material é considerado constante e as estruturas bidimensionais de altura infinita.

Para os arranjos em rede cúbica, as estruturas de colunas ou furos foram consideradas com secção transversal circular. Para o arranjo hexagonal, foram tratados dois casos distintos: estruturas de colunas ou furos com secção transversal circular e elíptica. Para os cálculos dos diagramas de banda das estruturas com secção transversal elíptica foi necessário adicionar dois novos pontos de simetria do sistema, K' e M', porque, devido à quebra de simetria, as três linhas K-Γ-M-K que representam a zona irredutível de Brillouin para o caso de redes hexagonais de estruturas com secção transversal circular, não são mais suficientes. Esta modificação teve que ser incluída no programa porque os arranjos

hexagonais, gravados através da superposição de exposições holográficas, resultam em colunas ou furos com secção transversal elíptica.

Para o cálculo dos diagramas de bandas variou-se o índice de refração do material e a geometria dos arranjos – em particular, a razão r/a, razão entre o raio dos cilindros (ou furos) e o período da estrutura. Para o caso dos arranjos com simetria elíptica, as dimensões da elipse foram variadas, mantendo-se a razão entre semi-eixo maior e o semi-eixo menor da elipse constante e igual a 2.

Os resultados dos cálculos mostraram que ocorre o aparecimento de *gap* para <u>redes</u> <u>cúbicas</u> de cilindros de materiais dielétricos com índice de refração n > 1,9. Em particular, para o índice de refração <u>n = 2, há ocorrência de PBG apenas para polarização TM, no</u> <u>intervalo 0,17 < r/a < 0,38</u>. Estas estruturas, entretanto, apresentam índice de refração efetivo n_{eff} menor que o índice de refração n_s do substrato utilizado, portanto, não permitem o guiamento de luz direto através do cristal, podendo apenas ser utilizadas como casca.

<u>Redes hexagonais</u> formadas por furos circulares de ar apresentam *gap* para materiais com n > 1,6. Em particular, <u>para n = 2, há ocorrência de PBG apenas para</u> <u>polarização TE, no intervalo 0,20 < r/a < 0,49</u>. Neste caso, para determinados valores de r/a temos $n_{eff} > n_s$, e estas estruturas podem ser utilizadas como guias planares fotônicos. E ainda, para que o *gap* seja centrado em $\lambda = 1,5\mu$ m esta rede deve ter período $a = 0,62\mu$ m. Por outro lado, <u>redes hexagonais com furos elípticos</u> em filmes <u>com n = 2 apresentam PBG</u> <u>para polarização TE no intervalo 0,32 < r/a < 0,59 e, para polarização TM, no intervalo 0,55 < r/a < 0,65. Como para determinados valores de r/a temos $n_{eff} > n_s$, estas estruturas também podem ser utilizadas como guias planares fotônicos. Neste caso, para que o *gap* para polarização TE, seja centrado em $\lambda = 1,5\mu$ m, esta rede deve ter período $a = 0,54\mu$ m.</u>

Foi, então, desenvolvido um processo para gravação de estruturas hexagonais em fotorresina com período de 540nm, utilizando duas exposições sucessivas de padrões de interferência de duas ondas planas de 460nm de período, girando-se a amostra de 60° entre as exposições. A estrutura resultante, gravada na fotorresina SC 1827, foi um arranjo hexagonal de colunas com período de 540nm e secção transversal elíptica, com o eixo maior igual a 400nm e eixo menor, 200nm. Estas dimensões correspondem a um r/a = 0,37. As estruturas apresentaram uma razão de aspecto (altura da coluna/semi-eixo menor)

aproximadamente igual a 3, com uma excelente homogeneidade e repetibilidade numa área de 2,5 cm de lado.

Utilizando o processo de *lift-off* com deposição de alumínio e posterior corrosão a plasma de O_2 estes padrões foram transferidos com sucesso para filmes de carbono amorfo. Nossos resultados mostraram que para filmes de carbono amorfo com até 1,5µm de espessura, este processo não gera grandes variações nas dimensões dos furos, tanto em profundidade quanto em relação às dimensões originais das colunas de fotorresina. Para espessuras maiores do que esta, entretanto, o processo de corrosão provoca um alargamento dos furos na parte superior do filme enquanto que ocorre um estreitamento no fundo. Além disso, o processo altera a razão entre os semi-eixos elípticos da secção transversal dos furos. Segundo simulações das estruturas resultantes, esta alteração na geometria dos furos tem um efeito mais crítico no *gap* fotônico do que o alargamento dos furos mantendo-se sua forma.

