



Universidad Autónoma de San Luis Potosí

Facultad de Ciencias

DISEÑO Y FABRICACIÓN DE DISPOSITIVOS BASADOS EN
METAMATERIALES PARA INCREMENTAR LA
ABSORBANCIA EN EL RANGO DE TERAHERTZ.

TESIS PRESENTADA POR JOSÉ ANTONIO CUEVAS LARA
ASESOR: DR. FRANCISCO JAVIER GONZÁLEZ CONTRERAS
COASESOR: DR. GABRIEL GONZÁLEZ CONTRERAS
PARA OBTENER EL GRADO DE MAESTRO EN CIENCIAS APLICADAS.

Enero 2017

Coordinación para la Innovación y Aplicación de la Ciencia y la Tecnología.

AGRADECIMIENTOS

Dedico esta tesis a quienes me apoyaron en cada momento y decisión que tome hasta llegar a este día. De manera especial a mis padres y familiares que siempre han estado cerca para apoyarme y aconsejarme.

A mis amigos que han estado pendiente de mí: Kolosovas, Hiram Killer, Juancho, Nayeli, Talivan, Sianya, Jairo, Miriam, Claudia, Omar, Wendy, Pablo, Dui, Bernardo R., Bernardo Landin, Grillo, Gerardo Silva.

A mis amigos y compañeros del CIACYT que me apoyaron en el transcurso de la maestría, Brhayllan, Chiwo, Rodrigo, Ramón, Edgar, Yuliano, Javier, Juan Carlos, entre muchos más de quienes recibí consejo y mucha ayuda de su parte.

A mis compañeros del equipo la pandilla por demostrar siempre que es posible levantarse de cualquier situación.

A mi Asesor Dr. Francisco Javier González Contreras y a mi coasesor Dr. Gabriel González Contreras que me han apoyado en todo para la conclusión de esta tesis.

A mis sinodales por su evaluación y consejo.

RESUMEN

En este trabajo de tesis se presentan el análisis, diseño, simulación y fabricación de estructuras resonantes conocidas como metamateriales, que tienen un comportamiento muy peculiar al entrar en resonancia y el cual ha sido aplicado en diversas áreas, pero aún tiene un gran potencial por explorar. Las distintas geometrías y tamaños con las que se trabaja en esta tesis están dirigidos a una parte del espectro electromagnético poco estudiada hasta el momento, la región de los terahertz. Se ha documentado en la literatura que el comportamiento de los metamateriales en resonancia en ciertas geometrías generan un incremento en la absorbanza de las estructuras que puede ser aprovechada para diversas funciones de las cuales se hablara más adelante. Los metamateriales han sido estudiados desde ya hace varios años, las primeras ideas de estos datan de la década de los 60's, pero debido a que la tecnología de ese tiempo no era suficiente para la creación de estos dispositivos, fue hasta finales de los noventa donde se llevaron a cabo las primeras propuestas y se documentó el diseño del primer metamaterial creado en el año 2000, por lo que son un tema que aún tiene una amplia área por ser explorada. Basándonos en estos estudios previos, podemos ser capaces de realizar nuestros propios diseños y esperar un comportamiento específico de los mismos, para corroborar este comportamiento realizamos simulaciones por medio del elemento finito, el cual es un método que ha demostrado ser muy eficiente para simulaciones electromagnéticas y comprobamos los resultados obtenidos por medio de la fabricación de los mismos utilizando las técnicas de litografía de haz de electrones en sustratos de silicio.

Índice general

| | |
|--|-----------|
| AGRADECIMIENTOS | 2 |
| RESUMEN | 3 |
| 1. INTRODUCCIÓN | 6 |
| 2. MARCO TEÓRICO DE LOS METAMATERIALES | 8 |
| 2.1. Modelo de Drude-Lorentz | 11 |
| 3. METAMATERIALES COMO SUPERFICIES Y SUS POSIBLES APLICACIONES EN EL RANGO DE LOS TERAHERTZ | 16 |
| 4. SIMULACIÓN DE UN METAMATERIAL POR MEDIO DEL MÉTODO DEL ELEMENTO FINITO | 19 |
| 4.1. Métodos de simulación. Método del elemento finito | 19 |
| 4.2. Software y metodología de simulación | 22 |
| 5. TRABAJO REALIZADO MEDIANTE LA SIMULACIÓN DE DIVERSAS ESTRUCTURAS RESONANTES EN EL RANGO DE TERAHERTZ | 27 |
| 6. FABRICACIÓN DE LOS METAMATERIALES POR MEDIO DE LITOGRAFÍA DE HAZ DE ELECTRONES | 41 |
| 6.1. Bases de la litografía de haz de electrones | 41 |
| 6.2. Proceso de litografía realizado en el laboratorio | 43 |
| 7. TRABAJO A FUTURO | 53 |

| | |
|-----------------------|---|
| <i>Índice general</i> | 5 |
|-----------------------|---|

| | |
|------------------------|-----------|
| 8. CONCLUSIONES | 54 |
|------------------------|-----------|

| | |
|---------------------|-----------|
| Bibliografía | 56 |
|---------------------|-----------|

Capítulo 1

INTRODUCCIÓN

Los recientes estudios sobre metamateriales han demostrado una amplia gama de aplicaciones en las que se pueden involucrar este tipo de materiales, capas de invisibilidad, superlentes, materiales con índice de refracción negativo etc. Este trabajo de investigación está enfocado en aprovechar las propiedades de los metamateriales en una región del espectro electromagnético específica que ha sido poco estudiada hasta ahora, la región de los terahertz que va de longitudes de onda de $100\mu\text{m}$ a 1mm . Esta región puede ser especialmente aprovechada en aplicaciones de seguridad y biológicas. A partir de la literatura, se han conseguido las bases para entender el comportamiento de estos metamateriales, una de las características más importantes para este trabajo es que al realizar los arreglos geométricos con una celda unitaria de un tamaño máximo menor a 10 veces la longitud de onda que se le incide, muestran una resonancia donde ocurre el comportamiento de un metamaterial y se ha observado un pico de absorbanza en una frecuencia muy específica dependiendo de la geometría y de las distancias entre los resonadores. Se recurre al uso de simulaciones por medio de análisis de elemento finito de diversas geometrías que han demostrado características útiles para el propósito de este trabajo en diferentes rangos del espectro electromagnético, además de modelos de geometrías no documentadas hasta el momento, realizando el estudio del software Comsol para este fin, así como el adiestramiento en técnicas de litografía de haz de electrones para su posterior fabricación.

La característica más importante a destacar de estos materiales es que deben

su comportamiento a su geometría y no a las propiedades químicas del material, pueden ser tratados como un medio efectivo definido con unos valores de permitividad eléctrica y permeabilidad magnética concretos, ya que la teoría del medio efectivo es aplicable siempre que el tamaño de la celda básica del material sea mucho menor que la longitud de onda.

Debido a las propiedades electromagnéticas inusuales y únicas de los metamateriales, se ha incrementado en gran forma el número de potenciales aplicaciones tales como superlentes, camuflaje de invisibilidad, espectroscopia molecular, censado bioquímico etc. Algunas ventajas más son un alto grado de sensibilidad, ser una técnica no destructiva y rápida en la obtención de resultados. La detección de partículas y microorganismos en muy pequeñas cantidades y tamaños es una de las aplicaciones más requeridas en estos días debido al límite que tienen los sistemas y mecanismos con los que comúnmente se trabaja y que además, son métodos destructivos o toman mucho tiempo en obtener resultados, los metamateriales tienen la capacidad de sobrepasar estos límites. Frecuencias en el rango de terahertz aplicadas a diseños microscópicos de arreglos de metamateriales crean una resonancia en un rango muy específico dependiendo del diseño. Estructuras tales como los resonadores de anillos partidos, han demostrado ser muy eficientes para la construcción de estos metamateriales; para este trabajo observaremos el comportamiento de este tipo de geometrías así como variantes de los mismos.

Capítulo 2

MARCO TEÓRICO DE LOS METAMATERIALES

Todos los materiales pueden ser definidos por sus propiedades eléctricas tales como la permitividad eléctrica, permeabilidad magnética, susceptibilidad, entre otras, que nos proporcionan información de su comportamiento bajo ciertas circunstancias. Las propiedades ópticas de los metamateriales se definen tanto por la permitividad eléctrica como la permeabilidad magnética que caracterizan la propagación de ondas en un material. La idea del metamaterial se basa, principalmente, en los conceptos de permitividad y permeabilidad efectiva de un material o medio, es decir, no depende de la composición del material sino de cómo actúa el material como un todo. Para esto tomamos como ejemplo, el incidir luz en un pedazo de vidrio, si la longitud de onda es cientos de veces mayor al tamaño de los átomos, el comportamiento de la luz dentro del vidrio dependerá de las propiedades del material en sí y no de los átomos que lo componen ya que sus propiedades por si solos llegan a perder importancia [8]. Para el caso de metamateriales podemos realizar algo similar utilizando estructuras artificiales con propiedades electromagnéticas definidas a las cuales llamamos “célula”. Estas células se acomodan en forma de arreglos de tal forma que podemos formar un medio homogéneo tal que si irradiamos una longitud de onda mucho mayor al tamaño de cada célula, tendrá propiedades que dependan del arreglo mismo y no del material del que estén hechos.

Desde el punto de vista de la electrodinámica clásica, la permitividad eléctrica

ϵ y la permeabilidad magnética μ caracterizan totalmente la propagación de ondas electromagnéticas en un material. Esto es debido a que son los únicos parámetros de una sustancia que aparecen en las ecuaciones de Maxwell:

$$\nabla \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \quad (2.1)$$

$$\nabla \times \vec{H} = \vec{J} + \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} \quad (2.2)$$

Donde:

$$\vec{D} = \epsilon \vec{E} = \epsilon_0 \epsilon_r \vec{E} \quad (2.3)$$

$$\vec{B} = \mu \vec{H} = \mu_0 \mu_r \vec{H} \quad (2.4)$$

Para obtener la ecuación de onda a partir de estas ecuaciones, aplicamos el rotacional a ambas partes de 2.1

$$\nabla \times (\nabla \times \vec{E}) = -\frac{\partial}{\partial t} (\nabla \times \vec{B}) \quad (2.5)$$

y sustituimos en 2.2.

Aplicando la identidad $\nabla \times (\nabla \times \vec{A}) = \nabla(\nabla \cdot \vec{A}) - \nabla^2 \vec{A}$, tenemos que:

$$-\nabla^2 \vec{E} + \nabla(\nabla \cdot \vec{E}) = -\frac{\partial}{\partial t} \mu_0 (\vec{J} + \epsilon_0 \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}) \quad (2.6)$$

De donde sabemos que: $\nabla(\nabla \cdot \vec{E}) = 0$ y \vec{J} es cero en el vacío. Por lo tanto, la ecuación se reduce a:

$$-\nabla^2 \vec{E} = \mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} \quad (2.7)$$

$$-\nabla^2 \vec{E} - \mu \epsilon \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} = 0 \quad (2.8)$$

Suponiendo una variación sinusoidal del campo, la solución de esta ecuación es una combinación lineal de términos de la forma:

$$\vec{E} = \vec{E}_0 \cos(\vec{k}\vec{r} - \omega t) = 0 \quad (2.9)$$

Donde ω es la frecuencia angular que se propaga a una velocidad $v = \frac{1}{\sqrt{\mu\epsilon}}$ en la dirección dada por \vec{k} (vector de onda).

Definimos el índice de refracción (n) de la siguiente manera:

$$n = \pm\sqrt{\epsilon\mu} = \pm\sqrt{\epsilon_0\epsilon_r\mu_0\mu_r} \quad (2.10)$$

Independientemente del signo de n , la ecuación a resolver sigue siendo:

$$-\nabla^2\vec{E} - \mu\epsilon\frac{\partial^2\vec{E}}{\partial t^2} = 0 \quad (2.11)$$

Cuya solución es:

$$\vec{E} = \vec{E}_0 \cos(\vec{k}\vec{r} - \omega t) \quad (2.12)$$

Que corresponde a una onda periódica de frecuencia angular ω que se propaga a una velocidad $c = (\mu\epsilon)^{-\frac{1}{2}}$ en la dirección dada por \vec{k} . Llamamos vector de onda a $\vec{k} = k\hat{a}$ y número de onda k .

El campo magnético puede calcularse sustituyendo 2.12 en 2.1 resultando:

$$\vec{H} = \frac{\hat{k}}{Z} \times \vec{E} \quad (2.13)$$

Donde se define la impedancia característica del medio como:

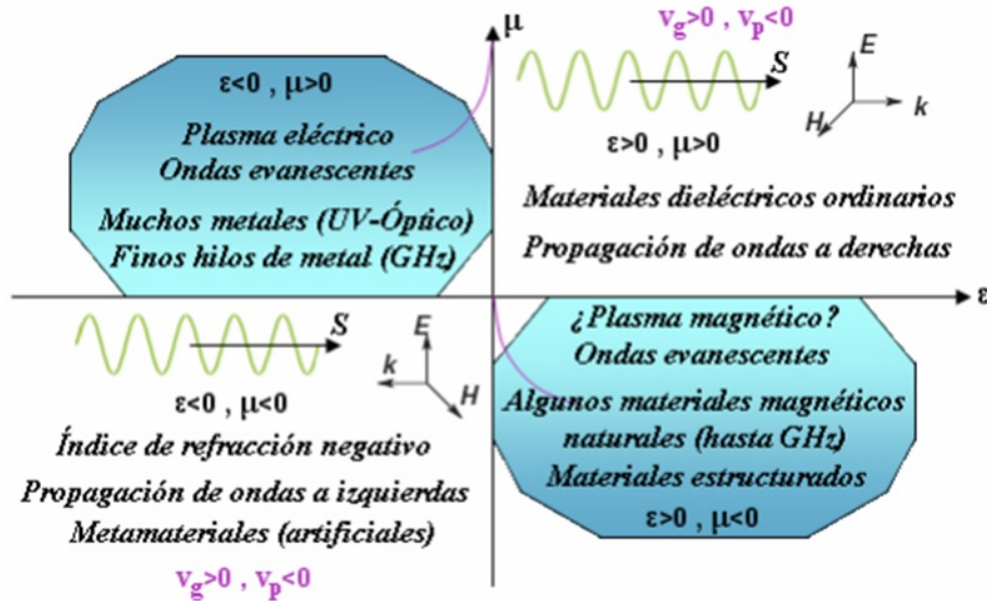
$$Z = \frac{\mu}{n} = \sqrt{\frac{\mu}{\epsilon}} \quad (2.14)$$

Ahora sustituiremos 2.12 y 2.14 en las ecuaciones principales de Maxwell para obtener:

$$\vec{k} \times \vec{E} = \omega\mu\vec{H} \quad (2.15)$$

$$\vec{k} \times \vec{H} = -\omega\epsilon\vec{E} \quad (2.16)$$

La gran mayoría de los materiales naturales tienen μ y ϵ positivos. Pero la definición de $n = \pm\sqrt{\epsilon_r\mu_r}$ nos indica que existe la posibilidad de tener un índice


 Figura 2.1: Posibles valores de μ y ϵ .

de refracción negativo. Si tenemos ambas variables positivas, la terna $(\vec{E}, \vec{H}, \vec{k})$ es dextrógira o a derechas, mientras que si tanto ϵ como μ son negativas, estos vectores forman una terna levógira o a izquierdas. Es por ello que a este tipo de medios se les denomina materiales zurdos (Left Handed Materials) [16]. En la figura 2.1 se muestran las diferentes combinaciones en los signos de la permitividad eléctrica y la permeabilidad magnética.

