



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE SAN LUIS POTOSÍ
FACULTAD DE CIENCIAS



ANÁLISIS Y FABRICACIÓN DE DISPOSITIVOS PARA TECNOLOGÍA DE TERAHERTZ

TESIS

PARA OBTENER EL GRADO DE:

DOCTOR EN CIENCIAS APLICADAS

PRESENTA:

M.C. BRHAYLLAN MORA VENTURA

DIRECTORES DE TESIS:

DR. FRANCISCO JAVIER GONZÁLEZ CONTRERAS

DR. GABRIEL GONZÁLEZ CONTRERAS

SAN LUIS POTOSÍ, SLP

SEPTIEMBRE 2021

TESIS DE DOCTORADO

NOMBRE DE LA TESIS:

ANÁLISIS Y FABRICACIÓN DE DISPOSITIVOS PARA TECNOLOGÍA DE TERAHERTZ

NOMBRE DEL ALUMNO:

BRHAYLLAN MORA VENTURA

COMITÉ QUE ACEPTA LA TESIS:

DIRECTOR

DR. FRANCISCO JAVIER GONZÁLEZ CONTRERAS

CO-DIRECTOR

DR. GABRIEL GONZÁLEZ CONTRERAS

SINODAL

DR. ÁNGEL GABRIEL RODRÍGUEZ VÁZQUEZ

SINODAL

DR. RAMÓN DÍAZ DE LEÓN ZAPATA

DECLARACIÓN DE AUTORÍA Y ORIGINALIDAD DE LA TESIS

Yo, Brhayllan Mora Ventura, estudiante del Posgrado en Ciencias Aplicadas de la Facultad de Ciencias de la Universidad Autónoma de San Luis Potosí, como autor/(a) de la tesis “Análisis y Fabricación de Dispositivos para Tecnología de Terahertz”, declaro que la tesis es una obra original, inédita, auténtica, personal, que se han citado las fuentes correspondientes y que en su ejecución se respetaron las disposiciones legales vigentes que protegen los derechos de autor y de propiedad intelectual e industrial. Las ideas, doctrinas, resultados y conclusiones a los que he llegado son de mi absoluta responsabilidad.

Resumen

De acuerdo con la literatura, algunas de las aplicaciones de la tecnología de terahertz son: aprovechamiento-conversión de energía solar y energía térmica desecho, también tiene aportaciones en el área médica, en la biología, en imagen, metrología, etc. Algunos avances en la teoría apuntan al diseño, fabricación y experimentación de novedosas estructuras. En otros casos, se han desarrollado modelos analíticos o numéricos para mejorar la producción de estructuras novedosas y obtener sus propiedades. Un ejemplo de lo mencionado anteriormente es el reciente interés en el electromagnetismo a nanoescala y sus aplicaciones en tecnología de los terahertz.

El enfoque de esta tesis es aportar al desarrollo de tecnología de terahertz principalmente en la optimización de la respuesta eléctrica y térmica, el alcance de nuestro trabajo es desarrollar tecnología para aplicaciones de aprovechamiento de energía térmica y su conversión a energía eléctrica, los objetivos son realizar primero un estudio mediante simulación numérica, posteriormente fabricar mediante litografía de haz de electrones las estructuras propuestas y por último realizar caracterizaciones eléctricas y térmicas de nuestros dispositivos, poniendo como prioridad el estudio de materiales, geometrías, diferentes tipos de sustratos con la finalidad de optimizar la respuesta eléctrica y térmica.

En el primer capítulo se mencionan las aplicaciones y el estado actual de la ciencia y tecnología de terahertz, se realizó una investigación de los principales desarrollos que se han tenido en los últimos 10 años.

El capítulo 2 presenta el método de simulación numérica utilizado, método de elemento finito (MEF), también se menciona la física utilizada en los modelos de simulación, y las generalidades sobre el software COMSOL Multiphysics.

En el capítulo 3 se describe el método de fabricación utilizado, la fabricación se hizo mediante litografía por haz de electrones, además en este capítulo se describe el proceso de depósito de materiales y preparación de muestras para posteriormente caracterizarlas.