No entanto, a única forma de verificar a validade dos cálculos dos projetos, assim como a influência dos erros experimentais no processo de fabricação é fazendo-se a medida do PBG. Esta medida pode ser feita diretamente através da medida do espectro de transmitância da luz através do cristal na direção do plano x-y (isto é, perpendicular às colunas). Entretanto, como fabricamos filmes dielétricos passivos, precisamos medir a luz guiada através desta camada. Para isto é necessário fazer o acoplamento da luz de uma fonte policromática ou sintonizável no guia e depois detectar o sinal na saída do guia com um analisador de espectro ou espectrômetro. Para camadas muito finas (da ordem de 1 μ m) isto requer a construção de um sistema dedicado e o uso de posicionadores de precisão, além de técnicas refinadas para acoplamento e desacoplamento do sinal. Foram feitas algumas tentativas nesse sentido, mas que não tiveram sucesso devido a diversos tipos de dificuldades experimentais. Desta forma, para a medida do PBG estamos analisando outras possibilidades, como, por exemplo, a medida do espectro de refletividade. A vantagem desta técnica, é que a luz incide sobre a amostra por cima (em ângulo), sem haver a necessidade de guiamento.

Apêndice 1 – Índice de Refração Efetivo da Camada

Uma vez que para os cristais bidimensionais há ocorrência de PBG apenas no plano de periodicidade, para que uma quantidade expressiva de luz se propague numa camada fina de cristal fotônico, a luz precisa ser confinada nesta fina camada para ser guiada através da estrutura. Para isto, é necessário que nas regiões limítrofes da camada, na direção perpendicular ao plano de periodicidade (direção z), haja reflexão interna total. Dessa forma, o índice de refração da camada fotônica precisa ser maior que o índice de refração do substrato utilizado.

No caso de estruturas em relevo, como as camadas de cristais bidimensionais, quando o comprimento de onda da luz incidente é maior que o período da estrutura, esta se comporta como um meio cujo índice de refração é uma média ponderada pelo volume entre o índice de refração do material e o do ar [8]. Dessa forma, uma estrutura em camada de colunas dielétricas com índice de refração n_{ε} dispostas no ar ($n_{ar} = 1$) pode ser considerada como uma monocamada de mesma espessura que a altura das colunas cujo índice de refração efetivo n_{eff} é dado por:

$$n_{eff} = \left(\frac{\mathbf{V}_{\varepsilon}}{\mathbf{V}_{tot}}\right) n_{\varepsilon} + \left(\frac{\mathbf{V}_{ar}}{\mathbf{V}_{tot}}\right) n_{ar} \qquad \text{ou} \qquad n_{eff} = \left(\frac{\mathbf{V}_{\varepsilon}}{\mathbf{V}_{tot}}\right) n_{\varepsilon} + \left(1 - \frac{\mathbf{V}_{\varepsilon}}{\mathbf{V}_{tot}}\right) n_{ar} \qquad (I)$$

onde V_{ϵ} e V_{ar} são, respectivamente, os volumes ocupados pelo material dielétrico e pelo ar e V_{tot} é o volume total da camada. (Note que $V_{ar} = V_{tot} - V_{\epsilon}$).

Sendo a espessura da monocamada igual às espessuras das estruturas compostas pelo material e pelo ar, a expressão (I) pode ser descrita considerando-se apenas as áreas ocupadas por ambos, e os cálculos podem ser restritos a uma única célula unitária:

$$n_{eff} = \left(\frac{A_{\varepsilon}}{A_{tot}}\right) n_{\varepsilon} + \left(1 - \frac{A_{\varepsilon}}{A_{tot}}\right) n_{ar}$$
(II)

onde A_{tot} é a área total da célula unitária da rede cúbica e A_{ϵ} é a área ocupada pelo dielétrico dentro da célula unitária.

Considerando-se um material com n = 2, o índice de refração efetivo de uma camada de colunas dielétricas em ar só é superior ao índice de refração de um substrato de vidro para r/a > 0,40 ($n_{eff} > 1,5$: condição para que haja guiamento de luz na monocamada). Como para este tipo de estrutura há ocorrência de PBG apenas para 0,17 < r/a < 0,38, para quaisquer valores de r/a neste intervalo o $n_{eff} < 1,5$. Logo, colunas dielétricas cúbicas não permitem o guiamento direto de luz através do cristal, podendo apenas serem utilizadas como casca, como representado na figura 1.