Se define vector de Poynting como la dirección del flujo de la energía de la onda y cuyo valor es:

$$\vec{S} = \vec{E} \times \vec{H} \quad (2.17)$$

siempre tiene la misma dirección relativa a los campos independientemente del signo del índice de refracción.

2.1. Modelo de Drude-Lorentz

Para analizar las propiedades ópticas de los metales utilizamos un modelo de electrones libres para obtener la respuesta de un metal a la radiación electromagnética.

El modelo de Drude se basa en que al incidir radiación electromagnética a un material, los fotones incidentes causan una excitación en los electrones del material el cual se toma como un sistema de oscilaciones y utiliza la ecuación del movimiento de un electrón libre en un campo eléctrico en una dimensión y teniendo en cuenta las colisiones con impurezas, imperfecciones de red ó fonones para el análisis de acuerdo a la siguiente ecuación:

$$m \frac{d^2x}{dt^2} = -m\tau \frac{dx}{dt} - eE \quad (2.18)$$

donde m es la masa del electrón, e es la carga del electrón, $\tau = \frac{1}{T}$ y T es el tiempo promedio entre colisiones.

Asumiendo que sobre el electrón actúa un campo eléctrico \vec{E} que depende del tiempo de forma $e^{-i\omega t}$, x dependerá de t de la misma forma y se tiene una solución igual a:

$$-m\omega^2 x = i\tau m\omega \dot{x} - e\vec{E} \quad (2.19)$$

$$x = \frac{-e}{m(\omega^2 + i\tau\omega)} E_0 e^{-i\omega t} \quad (2.20)$$

Si tenemos una concentración de electrones por unidad de volumen N

$$\vec{P} = Ne\vec{x} = -\frac{Ne^2}{m(\omega^2 + i\tau\omega)} E_0 e^{-i\omega t} \quad (2.21)$$

Entonces:

$$\vec{D} = \epsilon_0 \vec{E} + \vec{P} = \epsilon_0 \left(1 - \frac{Ne^2}{\epsilon_0 m(\omega^2 + i\tau\omega)}\right) \vec{E} \quad (2.22)$$

De la ecuación:

$$\vec{D} = \epsilon_0 \vec{E} + \vec{P} = \epsilon_0 (1 + \chi_e) \vec{E} = \epsilon_0 \epsilon(\omega) \vec{E} \quad (2.23)$$

y su contraparte magnética:

$$\vec{B} = \mu_0 (\vec{H} + \vec{M}) = \mu_0 (1 + \chi_m) \vec{H} = \mu_0 \mu(\omega) \vec{H} \quad (2.24)$$

obtenemos que:

$$\epsilon(\omega) = 1 - \frac{Ne^2}{\epsilon_0 m(\omega^2 + i\tau\omega)} \quad (2.25)$$

Donde $\frac{Ne^2}{\epsilon_0 m} = \omega_{pe}^2$ que se denomina frecuencia de plasma de la respuesta eléctrica del material. Por lo tanto, tenemos que:

$$\epsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_{pe}^2}{(\omega^2 + i\tau\omega)} \quad (2.26)$$

De la misma forma se demuestra que para:

$$\mu(\omega) = 1 - \frac{Ne^2}{\mu_0 m(\omega^2 + i\tau\omega)} \quad (2.27)$$

Tenemos del mismo modo una frecuencia de plasma magnética $\frac{Ne^2}{\mu_0 m} = \omega_{p\mu}^2$

$$\mu(\omega) = 1 - \frac{\omega_{p\mu}^2}{(\omega^2 + i\tau\omega)} \quad (2.28)$$

Un modelo mejor adaptable a los metamateriales es el de Drude- Lorentz el cual incluye un término de fuerza restauradora que depende de una frecuencia natural ω_0 (frecuencia de resonancia) [10].

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} + m\tau \frac{dx}{dt} + m\omega_0^2 x = eE \quad (2.29)$$

$$x = \frac{-eE}{m(\omega_0^2 - \omega^2 + i\tau\omega)} \quad (2.30)$$

Por lo tanto

$$\epsilon(\omega) = 1 - \frac{Ne^2}{\epsilon_0 m(\omega_0^2 - \omega^2 + i\tau\omega)} \quad (2.31)$$

Y tendríamos la ecuación final para $\epsilon(\omega)$:

$$\epsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_{pe}^2}{(\omega_0^2 - \omega^2) + i\tau\omega} \quad (2.32)$$

y del mismo modo para μ

$$\mu(\omega) = 1 - \frac{\omega_{p\mu}}{(\omega_{0\mu}^2 - \omega^2) + i\tau\omega} \quad (2.33)$$

Con $\omega_0\epsilon$ y $\omega_0\mu$ como frecuencias de resonancia con ϵ y μ representando las respuestas eléctrica y magnéticas del material.

El rango natural de ϵ y μ en materiales convencionales es limitado, por ejemplo, en frecuencias ópticas usualmente $\mu = 1$. Se conoce que el signo negativo tanto de μ como de ϵ aparece de forma resonante, es decir, solo en una pequeña banda de frecuencias [23]. Estas bandas de frecuencias no se solapan, las frecuencias para la resonancia de ϵ son muy altas (visible e infrarrojo) en comparación de las de μ (por debajo del infrarrojo). Estas frecuencias se conocen como frecuencias de plasma.

Para poder hacer coincidir la frecuencia de resonancia para ambos parámetros es necesario construir un circuito resonador equivalente a un circuito LC. Para estas estructuras la permitividad eléctrica y la permeabilidad magnética no dependen ya del material si no de la frecuencia y de acuerdo al modelo de Drude-Lorentz es posible expresarlas como permitividad eléctrica y permeabilidad magnética efectivas. [6]

Para poder igualar la frecuencia de resonancia se utilizan geometrías específicas, una de las más utilizadas es el resonador de anillo partido SRR [7]. Es posible describir estos resonadores con un circuito equivalente cuya frecuencia de resonancia $\omega_{LC} = \sqrt{\frac{1}{LC}}$. Donde L es la inductancia efectiva y C la capacitancia efectiva de la estructura como se muestra en la figura 2.2. En este caso, la geometría nos permite tomar la inductancia a través del circuito como un embobinado de una sola espiral y un capacitor de placas paralelas formado en el espacio de separación de la figura al que llamamos gap. En general la descripción del comportamiento de un resonador depende de las ecuaciones de la permitividad y la permeabilidad efectivas del material así como de la geometría del resonador [18].

$$\epsilon(\omega) = 1 - \frac{F\omega_{p\epsilon}}{(\omega_{LC}^2 - \omega^2) + i\tau\omega} \quad y \quad \mu(\omega) = 1 - \frac{F\omega_{p\mu}}{(\omega_{LC}^2 - \omega^2) + i\tau\omega} \quad (2.34)$$

donde F es el parámetro que define la porción volumétrica de la geometría del arreglo y ω_{LC} es la resonancia del circuito LC.

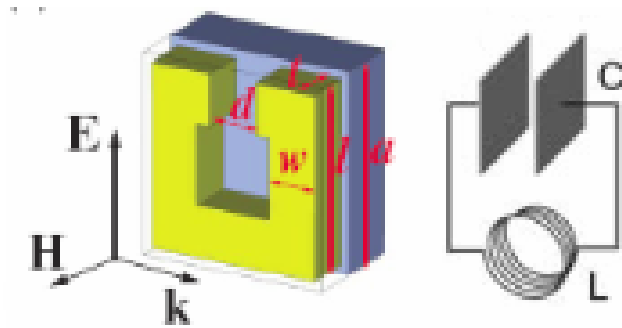


Figura 2.2: Resonador de anillo partido y su circuito equivalente.

Capítulo 3

METAMATERIALES COMO SUPERFICIES Y SUS POSIBLES APLICACIONES EN EL RANGO DE LOS TERAHERTZ

Los metamateriales han demostrado su gran potencial en frecuencias de terahertz y debido al desarrollo de fuentes y detectores de onda en estas frecuencias las posibles aplicaciones que se les puede dar varían desde filtros, absorbedores, estructuras de antena, superficies de frecuencia selectiva, moduladores, cambiadores de fases, switches y espejos. Sin embargo, debido a las propiedades eléctricas y magnéticas de la mayoría de los materiales naturales, no son apropiadas para las frecuencias de los terahertz [19]. Los metamateriales tienen una respuesta única al manipular las resonancias electromagnéticas que no se pueden encontrar en materiales comunes o naturales, esta respuesta como vimos en el capítulo anterior, puede ser determinada por la estructura del resonador metálico.

El rango de frecuencias que define a los terahertz varía ya que no existe una convención que determine el rango exacto, para este trabajo utilizamos el rango que comprende de $100\mu\text{m}$ hasta 1mm de longitud de onda lo que equivale a frecuencias entre 3 Thz y 300 Ghz . Este rango de frecuencias se ha visto poco utilizado hasta la fecha debido a la dificultad de crear dispositivos que funcionen entre la luz

infrarroja y las ondas de radio, hasta hace poco solo se había podido detectar con tecnologías de microondas en frecuencias muy altas y detectores infrarrojos para frecuencias bajas [18]. Para este trabajo es muy importante contribuir al avance de tecnologías y dispositivos en este rango debido a que se tiene una gran variedad de aplicaciones gracias a sus características únicas como lo son el ser una técnica no destructiva de imagen para materiales y diagnósticos médicos, por ejemplo, las ondas en terahertz pueden ver a través de plásticos, textiles, papel y cartón [14]. En astronomía se han realizado investigaciones en terahertz debido a la gran cantidad de información producida por la abundante concentración de moléculas como oxígeno, agua y monóxido de carbono en el polvo estelar, cometas y planetas [20]. Sistemas de terahertz han sido desarrollados también, para aplicaciones médicas debido a los modos de vibración colectiva de muchas proteínas que se predice ocurren en el rango de los terahertz [2]. Otra de las aplicaciones biomédicas de los terahertz es el biosensor, que consiste en la detección de cantidades muy pequeñas de sustancias químicas y biológicas como los microorganismos que desencadenan enfermedades tales como hongos y bacterias, uno de los ejemplos de esta aplicación es la detección de *Penicillium chrysogernum*(penicillia) y *Escherichia coli* (E. coli) [5]. Las técnicas hasta ahora empleadas requieren del uso de anticuerpos, antígenos, células y membranas para el reconocimiento de moléculas interfiriendo con la muestra que se analiza, el uso de tecnología en terahertz provee un método alternativo sin la perturbación de la muestra [3]. En comunicaciones las aplicaciones posibles debidas a nano y micro antenas son muy variadas desde detectar condiciones de salud, ya que el cuerpo también emite de manera natural energía electromagnética en este rango de frecuencias, así como el incremento de las velocidades de conexión y transferencias de datos, radares de alta resolución comunicaciones de alta capacidad entre satélites y monitoreo del ambiente entre muchas otras [15]

Existen diversos tipos de fuentes de radiación en terahertz entre las cuales destacan las térmicas, eléctricas y ópticas. Las térmicas se basan en la radiación del cuerpo negro y estas se presentan de manera natural al calentarse un cuerpo, la región de los terahertz abarca temperaturas en el rango de los 14 K- 140 K. Las fuentes eléctricas se basan en dispositivos electrónicos de estado sólido, hasta ahora es la técnica predominante pero aun es de baja eficiencia debido a que la conversión de energía

que realiza da como resultado la emisión de potencias muy bajas. La tercer fuente basada en técnicas ópticas o láseres utilizan materiales semiconductores y se centra en la emisión de radiación en frecuencias superiores a 1 Thz.

Capítulo 4

SIMULACIÓN DE UN METAMATERIAL POR MEDIO DEL MÉTODO DEL ELEMENTO FINITO

4.1. Métodos de simulación. Método del elemento finito

Conocer el comportamiento de una antena es una tarea compleja que depende del tamaño y la geometría de la misma. Antenas con una geometría definida como simple, es posible predecir su comportamiento por métodos analíticos, pero conforme las geometrías se vuelven complejas, estos métodos incrementan su dificultad de manera que resulta extremadamente tardado y difícil de lograr. La creación de las primeras antenas se lograba mediante la reproducción de una antena base que había probado ser útil para el propósito que se requería y solo se realizaban cambios mínimos en su estructura para optimizarla. Con la ayuda del software y hardware que ha incrementado su potencia y capacidad de una forma impresionante, es posible realizar el análisis de estas estructuras de una forma que resulta fácil y en una fracción del tiempo que se requeriría al hacerlo de forma analítica. En el caso de las

micro antenas y nano antenas resultaría muy difícil su elaboración a prueba y error sin el uso del análisis por medio de una computadora.

Existen diversos métodos de análisis que se han desarrollado en las últimas décadas para la predicción del comportamiento no solo de antenas sino de todo tipo de materiales, los primeros métodos computacionales eran capaces de resolver solo algunos tipos de ecuaciones con cierta velocidad mayor a la que podrían resolverse analíticamente, conforme fueron avanzando las tecnologías y softwares fue incrementando la cantidad de instrucciones y la complejidad de las ecuaciones que podían ser analizadas, aun así para la década de los 90's solo se tenía la capacidad de analizar antenas en forma de alambre y algunas otras geometrías sencillas. Conforme al paso de los años las actualizaciones de los sistemas de cómputo nos han permitido analizar diseños mucho más complejos incluyendo no solo el enfoque electromagnético sino también el térmico, entre otros, que son los más usados en arreglos de antenas.

Se distinguen dos métodos para el estudio en general del Electromagnetismo computacional (CEM) que puede ser dividido en métodos numéricos y métodos de alta frecuencia, en donde encontramos que los métodos de alta frecuencia son viables para estructuras más grandes que la longitud de onda, mientras que los métodos numéricos son más adecuados para estructuras pequeñas [9]. A su vez, los métodos numéricos se dividen en los dominios de la frecuencia y del tiempo, Para el análisis que realizaremos nos interesa el análisis en el dominio de la frecuencia y este se divide en dos métodos, el método de momentos y el método de elementos finitos.

El método de momentos se basa en convertir una ecuación integral en una matriz de ecuaciones tales que puedan ser resueltas mediante técnicas numéricas mediante una computadora. Partiendo de una ecuación inhomogénea se realiza una expansión en series, tales funciones base usualmente forman una sumatoria infinita, pero debido a que la computadora es incapaz de resolver un problema infinito, se crea una sumatoria finita la cual es utilizada para crear las matrices tales que nos darán una solución aproximada a la función principal [12].