Una de las aportaciones más importantes con este trabajo, se presenta en el capítulo 4, analizamos el efecto térmico de los sustratos en micro y nanoestructuras, dónde se realiza el estudio del material poliimida y dióxido de silicio.

En el capítulo 5 se presenta un estudio térmico tanto con simulación numérica y análisis experimental de microestructuras que funcionan como diodos térmicos.

Otro de los resultados y aportación es la fabricación de nano y microestructuras con propiedades capacitivas que pudieran operar en conjunto con dispositivos de aprovechamiento de energía solar. El estudio de estos dispositivos se presenta en el capítulo 6. Por último, en el capítulo 7 se presentan las conclusiones generales sobre el trabajo de investigación doctoral.

Los capítulos 4, 5, 6 muestran los resultados que se generaron con esta investigación, por último, en el capítulo 7 se presentan las conclusiones generales de este trabajo.

Abstract

According to the literature, some of the applications of terahertz technology are: solar energy and waste thermal energy use-conversion, it also has contributions in the medical area, biology, imaging, metrology, etc. Some advances in theory point to the design, fabrication, and experimentation of novel structures. In other cases, analytical or numerical models have been developed to improve the production of novel structures and to obtain their properties. An example of the above is the recent interest in nanoscale electromagnetics and its applications in terahertz technology.

The focus of this thesis is to contribute to the development of terahertz technology mainly in the optimization of the electrical and thermal response, the scope of our work is to develop technology for applications of thermal energy harvesting and its conversion to electrical energy, the objectives are to perform first a study by numerical simulation, then manufacture by electron beam lithography the proposed structures and finally perform electrical and thermal characterization of our devices, prioritizing the study of materials, geometries, different types of substrates in order to optimize the electrical and thermal response.

In the first chapter, the applications and current state of terahertz science and technology are mentioned; an investigation of the main developments that have taken place in the last 10 years was carried out.

Chapter 2 presents the numerical simulation method used, the finite element method (FEM), the physics used in the simulation models, and general information about the COMSOL Multiphysics software.

Chapter 3 describes the fabrication method used, the fabrication was done by electron beam lithography, also in this chapter the process of deposition of materials and sample preparation for subsequent characterization is described.

One of the most important contributions of this work is presented in chapter 4, where we analyze the thermal effect of the substrates in micro and nanostructures, where the study of the polyimide and silicon dioxide material is carried out.

Chapter 5 presents a thermal study with both numerical simulation and experimental analysis of microstructures that function as thermal diodes.

Another result and contribution are the fabrication of nanostructures and microstructures with capacitive properties that could operate in conjunction with solar energy harvesting devices. The study of these devices is presented in Chapter 6. Finally, Chapter 7 presents the general conclusions of the doctoral research work.

Chapters 4, 5, 6 show the results generated by this research, and finally, Chapter 7 presents the general conclusions of this work.

Agradecimientos

Al finalizar este proyecto de investigación quiero utilizar este espacio para expresar mi gratitud a todos los que han ayudado a hacer posible este trabajo.

Mi agradecimiento especial a toda mi familia, principalmente a mi madre, a mi tía Lety, a mi hermana que son mi motivación para seguir adelante, que siempre me han apoyado y confiado en mí, gracias por estar a mi lado.

Mi más sincero agradecimiento y admiración a mis asesores, Dr. Francisco Javier González Contreras y Dr. Gabriel González Contreras, por haber creído en mí, por su paciencia, dedicación, motivación, por darme la oportunidad de trabajar en su proyecto de investigación y por guiarme a lo largo del doctorado a través de su enseñanza y consejos. También estoy muy agradecido con el Dr. John Eder Sánchez, Dr. Javier Alda, Dr. Alexander Cuadrado, Dr. Ramón Díaz de León, Dr. Ángel Gabriel Rodríguez, Dr. Javier Méndez, Dr. Kolosovas, Dr. Edgar Guevara por su apoyo y ayuda para corregir los errores que he cometido en mi proceso de aprendizaje.