Figura 1 – Guia de canal: o confinamento de luz na direção z é por reflexão interna total, e o confinamento lateral (plano x-y) é via PBG do cristal fotônico bidimensional utilizado como casca do dispositivo.

Ainda levando-se em consideração que n = 2, temos que o índice de refração efetivo de uma camada de furos elípticos de ar, dispostos em rede hexagonal, é superior ao índice de refração do substrato utilizado para r/a < 0,53. Como para este tipo de estrutura há ocorrência de PBG para polarização TE no intervalo 0,32 < r/a < 0,59; e, para polarização TM, 0,55 < r/a < 0,65, certos valores de r/a pertencem aos intervalos de ocorrência de PBG, tanto para polarização TE quanto para TM, que satisfazem a condição $n_{eff} > 1,5$. Logo, este tipo de estrutura pode permitir o guiamento direto de luz através do cristal, como representado na figura 2.



Figura 2 – Estruturas hexagonais com furos permitem o guiamento direto através do cristal, sendo mais apropriadas para fabricação de camadas fotônicas.

Apêndice 2 – Sistema para Acoplamento de Luz na Camada

A forma direta de se realizar a medida do PBG de uma estrutura bidimensional é medir o espectro de transmitância da luz através do cristal no plano de periodicidade das estruturas (plano x-y). Como fabricamos filmes dielétricos não ativos, é necessário medir a luz guiada através da camada. Para isto, é necessário se injetar luz de uma fonte policromática ou sintonizável no guia e depois detectar o sinal na saída da camada com um analisador de espectro ou espectrômetro.

Quando se tratam de camadas muito finas (da ordem de 1 µm), para o acoplamento de luz e a detecção do sinal na saída, é necessária a construção de um sistema dedicado e o uso de posicionadores de precisão. Dessa forma, no início deste trabalho de mestrado foi montado um sistema (mostrado na figura 1) composto de uma fonte de luz branca, posicionadores de fibras ópticas e um microscópio. A luz da fonte de luz branca é acoplada em uma fibra óptica por meio de uma lente. A saída da fibra, fixada num posicionador micrométrico x-y-z, é aproximada o máximo possível do guia planar para otimizar o acoplamento de luz. Foi colocado um sistema posicionador micrométrico, idêntico ao de entrada, para posicionar uma outra fibra na saída do guia. Tudo isto foi montado juntamente com um microscópio óptico, necessário para visualizar o alinhamento entre as fibras e a amostra (guia planar). Como o campo visual do microscópio é pequeno e não conseguimos visualizar toda a amostra, tivemos que projetar e adaptar um sistema de translação (x-y-z) para o microscópio, independente da amostra e dos dois posicionadores de fibra. O motivo de transladar o microscópio e não a amostra é que uma vez feito o acoplamento da luz da fibra de entrada com o guia, se movermos a amostra, perde-se todo o acoplamento.

Utilizando este sistema, tivemos êxito em injetar luz de um *laser* de He-Ne em guias de canal gravados em fotorresina, entretanto, não tivemos sucesso no acoplamento utilizando a fonte de luz branca.

O maior problema encontrado foi o excesso de luz que passava em torno da amostra sem ser guiada. Fibras ópticas monomodo têm núcleo de dimensões 9µm, enquanto que nossos guias planares fabricados têm dimensões da ordem de 1µm de espessura. O cone de luz que sai da fibra óptica e atinge o filme é extremamente grande se comparado à espessura do guia. Dessa forma, a luz que passa sobre a amostra (luz "vazada") ou que era guiada pelo substrato, gerava um sinal muito superior ao sinal de luz guiada no filme, não sendo possível sua diferenciação. Uma alternativa para eliminar este problema foi substituir as fibras convencionais de secção reta por fibras cujas pontas são na forma de cone, feitos por meio de um estiramento da ponta da fibra. Este estiramento provoca afunilamento das extremidades da fibra, diminuindo as dimensões do núcleo. No entanto, isso não foi suficiente para a eliminação do problema, ainda assim o sinal de luz não guiada na camada não permitia a detecção do sinal de luz que efetivamente atravessava a estrutura. Também foram feitos testes de injeção de luz no guia planar utilizando-se lentes para focalizar a luz no guia, sem obtermos sucesso.