El método de interés para este trabajo es el método del elemento finito ya que es una técnica numérica, que aunque es más compleja de programar, es más potente y versátil para tratar geometrías complejas y medios o materiales no homogéneos y se utiliza principalmente en el análisis de estructura, problemas de transferencia

de calor, flujo de fluidos, transporte de masa así como el cálculo de potencial electromagnético. Para poder obtener una solución analítica, se utilizan aquellos valores dados para una determinada incógnita derivados de expresiones matemáticas, las cuales son válidas dentro del cuerpo estudiado, y por lo tanto son válidas en cualquier sección del cuerpo en un número infinito de locaciones dentro del mismo. Estas soluciones por lo general requieren resolver ecuaciones diferenciales ya sean particulares u ordinarias, las cuales para geometrías complejas, cargas no distribuidas, y determinación de propiedades de materiales no pueden ser resueltas [24]. Sin embargo, la formulación que se propone por medio del uso de elementos finitos permite sustituir las ecuaciones diferenciales por ecuaciones algebraicas más sencillas y dado a que se discretiza el problema, arroja aproximaciones muy cercanas a las incógnitas en un número finito de locaciones en el cuerpo analizado. Para poder discretizar el cuerpo a estudiar se requiere la división del mismo en pequeños cuerpos los cuales son un número finito de elementos interconectados por nodos los cuales forman volúmenes o superficies con un comportamiento independiente a los demás y que a su vez son afectados por las condiciones de frontera que afectan al cuerpo en su totalidad [17].

Dentro de cada elemento se distinguen una serie de puntos representativos llamados nodos. Dos nodos son adyacentes si pertenecen al mismo elemento finito, además, un nodo sobre la frontera de un elemento finito puede pertenecer a varios elementos. El conjunto de nodos considerando sus relaciones de adyacencia se conoce como malla. Los cálculos se realizan sobre una malla o discretización creada a partir del dominio con programas generadores de mallas, en una etapa previa a los cálculos que se denomina pre-proceso. De acuerdo con estas relaciones de adyacencia o conectividad se relaciona el valor de un conjunto de variables incógnitas definidas en cada nodo y denominadas grados de libertad. El conjunto de relaciones entre el valor de una determinada variable entre los nodos se puede escribir en forma de sistema de ecuaciones lineales (o linealizadas), la matriz de dicho sistema de ecuaciones se llama matriz de rigidez del sistema. El número de ecuaciones de dicho sistema es proporcional al número de nodos. Planteando la ecuación diferencial que rige el comportamiento continuo para el elemento, se llega a ecuaciones que relacionan el comportamiento en el interior del mismo con el valor que tomen los grados de libertad

nodales. Este paso se realiza por medio de unas funciones llamadas de interpolación, ya que éstas interpolan el valor de la variable nodal dentro del elemento. El problema se formula de manera matricial debido a la facilidad de manipulación de las matrices mediante un ordenador.

4.2. Software y metodología de simulación

El software empleado para la simulación de nuestros resonadores es COMSOL Multiphysics y está basado en el método del elemento finito (FEM). Este software facilita en gran medida el modelado de sistemas físicos mediante una interfaz que permite obtener una solución a través de la combinación de distintos fenómenos físicos (multiphysics). El proceso del modelado en este software se define a través de los siguientes pasos:

- La creación de una geometría
- La creación de un mallado
- La especificación de una o varias físicas
- La elección del tipo de solución
- La visualización de resultados

El software está dividido en estudios básicos tales como Estacionario, Dependiente del tiempo, Tiempo Discreto y Modal, Eigenfrecuencias, Dominio de la frecuencia, entre otros, como se muestra en la figura 4.1 que a su vez se subdividen en varios tipos de soluciones o estudios (fig 4.2). El estudio de interés es en el Dominio de la frecuencia en el cual se puede obtener un barrido de frecuencias que generan ecuaciones estacionarias. Estas físicas y estudios pueden ser editados en la interfaz del programa según requiera el usuario.

La gran ventaja del software frente a otros es la capacidad que tiene de combinar las diferentes físicas que contiene en un solo análisis. Siguiendo los pasos antes descritos lo primero es crear una geometría, la cual será aquella que se va a analizar, en este caso la geometría de los resonadores que deseamos simular. Este programa cuenta

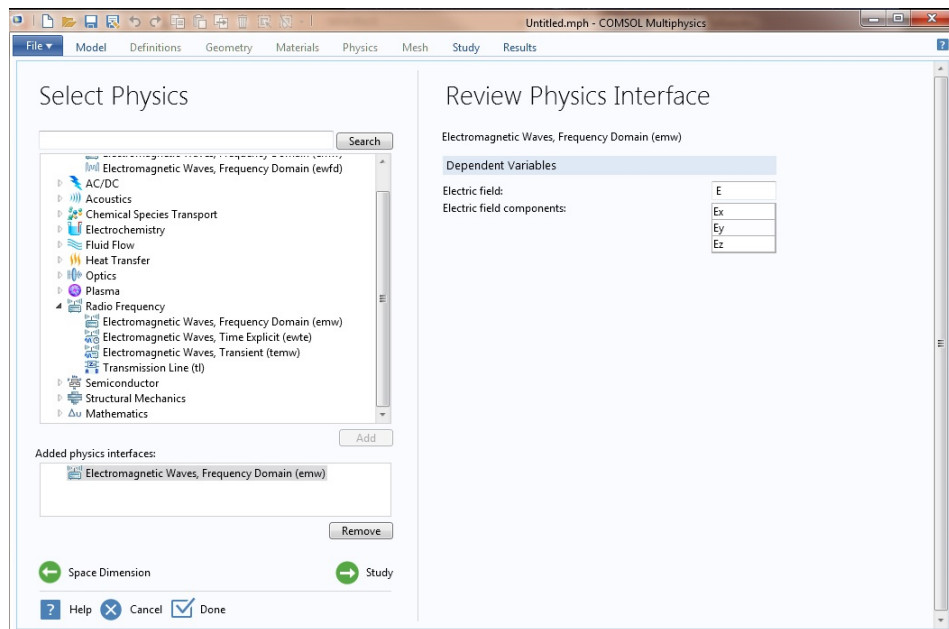


Figura 4.1: Se muestran las diferentes físicas que se pueden aplicar en las simulaciones del software COMSOL.

con elementos propios para la edición de geometrías en 2D y 3D tanto sencillas como algunas más complejas, además de la compatibilidad con archivos .bak creados por el software AUTOCAD, esto facilita ampliamente el diseño de geometrías complejas en 3D. Estos archivos se pueden importar de manera sencilla y se pueden adaptar las medidas de acuerdo a la programación de COMSOL o tomar las medidas tal cual se realizó el diseño en autocad.

Una vez creada la geometría COMSOL cuenta con una amplia gama de materiales con propiedades específicas de cada uno de ellos que pueden ser utilizadas para asignar a la geometría que se va a analizar. Estos materiales tienen características especificadas por default las cuales pueden ser editadas por el usuario, así como también, se pueden agregar características extras a cada uno o si el usuario lo desea, puede crear un material nuevo de acuerdo a sus propias especificaciones 4.3.

Lo siguiente es modificar la física que se había elegido previamente para establecer los parámetros y ecuaciones con las que se va a trabajar la simulación, se establecen los valores iniciales y las ecuaciones que van a afectar las diferentes zonas del material según se desee. Existe una gran cantidad opciones que puede manejar el software en

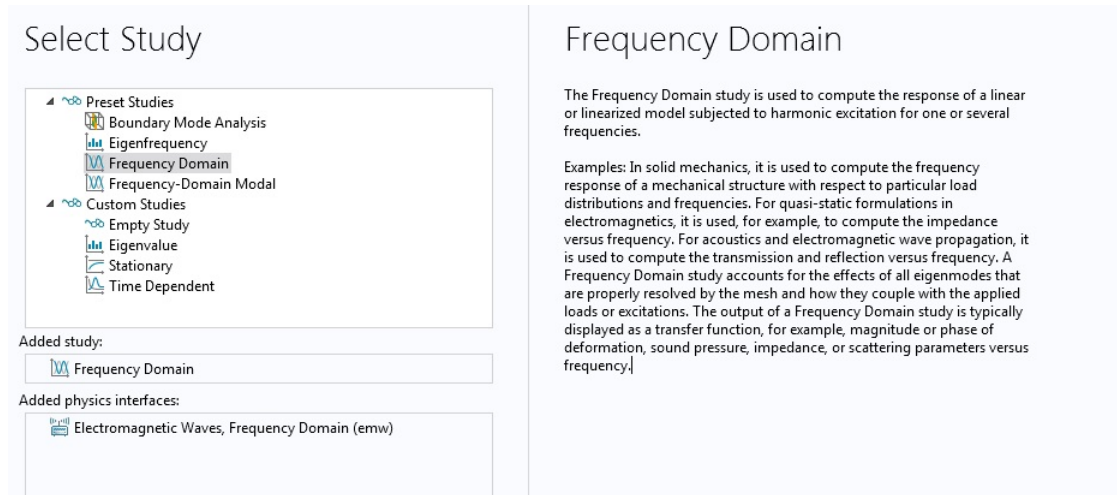


Figura 4.2: Una vez elegidas la o las físicas a aplicar se selecciona el estudio que se desea realizar.

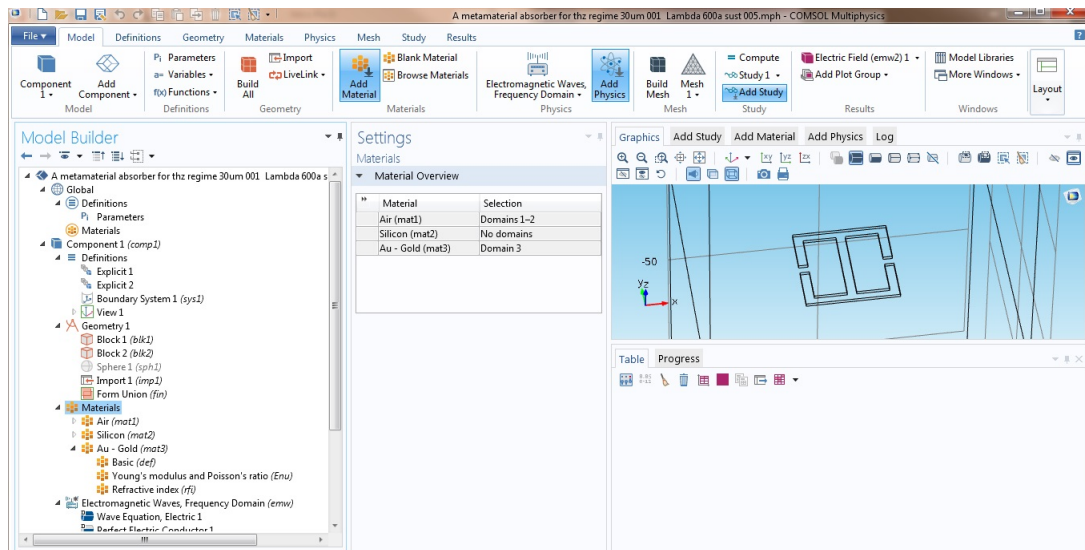


Figura 4.3: Se muestra una geometría tridimensional del lado derecho y los tipos de materiales que se han elegido para el análisis se muestran del lado izquierdo.

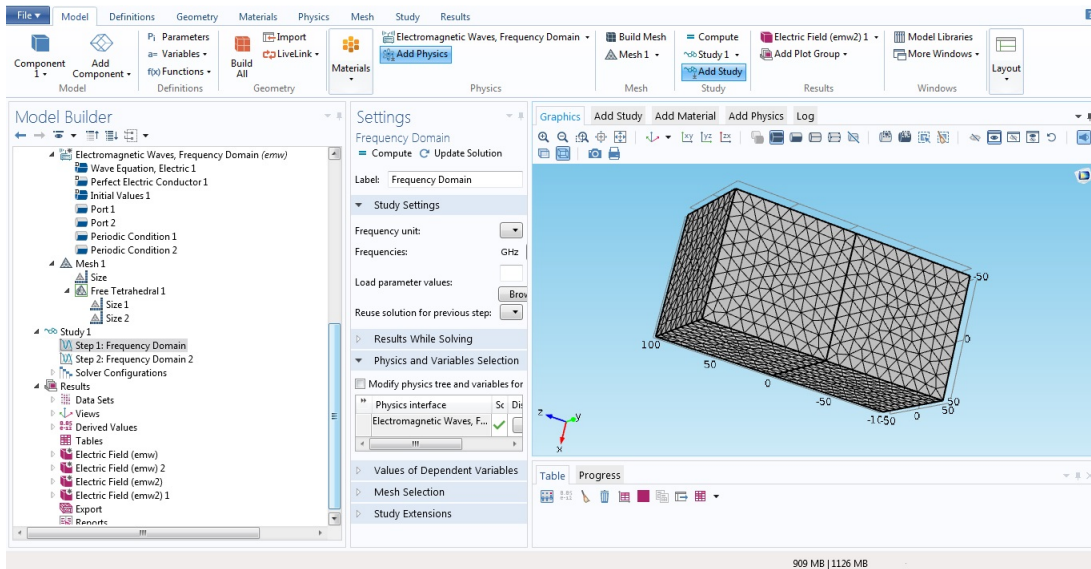


Figura 4.4: Podemos observar en el menú al lado izquierdo se muestran la parte de la física, el mallado, el estudio y debajo la parte de resultados donde posterior al término de la simulación nos mostrará los datos resultantes del análisis..

está sección ya sea valores iniciales, puertos, condiciones de dispersión, ecuaciones de onda, campos eléctricos, entre otras que sirven para interactuar dentro y fuera de la geometría.

Terminada esta fase se procede a realizar el mallado de la o las geometrías que incluye nuestra simulación. Esta parte es muy importante ya que de ella depende mayormente la cantidad de tiempo que tomará la simulación, así como la calidad de la misma. Entre más fino sea el mallado habrá más nodos para ser analizados por lo tanto el tiempo se incrementará, pero se tendrá una mayor resolución y un mejor análisis. Para esto el software nos provee de una lista de mallados predeterminados y la opción de modificar el tamaño del mallado a nuestros requerimientos.

Por último antes de empezar nuestra simulación se nos muestra un campo de estudio donde debemos elegir qué es lo que va a analizar el programa y las especificaciones que se requieren para esto en forma de pasos ya que pueden realizarse diversos análisis dependientes uno de otro. Por ejemplo, en nuestro análisis en el dominio de la frecuencia podemos pedir que el análisis se haga en una sola frecuencia o en un rango específico de frecuencias (Fig.4.4).