Quiero agradecer a mis colegas y amigos del Centro de Ciencia y Tecnología de Terahertz (C2T2) y de la CIACyT por su gran ayuda y apoyo, principalmente a John, Juancho, Torres, Sebastián, Javis, Gustavo, Rodrigo, Karen, Tony, Lety, Alejandra, Sara, Claudia.

Sin duda, muchas gracias a todos mis amigos y personas que he conocido en el transcurso de mi doctorado, a don Carlos Courtade que, aunque se nos adelantó en este camino que se llama vida, siempre lo recordare, a doña Irma que es una gran amiga, pero un especial agradecimiento a mis hermanos, Emanuel (Presi), David (Po), Jorge (Porky), Israel (Primo), don Alfredo, Jesús (Shifu), Kevin, Víctor, Erwin y Diego que sin su amistad todo hubiera sido más difícil.

Quiero agradecer el apoyo económico recibido por parte de CONACyT-SENER a través del Centro Mexicano de Innovación en Energía Solar (CeMIE-Sol) coordinado por el Instituto de Energías Renovables (IER- UNAM), en el marco de la Convocatoria 2013-02, del FONDO SECTORIAL CONACYT-SENER-SUSTENTABILIDAD ENERGÉTICA, dentro del Proyecto Estratégico No. 105 con título: “PROTOTIPO DE PANEL DE NANOANTENAS SEEBECK PARA APROVECHAMIENTO DE CALOR DE DESECHO DE ESTUFAS ECOLÓGICAS INSTALADAS EN COMUNIDADES VULNERADAS” por medio del cual fue posible desarrollar la investigación y apoyar la formación de recursos humanos a nivel doctorado.

También agradezco el apoyo del proyecto SRE-CONACYT No 278291 denominado “Sistema integrado de recolección y almacenamiento de energía a través de arreglo de micro y nano antenas”

¡Gracias a todos!

Brhayllan Mora Ventura

Para mi familia

Esta tesis está dedicada a toda mi familia por su amor, trabajo y sacrificio en todos estos años, gracias a ustedes he logrado llegar hasta aquí y convertirme en lo que soy.

Es un orgullo y privilegio ser parte de la familia Ventura.

A mi abuelita que ha sido un ejemplo de fortaleza y carácter para lograr los objetivos.

Índice

Agradecimientos	vi
Resumen	vi
Acrónimos y abreviaturas	25
Índice	13
Lista de figuras	17
Lista de tablas	24
Introducción	27
Capítulo 1 Antecedentes	29
1. Aplicaciones y estado actual de la ciencia y tecnología de terahertz.	29
1.1 Aplicaciones medicas	29
1.2 Microcomponentes pasivos de Terahertz (THz)	30
1.3 Microscopia de THz	34
1.4 Nanoantenas y sus aplicaciones en la banda de los terahertz	36
1.4.1 Antecedentes de las nanoantenas	37
1.4.2 Nanoantenas recolectoras de energía solar	38
1.4.3 Teoría de operación de una nanoantena	38
1.5 Aplicación de la banda de los terahertz en las comunicaciones	40
1.5.1 Telefonía móvil 5G	41
1.5.2 Redes inalámbricas de área local (T-WLAN)	43
1.5.3 Redes inalámbricas de área personal (T-WPAN)	44
1.5.4 Comunicación inalámbrica segura:	44

1.5.5	Sistemas de monitoreo de la salud	45
1.5.6	El internet de las nano-cosas	46
1.5.7	Ultra alta velocidad en chips de comunicaciones:	47
	Capítulo 2	49
2.	Simulación multi-física eléctrica-térmica por medio del elemento finito. Bases teóricas 49	
2.1	Introducción al método de elementos finitos	49
2.1.1	Técnica de análisis por elementos finitos	50
2.2	Física: electromagnetismo, corrientes eléctricas y transferencia de calor. ...	59
2.3	Generalidades de software COMSOL Multiphysics.	66
	Capítulo 3	71
3.	Fabricación de micro y nanoestructuras metálicas.....	71
	Introducción	71
3.1	Diseño de la geometría	74
3.2	Limpieza del sustrato	76
3.3	Deposición de resina	77
3.4	Grabado de patrones por litografía de haz de electrones	79
3.4.1	Ajuste de la corriente	81
3.4.2	Ajuste del Campo de Escritura (WF)	83
3.4.3	Grabado	83
3.5	Proceso de revelado	84
3.6	Proceso de lift-off	87
3.7	Limpieza y secado de muestra con patrones metalizados	89
	Capítulo 4	91
4.	Efecto térmico de los sustratos en micro y nanoestructuras.....	91