Figura 1 – Montagem experimental utilizada nas tentativas de medida do PBG para as estruturas bidimensionais fabricadas.

Além do cone de luz, outro problema que dificultou o acoplamento foi o fato de os posicionadores da fibra do sistema terem pouca resolução. Por este motivo, tentamos utilizar um outro sistema mais preciso para acoplamento com posicionadores piezoelétricos no Laboratório do Prof. Newton Frateschi, no LPD (Laboratório de Pesquisa em Dispositivos) do DFA/IFGW. Neste sistema utilizamos um laser semicondutor ($\lambda = 1,5\mu m$) ao invés da luz branca, e uma fibra com micro-lente para fazer o acoplamento. Entretanto, também não conseguimos sinal suficiente para detecção.

Assim, para a medida do PBG estamos atualmente analisando outras possibilidades, como, por exemplo, a medida do espectro de refletividade. A vantagem desta técnica, é que a luz incide sobre a amostra por cima (em ângulo) sem haver a necessidade de guiamento, no entanto, requer o uso de detectores extremamente sensíveis.

Referências

[1] L. Cescato and J. Frejlich, "Self-diffraction for Intrinsic Optical Modulation Evolution Measurement in Photoresist", Appl. Optics 27 (10), 1984-1987 (1988).

[2] Paulo M. Garcia, L. Cescato and J. Frejlich, "Phase-Shift Measurement in Photorefractive Holographic Recording", J. Appl. Phys. 66 (1), 47-49 (1989).

[3] L. Cescato. E. Gluch and N. Streibl., "Holographic Quarter-Wave Plate", Applied Optics 29, 3286 (1990).

[4] C.R.A. Lima, L.L. Soares, A. Gobbi and L.Cescato, "Reflecting Polarizing Beam Splitter", Optics Letters 22 (4), 203-205 (1997).

[5] L. L. Soares, C. R. A. Lima, L. Cescato, M. A. R. Alves, and E. S. Braga, "Recording of relief structures in amorphous hydrogenated carbon (α -C:H) films for infrared diffractive optics," J. Mod. Opt. 45 (7), 1479-1486 (1998).

[6] E. L. Rigon, "Gravação e Caracterização de Nanoestruturas Bidimensionais em Relevo", Tese de mestrado, IFGW/Unicamp, Campinas (2003).

[7] S. J. Wilson and M. C. Hutley, "The Optical Properties of 'Moth Eye' Antireflection Surfaces", Optica Acta 29 (7), 993-1009 (1982).

[8] D. H. Raguin and G. M. Morris, "Antireflection structured surfaces for the infrared spectral region", Applied Optics 32 (7), 1154-1167 (1993).

[9] T. W. Ebbesen, H. J. Lezec, H. F. Ghaemi, T. Thio & P. A. Wolff, "Extraordinary optical transmission through sub-wavelength hole arrays", Nature 391, 667-669 (1998).

[10] E. Yablonovitch and T.J.Gmitter, "Photonic band structure: the face-centered-cubic case", Phys. Rev. Lett. 63 (18), 1950-1953 (1989).

[11] J. D. Joannopoulos, R. D. Meade and J. N. Winn, "Photonic Crystals – Molding the Flow of Light", Princeton University Press, New Jersey, 1995.

[12] K. M. Ho, C. T. Chan and C. M. Soukoulis, "Existence of a Photonic Gap in Periodic Dielectric Structures", Physical Review Letters 65 (25), 3152-3155 (1990).

[13] Pierre R. Villeneuve and Michel Piché, "Photonic Bandgaps in Periodic Dielectric Structures", Progress of Quantum Electronics 18, 153-200 (1994).

[14] S. Rowson, A. Chelnokov, J. M. Lourtioz, "Two-dimensional Photonic Crystals in macroporus silicon: From Mid-Infrared (10µm) to Telecommunication Wavelengths (1.3-1.5µm)", J. of Lightwave Technology 17 (11), 1989-1995 (1999).

[15] M.Campbell, D. N. Sharp, M. T. Harrison, R. G. Denning, A. J. Turberfield, "Fabrication of photonic crystals for the visible spectrum by holographic litography", Nature 404 (6773), 53-56 (2000).