Cabe mencionar que en cada simulación que se realizó se creó una onda polarizada

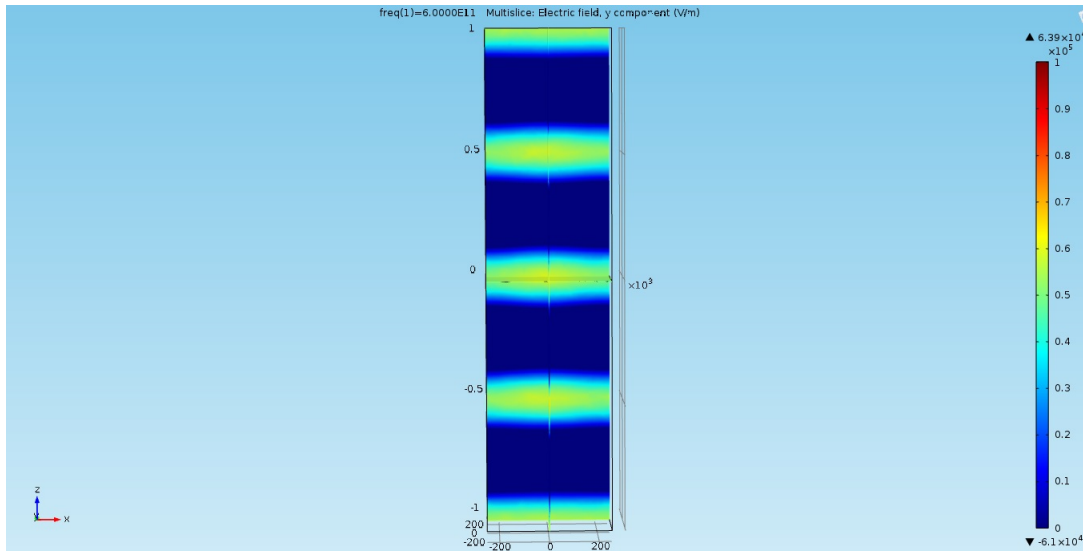


Figura 4.5: Se muestra el campo electromagnético generado por la onda simulada desplazándose a través del eje z dentro de los bloques contenedores que limitan el espacio de análisis.

con respecto al eje “y” y que se desplaza a través del eje “z”. Algunas simulaciones realizadas en los diferentes artículos que presentamos, tienen una inclinación en el ángulo de incidencia lo que muestra un corrimiento en la frecuencia de resonancia al ser comparadas nuestras simulaciones con incidencia normal de la onda sobre el sustrato.

Capítulo 5

TRABAJO REALIZADO MEDIANTE LA SIMULACIÓN DE DIVERSAS ESTRUCTURAS RESONANTES EN EL RANGO DE TERAHERTZ

A lo largo de los años se han realizado diversos tipos de antenas para variadas funciones dependiendo de sus geometrías, para el caso de los resonadores se puede aplicar la misma lógica en la que algunas geometrías tengan diferentes utilidades que otras. Se tienen registrados diseños de resonadores cuya frecuencia de resonancia se da en el rango de los terahertz, aunque aún se siguen investigando y creando nuevos diseños para este fin, debido a la gran cantidad de aplicaciones que podrían tener como se vio en capítulos previos.

En este trabajo de tesis se utilizaron diseños ya probados como resonadores en otros rangos de frecuencia, así como diseños nuevos que se proponen para observar su comportamiento y que han sido adaptados para trabajar en terahertz comprobando mediante el uso de las simulaciones en COMSOL tengan su frecuencia de resonancia en este rango.

Cabe destacar que para el incremento de la absorbancia del resonador el uso del

*Capítulo 5. TRABAJO REALIZADO MEDIANTE LA SIMULACIÓN DE
DIVERSAS ESTRUCTURAS RESONANTES EN EL RANGO DE TERAHERTZ*

sustrato juega un muy importante papel ya que este disminuye considerablemente la transmitancia y absorbe una cierta cantidad de energía en forma térmica y eléctrica. Para el caso de nuestras simulaciones hacemos notar que no se ha simulado el sustrato debido al tiempo de simulación que se incrementaría de manera considerable. Se planea realizar las simulaciones con el sustrato en el futuro continuando con el análisis de estas y más geometrías y para la obtención de mejores resultados.

Otro de los puntos a destacar es que a diferencia la mayoría de las simulaciones en las que se basó este análisis donde se utilizaron los mismos valores del índice de refracción complejo ($n = n' + ik$) para todas las frecuencias, en este trabajo calculamos los valores de índice de refracción que podrían estar más cerca a los valores reales gracias a un programa de MATLAB en el que se utilizan los modelos de Drude y de Drude-Lorentz para realizar los cálculos [21]. Estos cálculos se proporcionaron al programa de COMSOL en forma de lista para ser utilizados al momento de la simulación con lo que esperamos contar con una mejor aproximación a los valores reales en las simulaciones que se realizan. Se realizan algunas comparaciones entre simulaciones realizadas con valores fijos de índice de refracción y los valores calculados con el programa de MATLAB.

Una de las primeras simulaciones que se efectuaron fue la simulación de la geometría presentada en el artículo “Detection of microorganisms using terahertz metamaterials” [5], en el cual se muestra un arreglo de resonadores cuadrados con dos brazos hacia el centro del mismo y dos placas realizando la función de capacitores con una separación de $3 \mu\text{m}$, el tamaño del resonador es de $36 \times 36 \mu\text{m}$ con un grosor de $1 \mu\text{m}$ de oro, como se puede apreciar en el diseño de la imagen 5.1.

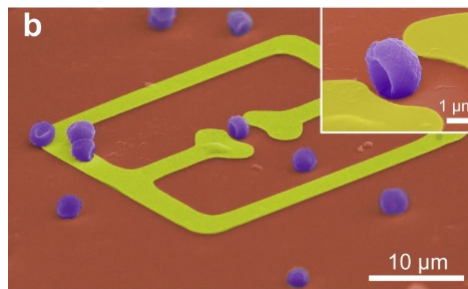


Figura 5.1: Geometría diseñada para la detección de microorganismos específicos utilizando la resonancia en terahertz

Capítulo 5. TRABAJO REALIZADO MEDIANTE LA SIMULACIÓN DE DIVERSAS ESTRUCTURAS RESONANTES EN EL RANGO DE TERAHERTZ

Esta geometría repetida en un arreglo y sobre un sustrato de Silicio muestra una resonancia alrededor de los 0.8 THz. Al tratar de reproducirlo mediante la simulación se tomaron los parámetros de las medidas proporcionadas por el artículo a excepción del sustrato y que sólo se simuló un solo resonador, esto debido a que el tiempo que tarda la simulación es muy largo, por lo que también se decidió a hacer un mallado ligero, todo esto en calidad de prueba del correcto funcionamiento del software de simulación y la introducción de parámetros y ecuaciones.

El resultado fue una resonancia cercana a los 300 Ghz que analizamos mediante un espectro de absorbancia como se muestra en la figura 5.2. En este resultado utilizamos el mismo valor del índice de refracción para todas las frecuencias simuladas y se usó el grosor de 1μ para disminuir el tiempo de simulación, como primera fase de las simulaciones hechas.

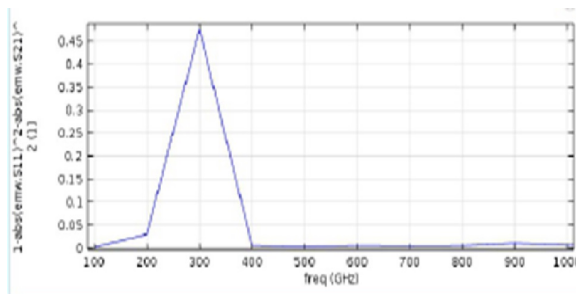


Figura 5.2: Gráfica de la resonancia mostrada por la geometría descrita para la detección de microorganismos, donde muestra un pico de absorbancia de 45 % en 300 Ghz.

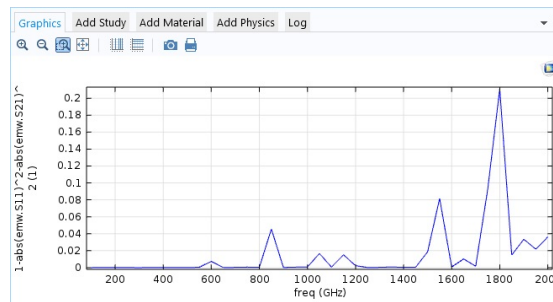


Figura 5.3: Gráfica de la resonancia mostrada por la geometría descrita para la detección de microorganismos de tamaño modificado a $20 \times 20 \mu m^2$, donde observamos el pico de absorbancia de 20 % en 1800 Ghz

Capítulo 5. TRABAJO REALIZADO MEDIANTE LA SIMULACIÓN DE DIVERSAS ESTRUCTURAS RESONANTES EN EL RANGO DE TERAHERTZO

Posteriormente se modificó el tamaño de la estructura para que quedara de $20 \times 20 \mu m^2$ con lo cual se esperaba un corrimiento en la frecuencia de resonancia a una frecuencia mayor solo para demostrar que la simulación estuviera trabajando de forma adecuada. Para este caso de prueba se realizó un barrido de frecuencias de 100 Ghz a 2000 Ghz con intervalos de 50 Ghz y un mallado sencillo para disminuir el tiempo de la simulación. Se obtuvo como resultado un desplazamiento de la frecuencia de resonancia hasta 1800 Ghz como se muestra en la figura 5.3.

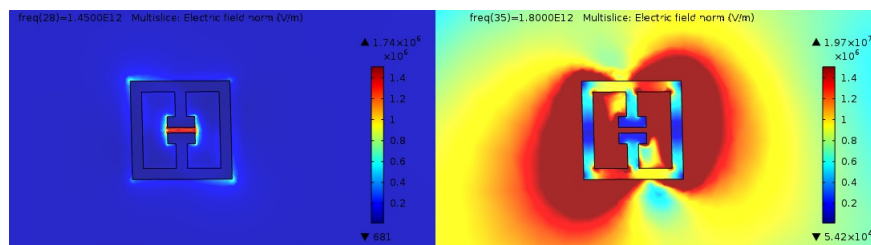


Figura 5.4: Izquierda imagen del campo eléctrico del resonador simulando una onda a una frecuencia en la que no resuena. A la derecha el campo eléctrico del mismo resonador simulando la incidencia de una onda a su frecuencia de resonancia.

Como tercer paso se realizó la simulación de la misma estructura pero utilizando una lista de los índices de refracción que obtuvimos mediante el código de MATLAB mencionado anteriormente con el cual tenemos valores más reales para cada frecuencia a la que se simula y se obtuvo una gráfica con mejor definición y una resonancia en 1920 Thz.

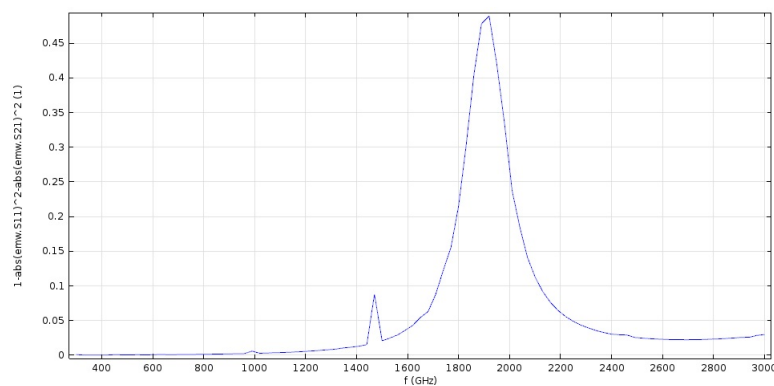


Figura 5.5: Resonancia en una frecuencia de 1.92 Thz de cerca de 50%. Se puede observar un pequeño pico de absorción de menos de 1% cerca de 1.5 Thz.

*Capítulo 5. TRABAJO REALIZADO MEDIANTE LA SIMULACIÓN DE
DIVERSAS ESTRUCTURAS RESONANTES EN EL RANGO DE TERAHERTZ*

Un segundo diseño que se decidió implementar fue basado en uno que resonara fuera del rango de Thz realizando la adaptación a este rango por medio de la modificación de su tamaño, en este caso se eligió del artículo “Metamaterial based broadband RF absorber at X-band” [13]. Para obtener resonancias con longitudes de onda entre $100 \mu\text{m}$ y 1mm el tamaño del resonador debe ser menor a $100 \mu\text{m}$ (menos de 10 veces el tamaño de la longitud de onda).

El resonador presentado en el artículo se comporta como tal en dos frecuencias (doble resonancia) alrededor de 9.1GHz y 10.53GHz . Basándonos en la simulación anterior y el tamaño del resonador se decidió darle las mismas magnitudes del anterior y analizar su comportamiento, se simuló el resonador con un área de $36 \times 36 \mu\text{m}^2$ teniendo este una forma de I encerrada en un marco cuadrado exterior con dos gaps en lados opuestos como se muestra en la figura 5.6.

Se obtuvieron dos picos de resonancia ubicados en 3.19Thz y 3.85Thz 5.7 similares a los demostrados en el artículo, pero ubicados en las frecuencias de interés de los Thz.

Algo interesante observado en las imagenes es el campo eléctrico de los resonadores, en donde se puede apreciar una diferencia en el campo eléctrico de la resonancia que muestra cada pico como se observa en las imagenes 5.8.

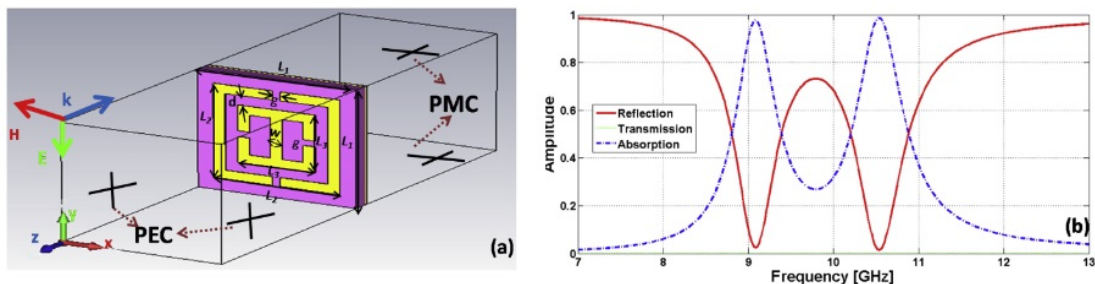


Figura 5.6: Izquierda imagen de la geometría que se analiza en el artículo, Derecha grafica de la doble resonancia que muestra la geometría.

*Capítulo 5. TRABAJO REALIZADO MEDIANTE LA SIMULACIÓN DE
DIVERSAS ESTRUCTURAS RESONANTES EN EL RANGO DE TERAHERTZ*

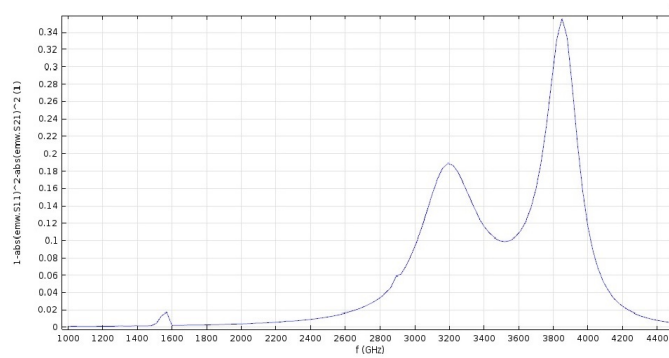


Figura 5.7: Imagen de la frecuencia de resonancia encontrada con la simulación así como el campo magnético en resonancia.