Introducción	91
4.1 Concepto de impedancia térmica	92
4.2 Fabricación y análisis elemental	93
4.3 Análisis térmico	95
4.4 Discusión y conclusiones	103
Capítulo 5	105
5. Diodo térmico	105
Introducción	105
5.1 Transferencia de calor	106
5.2 Rectificación térmica	109
5.3 Rectificación térmica mediante microestructuras en forma de barras fabricadas por litografía de haz de electrones	112
5.4 Caracterización térmica de microestructuras triangulares y rombos para aplicaciones de rectificación térmica	130
5.4.1 Fabricación	134
5.4.2 Simulación	134
5.4.3 Análisis térmico - experimental	135
5.4.4 Discusión y conclusiones	143
Capítulo 6	144
6. Nano y microestructuras con propiedades capacitivas	144
Introducción	144
6.1 Concepto de capacitancia y capacitores interdigitados	145
6.2 Capacitor interdigitado evolutivo	149
6.2.1 Simulación numérica	150
6.2.2 Fabricación	153
6.2.3 Caracterización eléctrica	155

6.3 Capacitor espiral fractal	157
6.3.1 Simulación numérica.....	159
6.3.2 Estudio de la capacitancia variando la distancia entre las placas.....	161
6.3.3 Estudio de la capacitancia variando el espesor de las placas	162
6.3.4 Estudio de la capacitancia de placas planas paralelas con nanopartícula de oro y variando el tamaño.....	164
6.3.5 Estudio de la capacitancia de placas con diferente cantidad de nanopartículas de oro	166
6.3.6 Fabricación	168
6.3.7 Caracterización.....	172
6.4 Discusión y conclusiones	173
Capítulo 7	175
7 Conclusiones	175
Bibliografía.....	178
Anexos.....	186
Publicación 1 en congreso internacional.....	187
Publicación 2 en congreso internacional.....	200
Publicación 3 en congreso internacional.....	204
Publicación en revista indizada	212
Asistencias en congresos nacionales e internacionales.....	225
Estancias nacionales e internacionales.....	227

Lista de figuras

Figura 1.1 La foto (izquierda) muestra el prototipo de sonda quirúrgica intraoperatoria para usar durante la cirugía de cáncer de mama. El gráfico (derecha) muestra la clasificación de los datos de cáncer de mama recopilados con la sonda donde el tumor (rojo) está separado del tejido normal (azul) [4]. .. 30

Figura 1.2 a) Guía de onda rectangular que opera cerca de los 3 THz con tubos metálicos con acoplamiento a una antena [5], b) Imagen conceptual de una antena de sistema Reconfigurable Terahertz Integrated Architecture (RETINA) que incorpora la conmutación del duplexor de transmisión y recepción y la dirección del tiempo sintonizable. 32

Figura 1.3 Imágenes SEM de antena slot, su conexión entre el diodo MOM y sus bondpads (a) Antena slot de mmW y bondpads de unión, b) conexión entre el diodo MOM y los bondpads de enlace [7]. 33

Figura 1.4 Imagen SEM de diodo MOM acoplado a una antena dipolo IR [7]. 34

Figura 1.5 Microscopía a THz de campo cercano de tipo dispersión. (a) Pulsos de THz enfocados en una muestra compuesta de nanopartículas, dichos pulsos son reflejados transportando información sobre el promedio de la función dieléctrica efectiva sobre el punto focal de los THz. (b) Punta metálica que genera un confinamiento del campo de THz en el extremo de la punta. Este campo evanescente puede dispersarse en el campo lejano a través de la interacción con una muestra de nanopartículas, lo que proporciona acceso a la función dieléctrica local de la nanopartícula con resolución espacial definida por el radio de curvatura del extremo de la punta [4]. 35