[16] V. Berger, O. Gauthier-Lafaye and E. Constard, "Fabrication of a 2D photonic bandgap by a holographic method", Electronics Letters 33 (5), 425-426 (1997).

[17] E. Yablonovitch, "Inhibited Spontaneous Emission in Solid-State Physics and Electronics", Physical Review Letters 58 (20), 2059-2062 (1987).

[18] N. W. Ashcroft and N. D. Mermin, "Solid State Physics", Saunders College, Philadelphia, 1976.

[19] C. Kittel, "Solid State Physics", John Wiley & Sons, New York, 1986.

[20] Hecht and Zajac, "Optics", Addison-Wesley, Reading, Mass, 1974.

[21] Grant R. Fowles, "Introduction to Modern Optics", Dover, New York, 1975.

[22] P. Yeh, "Optical Waves in Layered Media", John Wiley & Sons, New York, 1988.

[23] E. Yablonovitch, "Photonic Crystals: Semiconductors of Light", Scientific American 285 (6), 34-41 (2001).

[24] J. C. Knight, T. A. Birks, P. St. J. Russell and D. M. Atkin, "All-silica single-mode optical fiber with photonic crystal cladding", Optics Letters 21 (19), 157-1549 (1996); Errata: Optics Letters 22, 484-485 (1997).

[25] S. G Johnson, S. Fan, P. R. Villeneuve, J. D. Joannopoulos and L. A. Kolodziejski, "Guided modes in Photonic crystals slabs", Physical Review B 60 (8), 5751-5758 (1999).

[26] Masaya Notomi, Akihiko Shinya and Eiichi Kuramochi, "Photonic Crystals: Towards Ultrasmall Lightwave Circuits", NTT Technical Review 2 (2), 36-47 (2004).

[27] Ahmed Sharkawy, Shouyuan Shi and Dennis W. Prather, "Electro-optical switching using coupled Photonic crystal waveguides", Optics Express 10 (20), 1048-1058 (2002).

[28] T. Sondergaard and K. H. Dridi, "Energy flow in photonic crystal waveguides", Physical Review B 61 (23), 15688-15696 (2000).

[29] Edmond Chow, S. Y. Lin, S. G. Jonhson, P. R. Villeneuve, J. D. Joannopoulos, J. R. Wendt, G. A. Vawter, W. Zubrzycki, H. Hou and A Alleman, "Three dimensional control of light in a two-dimensional photonic crystal slab", Nature 407, 983-986 (2000).

[30] E. Yablonovitch, "Photonic Crystals", Journal of Modern Optics 41 (2), 173-194 (1994).

[31] Jianming Jin, "The finite element method in electromagnectics", John Wiley and Sons, Inc., 1993.

[32] M. Koshiba, "Optical waveguide theory by the finite element method", Kluwer Academic Publishers, London, 1992.

[33] M. Marrone, V. F. Rodriguez-Esquerre and H. E. Hernandez-Figueroa, "Novel numerical method for the analysis of 2D photonic crystals: the cell method", Optics Express 10, 1299-1304 (2002).

[34] V. F. Rodriguez-Esquerre and H. E. Hernandez-Figueroa, "Novel Time-Domain Stepby-Step Scheme for Integrated Optics Applications", IEEE Photonics Technology Letters 13 (4), 311-313 (2001).

[35] Vitaly F. R. Esquerre, "Modelagem de Estruturas Fotônicas por Elementos Finitos 2D no Domínio do Tempo", Tese de doutorado, FEEC/Unicamp, Campinas (2003).

[36] http://gid.cimne.upc.es/support/gid_toc.subst

[37] http://www.mathworks.com

[38] X. L. Yang, L. Z. Cai and Y. R. Wang, "Larger bandgaps of two-dimensional triangular photonic crystals fabricated by holographic lithography can be realized by recording geometry design", Optics Express 12 (24), 5850-5856 (2004).

[39] Luis E. Gutierrez-Rivera, Edson J. de Carvalho, Maria Aparecida da Silva and Lucila Cescato, "Metallic submicrometer sieves fabricated by interferometric lithography and electroforming", Journal of Micromechanics and Microengineering 15, 1-6 (2005).

[40] C. C. Cheng and A. Scherer, "Fabrication of photonic band-gap crystals", J. Vac. Sci. Technol. B 13 (6), 2696-2700 (1995).