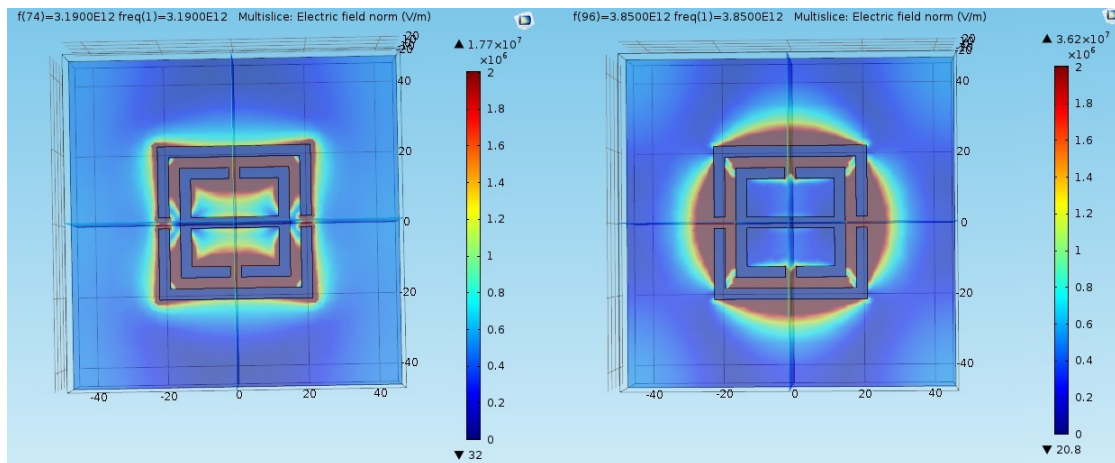


Figura 5.8: Imágenes del campo eléctrico del mismo resonador a diferentes frecuencias de resonancia, Izquierda resonando a 3.19 Thz. Derecha resonancia en 3.85 Thz.

Capítulo 5. TRABAJO REALIZADO MEDIANTE LA SIMULACIÓN DE DIVERSAS ESTRUCTURAS RESONANTES EN EL RANGO DE TERAHERTZ

Uno de los principales artículos que documentan una absorbancia del 70 % con un resonador con geometría de doble anillo partido [4] muestra una resonancia a 1.3 THz. Tomando en cuenta que en las simulaciones realizadas en nuestro laboratorio no se añade el sustrato debido a que el tiempo de simulación crece de manera considerable y que se realizó la simulación tomando un solo valor de índice de refracción, se logró obtener una resonancia a 320GHz con una absorbancia del 60 % como se muestra en la imagen 5.9.

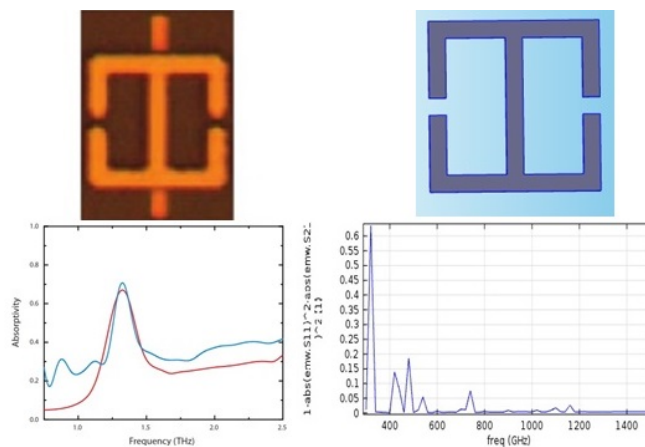


Figura 5.9: Izquierda imagen de la geometría y las resonancias mostradas en el artículo [4]. Derecha imagen de la geometría y la resonancia mostradas en las simulaciones realizadas en este trabajo.

También podemos observar el campo eléctrico que se forma en los resonadores al estar o no en resonancia como muestra la figura 5.10.

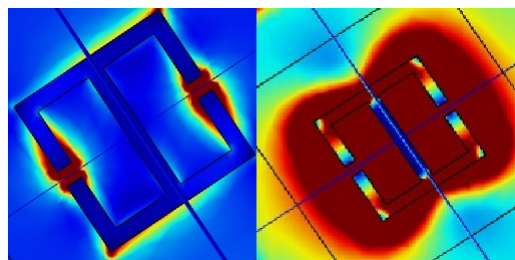


Figura 5.10: Izquierda imagen del resonador sometido a una onda plana de 340 Ghz. Derecha imagen del mismo resonador sometido ahora a la que demostró ser su frecuencia de resonancia en la simulación (320 Ghz).

Capítulo 5. TRABAJO REALIZADO MEDIANTE LA SIMULACIÓN DE DIVERSAS ESTRUCTURAS RESONANTES EN EL RANGO DE TERAHERTZ

Posteriormente se realizó la misma simulación tomando los valores de índice de refracción para cada frecuencia y se obtuvo una resonancia en 1.68 Thz con una absorbancia del 50 % mostrados en la imagen 5.11.

En este resultado se observa un gran cambio en la frecuencia de resonancia a diferencia de utilizar un solo valor del índice de refracción, la corrección de la simulación muestra una respuesta más cercana a la real y se corroborará posteriormente con la caracterización del arreglo.

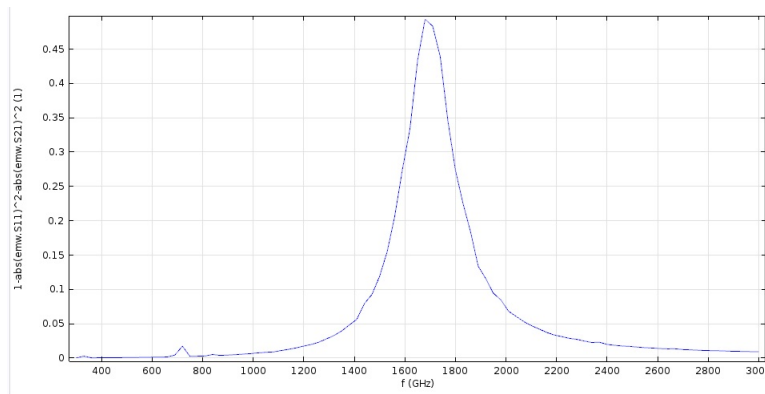


Figura 5.11: Gráfica de absorbancia vs frecuencia del resonador, resonancia en 1.68 Thz.

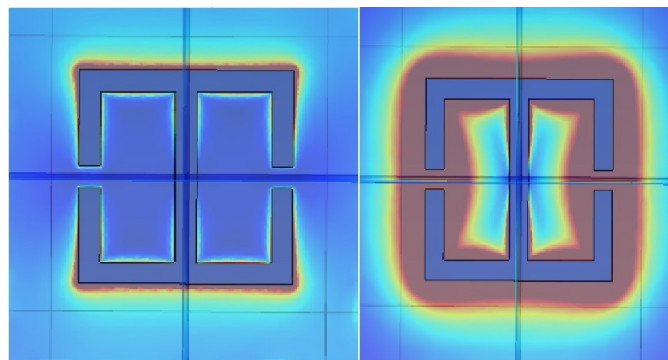


Figura 5.12: Izquierda imagen del campo eléctrico del resonador fuera de la frecuencia de resonancia. Derecha imagen del campo eléctrico del resonador en su frecuencia de resonancia.

*Capítulo 5. TRABAJO REALIZADO MEDIANTE LA SIMULACIÓN DE
DIVERSAS ESTRUCTURAS RESONANTES EN EL RANGO DE TERAHERTZ*

Otro de los objetivos es no sólo analizar geometrías individuales si no arreglos de las mismas ya que existe una impedancia entre geometrías cercanas que pueden modificar también la frecuencia de resonancia. Se realizó el análisis en arreglos de 2 x 2 geometrías en forma de I o cuadrados de 30 x 30 μm cada uno y con gap en lados opuestos como se observa en la figura 5.13 separadas 10 μm entre sí. Este arreglo de geometrías da como resultado una resonancia en conjunto de 1.4 THz.

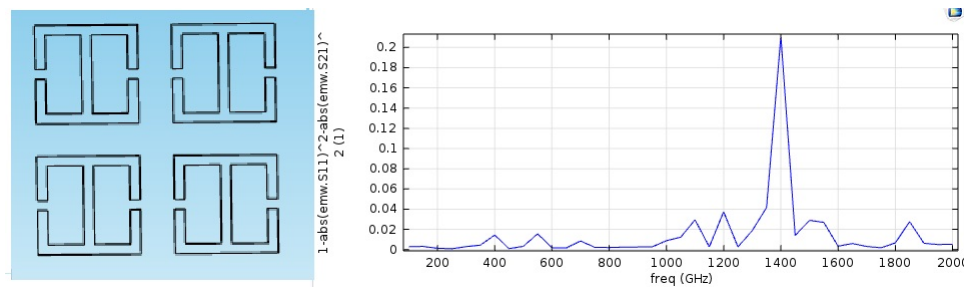


Figura 5.13: Imagen de la frecuencia de resonancia encontrada con la simulación así como el campo magnético en resonancia.

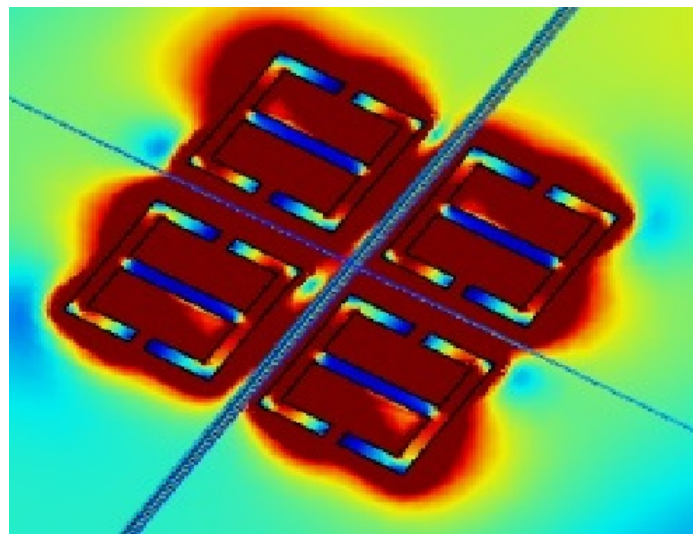


Figura 5.14: Arreglo de 4 resonadores en forma de I en resonancia.

Se realizó el trabajo de simulación sobre otro diseño de resonadores de banda dual que como vimos anteriormente muestran una doble resonancia en dos frecuencias cercanas. Este diseño se tomó del artículo “Terahertz dual band resonator on silicon” [22].

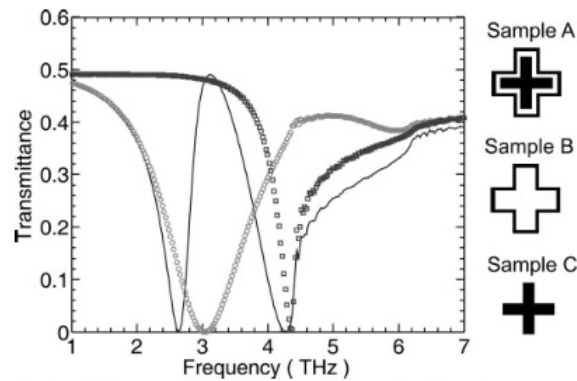


Figura 5.15: Imagen tomada del artículo [22] donde se muestra la forma del resonador así como las frecuencias a la que resuena. En la gráfica se muestra con una curva sólida la doble frecuencia de ambas geometrías así como la resonancia del patrón primario(marco) con un patrón circular y con un patrón cuadrado la resonancia de la geometría secundaria (cruz interna).

Se muestra un resonador en forma de cruz con un marco al rededor en la misma forma. La geometría tiene dimensiones de $15 \times 15 \mu\text{m}$ y la cruz interior mide $11 \mu\text{m}$ de lado a lado. en el artículo se muestran resonancias en 2.6 y 4.7 THz. Considerando el marco exterior como un patrón primario y la cruz interior un patrón primario, se demuestra en el artículo que cada uno contribuye a una de las resonancias, para el patrón primario se muestra la resonancia cerca de los 3 THz mientras que el patrón secundario se muestra más cercano a los 4.3 THz. Al unir los dos patrones tenemos como resultado ambas frecuencias de resonancia, pero con un corrimiento debido al acople que existe entre las dos geometrías.

En nuestro trabajo se realizó la simulación que nos muestra los picos de absorción muy próximos a las regiones especificadas como se muestra en las imágenes de la fig. 5.16. Observamos los picos de resonancia en 3.12 THz y 4.83 THz.

En la s figuras 5.17, se muestran los campos eléctricos de las estructuras en las dos frecuencias de resonancia, se nota una gran diferencia en los campos que se forman.

*Capítulo 5. TRABAJO REALIZADO MEDIANTE LA SIMULACIÓN DE
DIVERSAS ESTRUCTURAS RESONANTES EN EL RANGO DE TERAHERTZ*

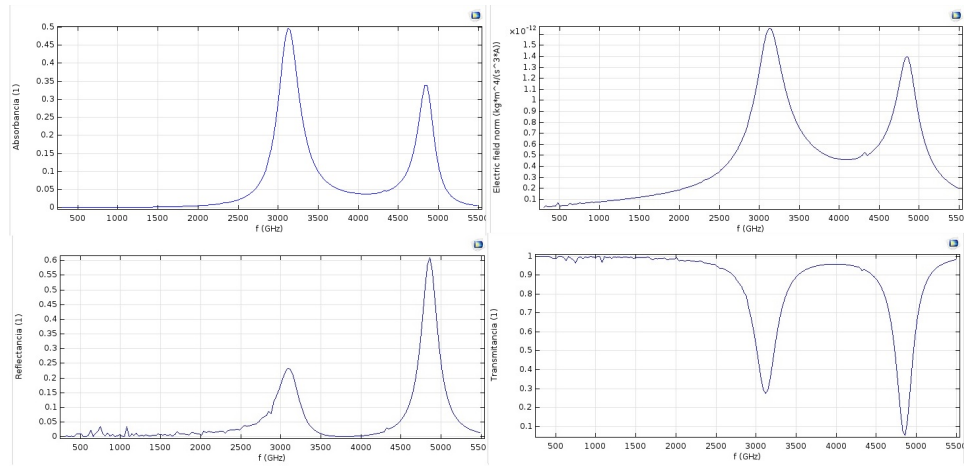


Figura 5.16: Se muestran también los espectros de transmitancia y reflectancia, así como el campo eléctrico de la estructura resonante.

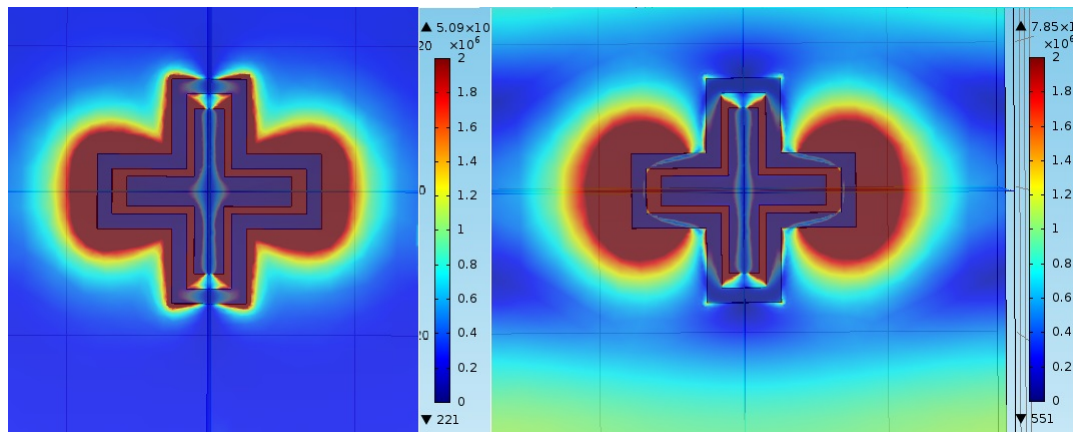


Figura 5.17: Imagen del campo eléctrico del resonador en sus frecuencias de resonancia.