Figura 1.6 Diagrama de bloques de un rectena. 39

Figura 1.7 Nanoantena termoelectrónica..... 40

Figura 1.8 Evolución de la tecnología móvil. 42

Figura 1.9 Comunicación móvil 5G en la banda de los THz. 43

Figura 1.10 Redes inalámbricas de área local a Terabits..... 44

Figura 1.11 Redes inalámbricas de área personal a Terabits. 44

Figura 1.12 Comunicación inalámbrica segura para aplicaciones militares..... 45

Figura 1.13 Redes de nanosensores para monitoreo de la salud. 46

Figura 1.14 Internet de nano-dispositivos 47

Figura 1.15 Chip de comunicación inalámbrica 48

Figura 2.1 Bloque cuadrilateral típico 52

Figura 2.2 Elemento octonodal 54

Figura 2.3 Elementos tridimensionales: a) tetranodal o tetraedro de orden lineal, b) octonodal o hexaedro de orden lineal.	56
Figura 2.4 Tetraedro de Pascal y sus términos de los arreglos asociados.	57
Figura 2.5 Esquema de numeración de un tetraedro de segundo orden.	59
Figura 2.6 Interfaz principal de COMSOL Multiphysics.	68
Figura 2.7 Ventana de Model Builder.	69
Figura 2.8 Ventana de Model Wizard.	69
Figura 2.9 Ventana de Graphics.	70
Figura 3.3 Diagrama que muestra la mayoría de los componentes de un sistema básico de litografía de haz de electrones	71
Figura 3.4 Proceso de litografía de haz de electrones.	72
Figura 3.1 Equipo de litografía de haz de electrones – Inspect F50.	73
Figura 3.2 Equipo Dual Beam FIB-SEM Helios G4 CX.	73
Figura 3.5 Diseño de geometría en autocad, (micro capacitor espiral).	75
Figura 3.6 Diseño de geometría en Elphy Quantum, (micro capacitor espiral).	75
Figura 3.7 Principal sustrato sobre el cual se grabaron nuestras estructuras. Una capa de inferior de silicio de 500 micras aproximadamente y otra capa superior de dióxido de silicio de 300 nanómetros.	76
Figura 3.8 Principales elementos para realizar la limpieza del sustrato.	77
Figura 3.9 Principales elementos para realizar la deposición de resina.	79
Figura 3.10 Pantalla principal de Elphy Quantum.	80
Figura 3.11 Chessy map	81
Figura 3.12 Ubicaciones de los puntos para establecer las coordenadas locales en la muestra.	81
Figura 3.13 Panel de la estación de control	82
Figura 3.14 Pantalla de los parametros de grabado	82
Figura 3.15 Pantalla para selección de magnificación y tamaño del campo de escritura	83
Figura 3.16 Sustancias para el proceso de revelado	84
Figura 3.17 Esquema del proceso de deposición de material mediante pulverización catódica [32]	85
Figura 3.18 Vista interior de la cámara de vacío del equipo de deposición de metal.	86
Figura 3.19 Vista del blanco de oro	86
Figura 3.20 Muestra sumergida en acetona (Lift-off).	88
Figura 3.21 Muestra sumergida en acetona (segundo proceso de lift-off).	88
Figura 3.22 Proceso de limpieza, secado con nitrógeno.	89