[41] Edmond Chow, S. Y. Lin, and J. R. Wendt, "Quantitative analysis of bending efficiency in photonic-crystal waveguide bends at $\lambda = 1,5\mu$ m wavelengths", Optics Letters 26 (5), 286-288 (2001).

[42] C. J. M. Smith, H. Benisty, D. Labilloy, U. Oesterle, R. Houdré, T. F. Krauss, R. M. De La Rue and C. Weisbuch, "Near-infrared microcavities confined by two-dimensional photonic bandgap crystals", Electronics Letters 35 (3), (1999).

[43] Se-Heon Kim, Han-Youl Ryu, Hong-Gyu Park, Guk-Hyun Kim, Yong-Seok Choi and Yong-Hee Lee, "Two-dimensional photonic crystal hexagonal waveguide ring laser", Applied Physics Letters 81 (14), 2499-2501 (2002).

[44] Susumu Noda, "Three-dimensional photonic crystals operating at optical wavelength region", Physica B 279, 142-149 (2000).

[45] S. Olivier, H. Benisty, C. J. M. Smith, M. Rattier, C. Weisbuch and T. F. Krauss, "Transmission properties of two-dimensional photonic crystal channel waveguides", Optical and Quantum Electronics 34, 171-181 (2002).
[46] D. N. Sharp, M.Campbell, E. R. Dedman, M. T. Harrison, R. G. Denning and A. J. Turberfield, "Photonic crystals for the visible spectrum by holographic lithography", Optical and Quantum Electronics 34, 3-12 (2002).

[47] X. Wang, J. F. Fu, H. M. Su, Z. H. Zeng, Y. L. Chen and H. Z. Wang, "Threedimensional photonic crystals fabricated by visible light holographic lithography", Applied Physics Letters 82 (14), 2212-2214 (2003).

[48] C. Cuisin, A. Chelnokov, D. Decanini, D. Peyrade, Y Chen and J. M. Lourtioz, "Submicrometre dielectric and metallic yablonovite structures fabricated from resist templates", Optical and Quantum Electronics 34, 3-12 (2002).

[49] V. Berger, O. Gauthier-Lafaye and E. Constard, "Photonic band gaps and holography", J. Appl. Phys. 82 (1), 60-64 (1997).

[50] A. Fernandez, J. Y. Decker, S. M. Herman, D. W. Phillion, D. W. Sweeney and M. D. Perry, "Methods for fabricating arrays of holes using interference lithography", J. Vac. Sci. Technol. B 15 (6), 2439-2443 (1997).

[51] J. Frejlich, L. Cescato and G. F. Mendes, "Analysis of an Active Stabilization System for an Holographic Setup", Appl. Opt. 27, 1967-1976 (1988).

[52] Ngoc Diep Lai, Wen Ping Liang, Jian Hung Lin, Chia Chen Hsu and Cheng Hsiung Lin, "Fabrication of two- and three-dimensional periodic structures by multi-exposure of two-beam interference technique", Optics Express 13 (23), 9605-9611 (2005).

[53] F. Quiñónez, E. L. Rigon, L. Cescato, V.F. Rodriguez-Esquerre and H. Hernandez-Figueroa, "Design and Fabrication of 2D photonic crystals by holographic lithography", Proc. of SPIE 5622, 896-900 (2004).

[54] G. A.Cirino, "Fabricação de elementos ópticos difrativos empregando processos de microusinagem", Tese de doutorado, Escola Politécnica da USP, São Paulo (2002).

[55] Han-Youl Ryu, Jeong-Ki Hwang and Yong-Hee Lee, "Conditions of single guided mode in two-dimensional triangular photonic crystal slab waveguides", Journal of Applied Physics 88 (9), 4941-4946(2000).

[56] Clifford R. Pollock and Michal Lipson, "Integrated Photonics", Kluwer Academic Publishers, United States of America, 2003 – (Cap. 11).

[57] Vilson R. Almeida, Roberto R. Panepucci and Michal Lipson, "Nanotaper for compact mode converion", Optics Letters 28 (15), 1302-1304 (2003).

[58] Vasily N. Astratov, Ian S. Culsaw, R. Mark Stevenson, David M. Whittaker, Maurice S. Skolnick, Thomas F. Krauss and Richard M. De La Rue, "Resonant Coupling of Near-Infrared Radiation to Photonic Band Structure Waveguides", Journal of Lightwave Technology 17 (11), 2050-2057 (1999).