*Capítulo 5. TRABAJO REALIZADO MEDIANTE LA SIMULACIÓN DE
DIVERSAS ESTRUCTURAS RESONANTES EN EL RANGO DE TERAHERTZ*

Una de las ideas innovadoras en este trabajo es el hecho de discretizar los resonadores. Se ha demostrado que la discretización de los arreglos de estos resonadores modifica las propiedades de estos produciendo una mejora en la captación de la energía de la onda.

Se realizó la discretización de esta antena dual sobre la cruz interna de la antena como se puede observar en la imagen 5.18.

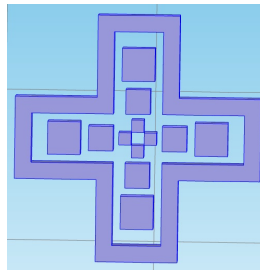


Figura 5.18: Resonador con la cruz central discretizada.

Cuya doble resonancia se muestra de igual forma en la gráfica 5.19. Esta gráfica nos muestra una doble resonancia muy similar a la cruz normal, pero con un par de picos de absorbanza intermedios que podrían significar una triple o cuadruple bandas de absorbanza. Cabe mencionar que para corroborar esto se requiere realizar una simulación muy extensa debido a que la geometría en si presenta un problema más complejo para el simulador ya que el mallado que se debe realizar tiene que ser mucho más fino que los anteriores, esto nos lleva a requerir del uso de una mayor potencia de computo.

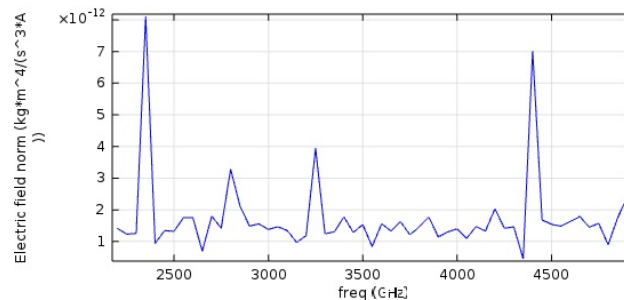


Figura 5.19: Gráfica de campo eléctrico vs frecuencia de la cruz discretizada. Se muestra una doble resonancia muy similar a la de la cruz normal, pero se observan dos picos de absorbanza intermedios.

*Capítulo 5. TRABAJO REALIZADO MEDIANTE LA SIMULACIÓN DE
DIVERSAS ESTRUCTURAS RESONANTES EN EL RANGO DE TERAHERTZ*

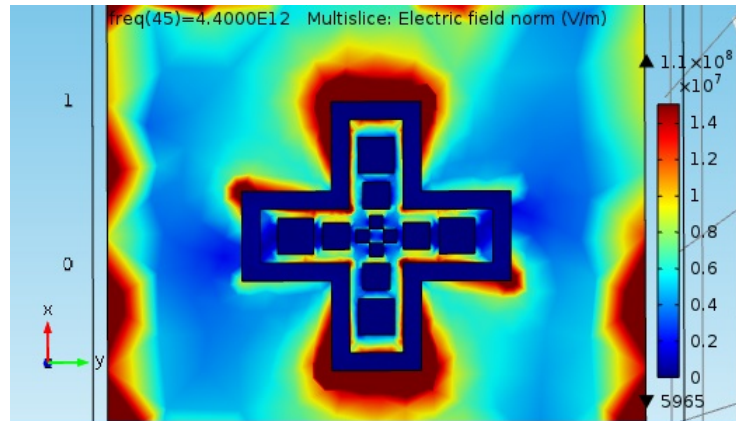


Figura 5.20: Cruz discreta en resonancia.

El siguiente ejemplo de resonador es un diseño simple de un resonador cuadrado de $50 \times 50 \mu\text{m}$ con dos barras en medio de la estructura que se separan por una distancia de $3 \mu\text{m}$ y $3 \mu\text{m}$ de grosor de línea 5.21.

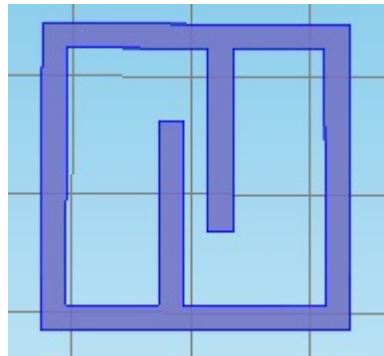


Figura 5.21: Resonador en forma de cuadrado con dos bandas contrapuestas en el centro del resonador que realizan la función de capacitores.

Esta geometría muestra un pico de resonancia de cerca de 50% en 1.17 THz y otros dos picos menores en 1.68 THz y 2.37 THz.

En las siguientes figuras se muestran los campos eléctricos de cada resonancia.

Capítulo 5. TRABAJO REALIZADO MEDIANTE LA SIMULACIÓN DE DIVERSAS ESTRUCTURAS RESONANTES EN EL RANGO DE TERAHERTZ

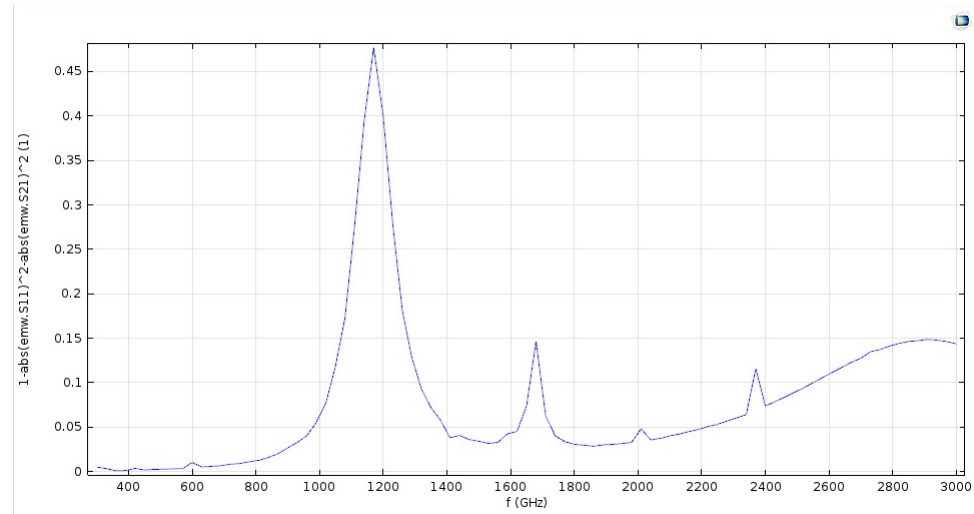


Figura 5.22: Gráfica donde se muestran las 3 resonancias de la geometría mostrada.

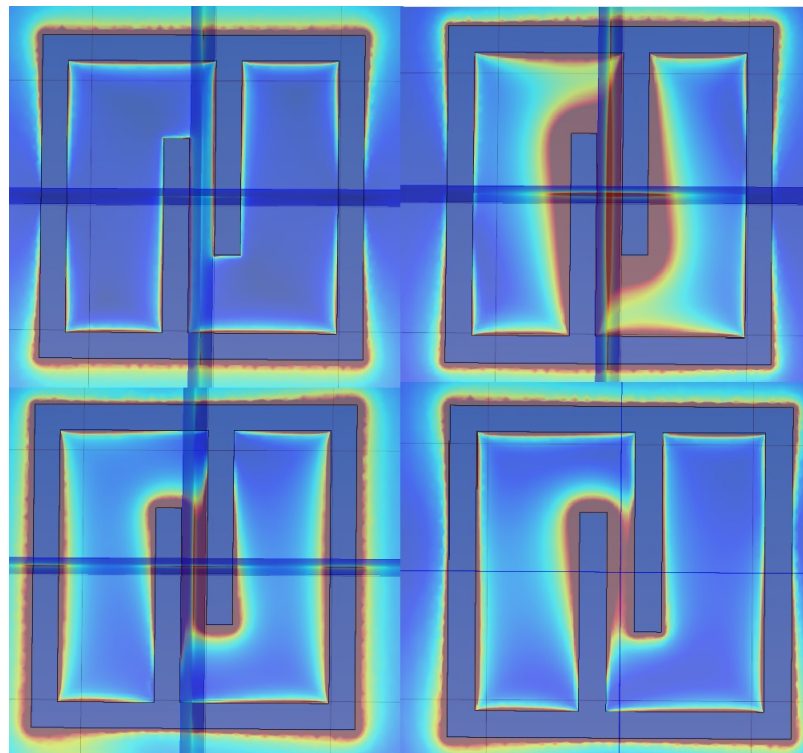


Figura 5.23: Arriba,(Izquierda) resonador fuera de frecuencia de resonancia, (Derecha)Resonancia en 1.17 Thz.Abajo (Izquierda)Resonancia en 1.68 Thz,(Derecha) Tercera resonancia en 2.37 Thz.

Capítulo 6

FABRICACIÓN DE LOS METAMATERIALES POR MEDIO DE LITOGRAFÍA DE HAZ DE ELECTRONES

6.1. Bases de la litografía de haz de electrones

De manera paralela a las simulaciones se llevó a cabo el estudio y proceso de fabricación de los dispositivos por medio de litografía de haz de electrones (EBL), ya que se cuenta con un equipo de litografía de haz de electrones incorporado a un microscopio electrónico de barrido en el laboratorio de microscopía electrónica de la Coordinación para la Innovación y la Aplicación de Ciencia Y la Tecnología (CIACYT).

La litografía por haz de electrones Es un proceso de litografía sin máscara, debido a que se realiza incidiendo un haz de electrones sobre la resina fotosensible. Se puede decir que el patrón es trazado en la resina fotosensible punto por punto, es por eso que tiene una resolución muy alta, pero el proceso es demasiado lento como para usarse en una producción de volumen muy alto. La gran ventaja de este proceso es que la difracción de los electrones es despreciable, y que se puede enfocar fácilmente el haz de electrones en cualquier punto de la resina con un campo magnético o

electrostático.

Aparece a finales de los 60 y actualmente se ha convertido en una de las técnicas estándar de fabricación de nano estructuras [11]. La ventaja de utilizar haces de electrones son que estos son fáciles de manipular mediante lentes electromagnéticas y ya que los electrones son de pocos nanómetros de tamaño pueden moverse y posicionarse los haces con mucha precisión creando así estructuras muy pequeñas y muy bien definidas de hasta unos 5 nm. Generalmente estos equipos de litografía se utilizan a la par de equipos de microscopía electrónica de barrido (scanning electron microscope, SEM) que proporcionan haces con diámetros de entre 1 y 20 nm.

El microscopio electrónico de barrido se compone de una cámara de vacío en la cual está instalada en la parte central una fuente de electrones ya sea de emisión de campo o de filamento de tungsteno al cual aplicándosele un voltaje aproximadamente de entre 1 y 30 KV los electrones son acelerados. Se localizan también los lentes que realizan la colimación de los haces, así como los detectores y un sistema de visualización y control.

Para poder obtener la información de la muestra que se está observando con el SEM, lo que se hace es bombardear con el haz de electrones la superficie de la muestra la cual al interactuar con el haz emite electrones de regreso así como dispersa otros. Los detectores se encargan de recolectar estos electrones que ya contienen mucha información sobre la muestra y desplazando el haz por toda ella podemos lograr una imagen precisa y de muy alta resolución.

La litografía tiene un proceso muy similar utilizando el haz de electrones en un proceso de escritura directa sobre la muestra. Es necesario crear un patrón con en la interfaz del software de litografía que será el cual vamos a grabar sobre nuestro sustrato. Para poder realizar el grabado es necesario el uso de una resina fotosensible de alta resolución, se utiliza PMMA (Polimetil metacrilato), la cual se deposita sobre el sustrato previamente al proceso de litografía. Una vez depositada, se realiza la escritura para posteriormente realizar un proceso de revelado el cual tendrá como fin remover las porciones de resina no deseadas, este consiste en MIBK(methyl isobutyl ketona):IPA(Isopropyl alcohol) en una relación 1:3 para una máxima resolución.

Ya revelada la resina se seca mediante sopleteo con Nitrógeno (N₂). Opcionalmente se puede realizar un Postbake para remover residuos del revelador, solvente o

humedad no deseados [1].

Una vez terminado el revelado se realiza un proceso de metalización en el cual se deposita un metal que se elige dependiendo de las características que se deseen para la creación de la estructura que se ha diseñado.

6.2. Proceso de litografía realizado en el laboratorio

Para realizar la fabricación de los resonadores se utilizó como sustrato obleas de Si con una capa de óxido de silicio de 300nm cortadas en cuadros de 1 cm x 1cm en donde se realizó el depósito de la resina. Para realizar el depósito se utilizó un spinner “6500 Spin Coating Series” con el cual se realizaron diversas pruebas para determinar la cantidad de resina y el número de revoluciones a los que se debía programar para obtener una capa de resina de 400nm de grosor basándonos en las instrucciones del datasheet de la resina [1]. El PMMA al que se tuvo acceso fue el PMMA 950 A4 cuyas especificaciones muestran que para obtener el grosor deseado de la resina sobre el sustrato se debían de usar 1500 revoluciones. Las pruebas posteriores de cantidad de PMMA a depositar y el tiempo del horneado se fueron perfeccionando hasta lograr las características requeridas en este proceso. Se detalla el tiempo en el Spinner de un minuto a 1500 RPM con un depósito de 40 μm de resina sobre el sustrato de 1cm x 1cm y un tiempo de horneado de 7 min. a una temperatura de 190°.

Para asegurarnos de que el grosor de la resina fuera el correcto se llevó a cabo el análisis por medio de elipsiometría, que es una técnica precisa y exacta para la caracterización de películas delgadas, sustratos o sistemas película-sustrato. En este método se miden los cambios de polarización de la luz, después de haber sido reflejada desde alguna superficie. Esta técnica no invasiva ni destructiva consiste en incidir un haz de luz colimada con un estado de polarización conocida sobre el material de estudio. Posteriormente se modifica el estado de polarización de este láser por medio de un polarizador a una forma lineal. Después de la interacción luz-sólido el estado de polarización cambia y se determina con un analizador, que es un elemento óptico que rectifica la polarización y le da forma a la intensidad de luz final que llega al detector.

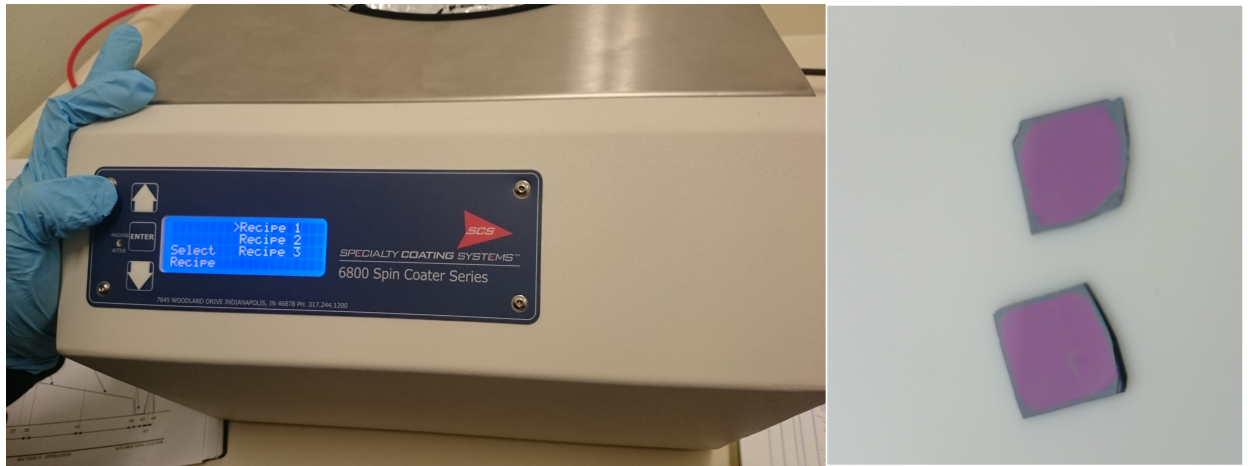


Figura 6.1: Se muestran las imágenes del Spinner y el resultado del depósito de la resina en dos sustratos.

Una vez se tienen el depósito de la resina en los sustratos se procede a hacer la litografía o escritura el microscopio electrónico de barrido. Para esto se debe tener la geometría deseada en el programa interfaz del sistema de litografía. En el caso de nuestro laboratorio contamos con el software “ELPHY Quantum”. Esta interfaz cuenta con un editor en el cual se pueden realizar diseños sencillos así como algunos más complejos y cuenta con copiado y reproducción de matrices a partir de un diseño base. Es posible también importar un archivo de imagen creado previamente en el programa de “AUTOCAD”. Los diseños creados para este trabajo son diseños sencillos fácilmente realizables en este editor.

Para realizar la litografía primero se deben depositar los sustratos en la base dedicada a las muestras de la cámara de vacío del microscopio. Para liberar la cámara y poder abrirla es necesario ventilarla y esto se logra desde el programa control del mismo microscopio. Una vez abierta la cámara de vacío se puede observar una base de metal en la cual existen 3 espacios de muestras, uno de los cuales se asigna al “Chessy board” el cual es una plaquita cuadrada con una de sus caras en forma de tablero de ajedrez en la cual cada cuadro de color está formado de otros cuadros en forma de tablero de ajedrez, pero de tamaños mucho más pequeños a los primeros y así sucesivamente (Fig. 6.2). Este chessy board sirve para poder alinear y registrar coordenadas que servirán para poder realizar la litografía de una manera muy precisa.



Figura 6.2: Imagen del “Chessy board” y de dos sustratos acomodados a los lados.

al colocar los sustratos es muy importante verificar que queden bien acomodados sin levantarse y sin tapan la “Faraday cup” de la cual hablaré enseguida. Acomodadas las muestras se procede a tomar una fotografía por medio de una cámara móvil adaptada a la puerta de la cámara de vacío, esta imagen será muy útil como referencia para poder desplazarnos sobre los sustratos una vez cerrada la cámara. La imagen aparece en la pantalla y se procede a cerrar la cámara para crear el vacío necesario para el proceso de escritura. Una vez en vacío el software nos indica que está listo para proceder. Para observar imágenes es recomendable usar voltajes de 5 o 10 KV ya que voltajes más altos pueden dañar las muestras, sin embargo, para escritura el microscopio nos permite usar voltajes de hasta 30 KV. El tamaño del spot también es muy importante, para la escritura un menor tamaño lleva a líneas más definidas.

Establecidos estos parámetros es posible ver imágenes muy definidas de hasta apenas unos nanómetros así como crear líneas de escritura de las mismas proporciones. Para nuestros resonadores no es necesario una definición nanométrica ya que se trabaja en el orden de $1 \mu\text{m}$ para las líneas más delgadas que se utilizarán.

Es importante visualizar en el sustrato un área limpia de imperfecciones para un grabado óptimo, así una vez seleccionada el área donde se desea crear el diseño, recurrimos de nueva cuenta al software de interfaz ELPHY Quantum aquí seleccionamos el área por medio de coordenadas tanto del chessy board como del sustrato.

Lo siguiente es propio ya del proceso de litografía y es la introducción de paráme-

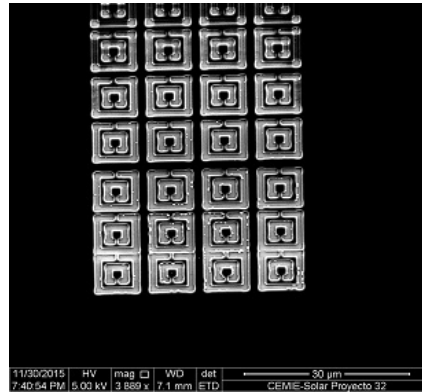


Figura 6.3: Imagen resultante de prueba de dosis para un resonador cuadrado de anillo partido.

tros elegidos por el usuario dependiendo de las características que desee obtener como resultado. La cantidad de voltaje de escritura y el tamaño de spot elegidos nos proporcionarán la cantidad de corriente necesaria para realizar el trabajo, para obtener este parámetro se usa la Faraday cup la cual mencionamos antes, esta es un tipo de copa de metal designada para atrapar partículas cargadas en el vacío. La corriente que resulta puede ser medida y usada para determinar el número de electrones que golpean la copa.

Existen otros parámetros tales como la dosis con la cual podemos especificar al programa la cantidad de cargas que se van a incidir por área por segundo, esto determinado también por el grosor de la línea que se desea obtener la velocidad de escritura, el tamaño de escritura en cada paso del proceso entre otros, variables que dependen todas entre sí y que el programa puede calcular fácilmente si asignamos algunos de estos valores. De la misma forma que con el spinner, se realizaron pruebas para determinar que parámetros nos resultaban en una mejor escritura, para determinar la dosis, es posible realizar lo que llamamos pruebas de dosis que consisten en tener una matriz las de geometrías de los resonadores y el programa nos da la opción de variar la dosis individual de cada resonador con lo cual en una sola sección podemos tener litografía a diferentes dosis y así determinar la cantidad que muestra una mejor definición, un ejemplo de esto se muestra en la figura 6.3.

Una vez realizada la litografía en ambos sustratos se procede a abrir la cámara de vacío para poder realizar el proceso de revelado que se describió en la sección

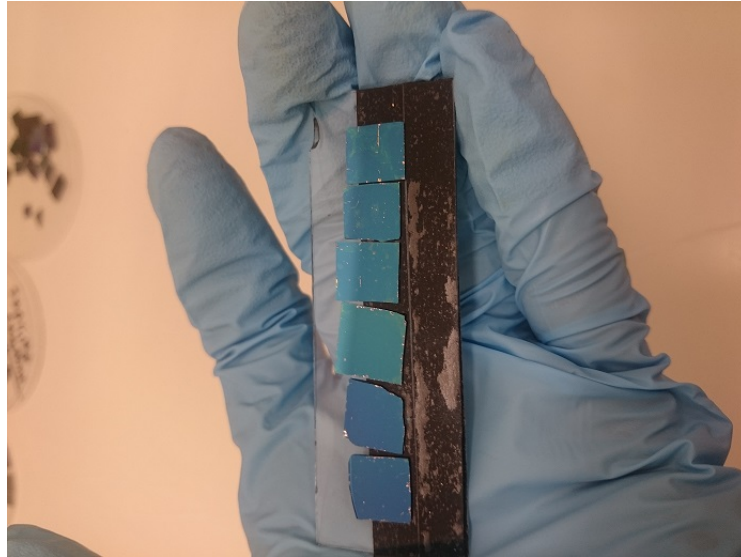


Figura 6.4: Sustratos metalizados mediante la técnica de evaporación.

anterior. Esta parte es crucial puesto que un exceso de tiempo de revelado nos puede llevar a un sobre revelado y un menor tiempo nos mostrará una menor definición en nuestras geometrías. Se realizaron diversas pruebas observando que para cada diseño de resonadores se debía usar diferentes tiempos de revelado dependiendo del tamaño en general del resonador, del tamaño de sus partes más finas y la definición que se desee. Tiempos de entre 1 y 2 minutos fueron empleados para obtener buenos resultados dependiendo la geometría grabada.

Teniendo el patrón de litografía sobre el sustrato ya revelado, lo siguiente es agregar el metal, en este caso se trabajó con oro, para esto se utilizan técnicas de “evaporación de metales” o de “sputtering” obteniendo una capa de oro de aproximadamente 100nm. Se muestra una imagen de los sustratos metalizados en la fig. 6.4.

Se muestran dos imágenes más de pruebas de dosis realizadas 6.5 , 6.6.

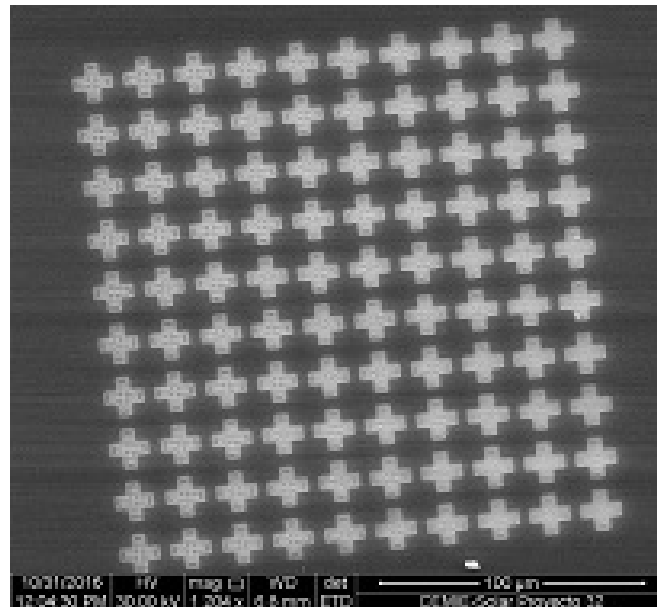


Figura 6.5: Arreglo de resonadores en forma de cruz con marco.

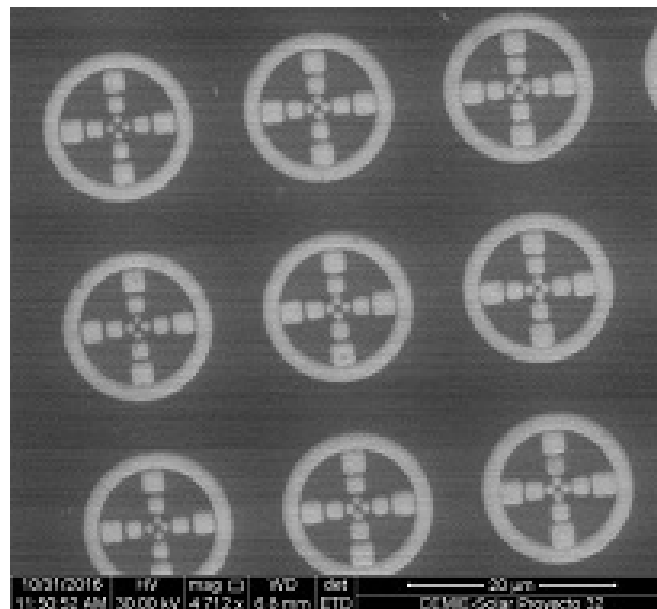


Figura 6.6: Arreglo de resonadores de cruz discreta con marco circular. Se propuso este arreglo y sus simulaciones estan en proceso.

El último paso es eliminar el metal excesivo sobre el sustrato, está capa de metal

está adherida a la resina y no al sustrato, solo una parte del metal logró llegar y pegarse al sustrato en la región donde se hizo la litografía de nuestro diseño. Este paso se denomina “Lift off” y consiste en remover tanto la resina como el metal sobrante mediante el uso de acetona. Se deja el sustrato un día en la acetona para que esta penetre en todo el PMMA y así pueda ser removido. Pasado este tiempo se puede remover con mucho cuidado los residuos más pequeños por medio de lapsos de sonicación en la acetona cuidando el no dañar los arreglos.

A continuación se muestran las imágenes de los diversos arreglos obtenidos mediante estas técnicas.

Geometría de resonador cuadrado de anillo partido.

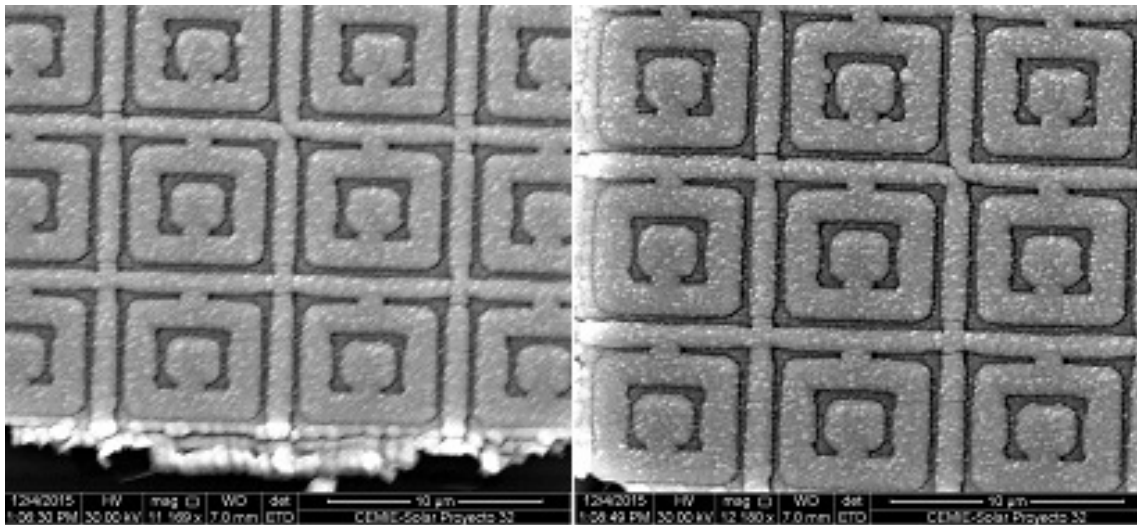


Figura 6.7: Geometrías en forma de anillo partido. Se muestra en la imagen las primeras metalizaciones hechas en donde se observa la geometría cuadrada, pero el metal excesivo no se logró eliminar por lo que quedó una capa bromosa fuertemente pegada al resonador.

Ahora se muestra un arreglo de resonador cuadrado con placas en el centro 6.8, el arreglo se hizo de 10x10 resonadores y cada uno de ellos de 30x30 μm .

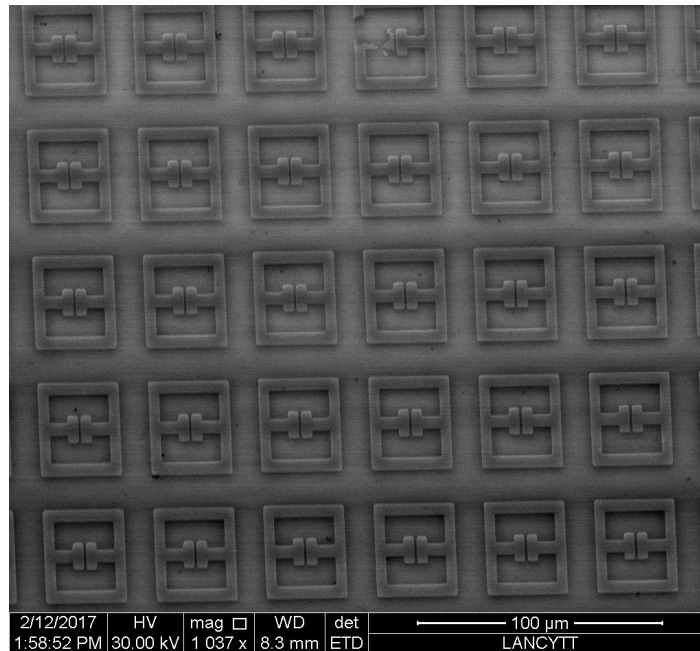


Figura 6.8: Arreglo de resonadores del primer resonador mostrado en la sección de simulaciones, para detección de microorganismos.

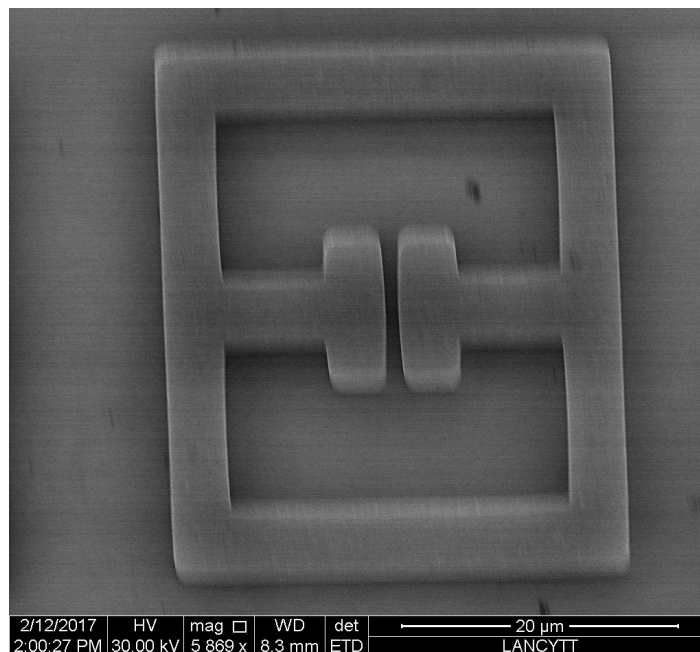


Figura 6.9: Zoom de uno de los resonadores anteriormente mostrados.

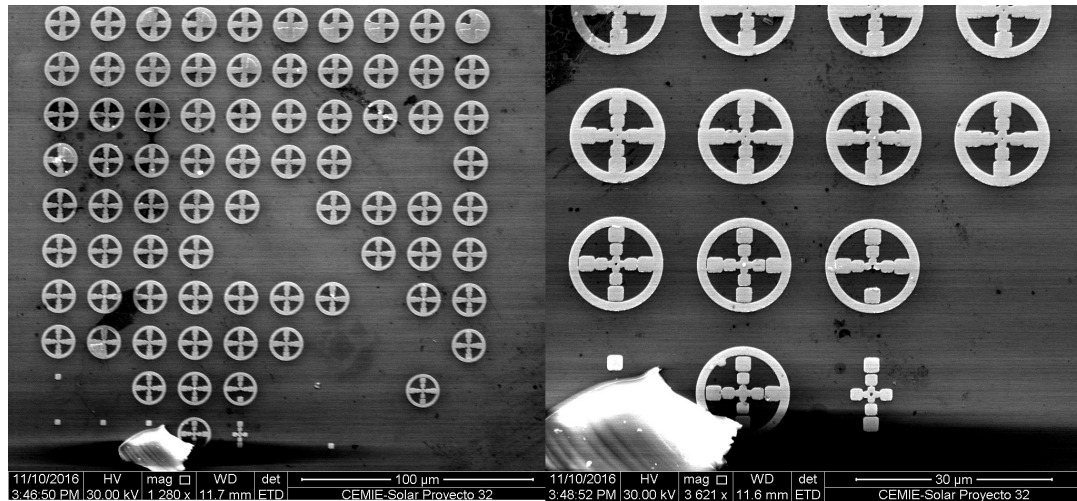


Figura 6.10: Geometría circular discreta metalizada en pruebas de dosis para definir los patrones ms pequeños.

La siguiente geometría es un resonador cuadrado de $50 \times 50 \mu\text{m}$ con dos placas separadas en el centro de la figura. El grosor de cada línea es de $3 \mu\text{m}$ así como el espacio entre las barras.

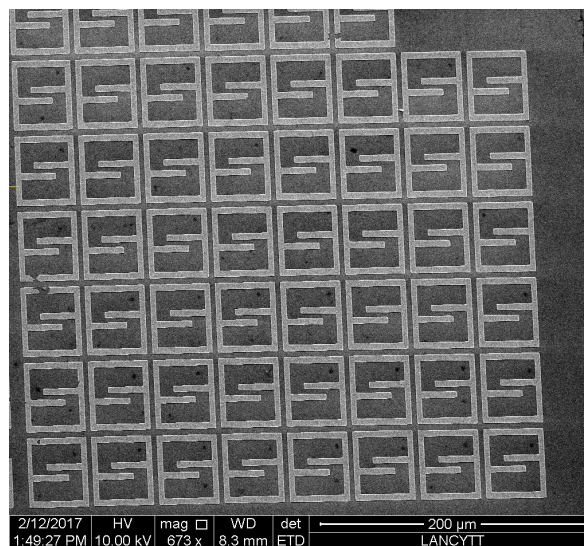


Figura 6.11: Geometría en forma de resonador cuadrado con placas cruzadas que hacen la función de capacitores.

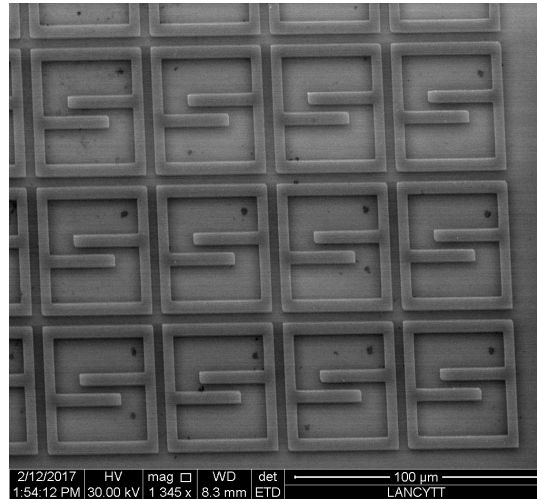


Figura 6.12: Zoom al arreglo anterior donde se observan más definidas las líneas y la separación de cada resonador.

El siguiente resonador perdió en cuatro arreglos un poco del metal pero se logra ver una buena definición en cada arreglo, sus medidas son de $50 \times 50 \mu\text{m}$ y cada línea mide $3 \mu\text{m}$ de grosor y la separación entre los resonadores es de $3 \mu\text{m}$, así como la separación del gap de los resonadores.

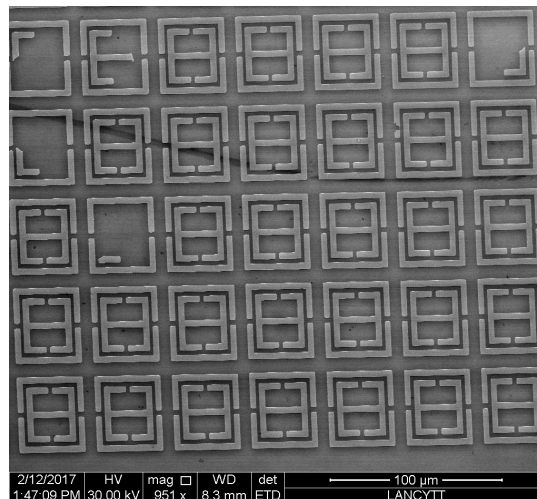


Figura 6.13: Geometría en forma de I dentro de un resonador cuadrado de anillo partido por dos lados.

Capítulo 7

TRABAJO A FUTURO

Dados los buenos resultados de las simulaciones se procederá a llevarlas a cabo con una mayor definición realizando un muestreo más fino, lo que nos dará resultados con mayor detalle y se podrán observar mejor los máximos de absorbancia posibles para cada geometría.

Del mismo modo se procederá a realizar las simulaciones agregando otros elementos como lo son el sustrato, elementos que generan aún mayores incrementos de absorbancia. Se tienen simulaciones de prueba con sustratos que han demostrado su funcionamiento y aun se están corrigiendo algunos detalles para optimizarlas.

Se analizará a fondo la discretización de los resonadores para observar su comportamiento, determinar qué tan factible es su funcionamiento y las propiedades que nos puedan ofrecer.

Se fabricarán los resonadores que hayan demostrado o demuestren en posteriores simulaciones un mayor incremento de absorbancia.

Se realizará la caracterización de estos resonadores y se compararán los resultados obtenidos con las simulaciones.

Capítulo 8

CONCLUSIONES

En este trabajo se pretende demostrar que el uso de metamateriales tiene un gran potencial por explorar en frecuencias en terahertz, más específicamente en el llamado gap de los terahertz.

Se ha demostrado mediante las simulaciones el uso de varias geometrías de resonadores que pueden ser útiles en este rango de frecuencias.

Se propuso una corrección a la forma de simular comparando el usar solo un valor de índice de refracción para todas las frecuencias simuladas, a usar mediante un código sencillo y práctico de MATLAB valores más cercanos a los reales del índice de refracción para todas las frecuencias simuladas.

Todas las geometrías mostraron una resonancia en este rango de frecuencias y se puede observar el aumento en la absorbancia que va desde el 12% en el resonador en forma de I en un marco cuadrado con dos gaps, hasta el 60% en el resonador en forma de I, así como en el campo eléctrico de cada elemento, cuyos incrementos fueron de $1 \times 10^{-12} [Kg * m^4 / s^3 A]$ sin resonar hasta $8 \times 10^{-12} [Kg * m^4 / s^3 A]$ al entrar en resonancia como se puede observar en la gráfica 5.19.

Se obtuvieron resonadores duales modificando el tamaño del resonador para que resonaran en las frecuencias de terahertz con éxito.

Se demostró un aumento de bandas de resonancia al discretizar una geometría y se pretende mejorar su análisis.

La fabricación en nuestro laboratorio es posible con buen detalle y definición de los arreglos y se seguirá trabajando en obtener las geometrías faltantes para su

posterior caracterización.

La discretización de las antenas muestra un comportamiento esperado donde se obtiene la frecuencia de resonancia del resonador en el que se basa pero presentando algunos picos extra con lo cual se podría realizar posteriormente un análisis de resonadores multibandas en este rango de frecuencias.

Bibliografía

- [1] *NANO PMMA and Copolymer Developer Datasheet*.
- [2] A Roitberg A. G. Markelz y E. J Heilweil. Pulsed terahertz spectroscopy of dna, bobine serum albumin and collagen between 0.1 and 2.0 thz. *Chemical Physics Letters*, 2000.
- [3] Carmen A. Mannella Abdellah Menikh, Robert MacColl y Xi-Cheng Zhang. Terahertz biosensing technology: Frontiers and progress. *ChemPhysChem*, 2002.
- [4] Hu Tao Et. All. A metamaterial absorber for the terahertz regime: Design, fabrication and characterization. *OPTICS EXPRESS*, 2008.
- [5] S. J. Park Et. All. Detection of microorganisms using terahertz metamaterials. *Scientific Reports*, 2014.
- [6] Wenshan Cai y Vladimir M. Shalaev. *Optical Metamaterials Fundamentals and applications*. Springer.
- [7] Filippo Capolino. *Theory and Phenomena of Metamaterials, Metamaterials Handbook*. CRC Press.
- [8] M. C. K. Wiltshire D. R. Smith, J. B. Pendry. Metamaterials and negative refractive index. *Science*, 305, 2004.
- [9] Ramón Díaz de León Zapata. Análisis electromagnético de nanoestructuras a frecuencias de terahertz. Para obtener el grado de Doctor en Ciencias Aplicadas, 2015.

-
- [10] Nader Engheta y Richard W. Zilkowski. *Metamaterials Physics and Engineering Explorations*. Wiley-interscience.
- [11] Maria Villarroya Gaduó. *Diseño y fabricación de sistemas micr-nano electro-mecánicos integrados monolíticamente para aplicaciones de sensores de masa y sensores biológicos con palancas como elementos transductores*. Tesis Doctoral, 2005.
- [12] Roger F. Harrington. *Field computation by moment methods*. IEEE Press series on electromagnetics waves.
- [13] Hasan Kocer Kadir Ozden, Okan Mert Yucedag. Metamaterial based broadband rf absorber at x-ba. *Elsevier*, 2016.
- [14] Reinhold Kleiner. Filling the terahertz gap. *Applied physics*, 2007.
- [15] Barrales Morales Lucio. Diseño y construcción de una sonda para microscopía de campo cercano en frecuencias de thz. Tesis que para optar por el grado de maestro en ingeniería, 2014.
- [16] Carlos García Meca. Diseño de un metamaterial con índice de refracción negativo en el espectro visible. Proyecto Final de Carrera presentado en la Universidad Politécnica de Valencia para la obtención del título de Ingeniero de Telecomunicaciones, 2007.
- [17] Alfredo Jimenez Pérez Mitre. Análisis y optimización con interacción de dummy, de la carrocería del automóvil tubolare sand car de tecnoidea sa de cv, en impacto frontal empleando el método de elementos finitos en algor fea, mediante la simulación de eventos mecánicos. Tesis profesional para obtener el título en Licenciatura en Ingeniería Mecánica, 2004.
- [18] Saroj Rout. *Active Metamaterials for Terahertz Communication and Imaging*. Tesis Doctoral, 2016.
- [19] Jun-Hwan Shin, Kyung Hyun Park, y Han-Cheol Ryu. Electrically controlable terahertz square-loop metamaterial based on vo2 thin film. *Research Gate*, 2016.

-
- [20] Peter H. Siegel. Terahertz technology. *IEEE*, 2002.
- [21] B. Ung y Y. Sheng. Interference of surface waves in a metallic nanoslit. *OPTICS EXPRESS*, 2007.
- [22] A. Khalid Shimul C. Saha Yong Ma, Qin Chen y David R. S. Cumming. Terahertz dual band resonator on silicon. *OPTICS LETTERS*, 2010.
- [23] Xuhuai Zhang. *Optical Negative Index Metamaterials*. Tesis Doctoral, 2011.
- [24] O. C. Zienkiewicz y R. L. Taylor. *El método de los elementos finitos*. McGraw-Hill, 4 ed^{ón}.