Figura 3.23 Limpieza con alcohol isopropílico.	89
Figura 3.24 Resultado final (muestra después de lift-off y limpieza).	90
Figura 4.1 Esquema representativo del arreglo para obtener la impedancia térmica.	93
Figura 4.2 Esquemático de la representación del arreglo de dipolos en un sustrato. La antena dipolo tiene una longitud de $125 \mu m$, de ancho $20 \mu m$ y de espesor $50 nm$. La pista que interconecta las nanoantenas dipolo tiene un ancho de $10 \mu m$ y el mismo espesor que el dipolo.	94
Figura 4.3 Microscopia electrónica de barrido del nanoarreglo de dipolos interconectados en serie.	94
Figura 4.4 La imagen del nanoarreglo fue adquirida con el microscopio Helios G4 CX, (a) Análisis EDXS a lo largo del elemento dipolo sobre un sustrato de poliimida. (b) Micrografía del nanoarreglo. (c) Análisis EDXS a lo largo del elemento dipolo sobre un sustrato de silicio.	95
Figura 4.5 Cámara infrarroja, (Optotherm EL InfraSight 320) con una resolución espacial de $5 \mu m/pixel$	96
Figura 4.6 Representación del nanoarreglo de dipolos en los dos diferentes sustratos. (a) Poliimida, (b) SiO_2 . Los recuadros-inserciones representan la nanoestructura orgánica (poliimida) y la estructura cristalina (SiO_2) respectivamente en los sustratos. Y el recuadro del centro representa la nanoestructura metálica de oro depositada durante el proceso de sputtering.	97
Figura 4.7 Muestra con nanoarreglos de dipolos sometida a mediciones de temperatura con la cámara infrarroja y mediciones de resistencia eléctrica.	97
Figura 4.8 Distribución de la temperatura a lo largo del nanoarreglo de dipolos fabricado en: (a) Poliimida y (b) Dióxido de silicio. El círculo punteado en (a) y en (b) indica el punto medido de gradiente de temperatura usado para el cálculo de la impedancia térmica mostrada en la tabla 4.1.	99
Figura 4.9 Perfil de temperatura a lo largo de una línea que atraviesa un dipolo del nanoarreglo fabricado sobre los dos diferentes sustratos. (a)-(b) Mediciones experimentales y teóricas de la longitud de arco a lo largo del dipolo respectivamente.	100
Figura 4.10 Distribución de la temperatura para: (a) sustrato de poliimida y (b) sustrato de dióxido de silicio.	101
Figura 4.11 (a) Impedancia térmica simulada en función del espesor: (curva roja) poliimida, (curva azul) sustrato de dióxido de silicio. (b) El diagrama muestra la configuración del nanoarreglo de dipolos simulado bajo parámetros similares para obtener las curvas de impedancia térmica. (c) La inserción muestra los resultados de impedancia térmica previamente reportados en sustratos de silicio [37].	103
Figura 5.1 Transferencia de calor por convección en una placa	107
Figura 5.2 Curva característica del diodo y sus regiones de trabajo.	110

Figura 5.3 Comparación de constantes eléctricas con su equivalente térmico.	110
Figura 5.4 Rectificación térmica, relación en el cambio de la pendiente al graficar calor contra temperatura [61].	111
Figura 5.5 Esquema de un diodo térmico conductor compuesto por un material con cambio de fase y un material sin cambio de fase, (a) configuración en directo, hacia adelante, (b) configuración en inverso, hacia atrás. Se tienen terminales calientes y frías a temperaturas T_h y T_c respectivamente [59].	112
Figura 5.6 Arreglo de microestructuras para análisis de rectificación térmica. En la imagen se muestra en color gris la configuración para el rectificador en directo-hacia delante de la fuente de calor y en color azul la configuración en inverso- hacia atrás de la fuente de calor. La fuente de calor (calentador) es la barra central.	113
Figura 5.7 Poliimida flexible, cinta Kapton	114
Figura 5.8 Arreglos analizados como referencia a) Barra central que realiza la función de fuente de calor y b) Arreglo de microestructuras de referencia.	115
Figura 5.9 Esquema de la conexión del arreglo y la fuente de voltaje de corriente directa.	116
Figura 5.10 Simulación del potencial eléctrico a) Arreglo de diodo rectificador, b) Arreglo de referencia y c) Arreglo de diodo rectificador de referencia.	117
Figura 5.11 Línea roja de análisis para medir la temperatura.	118
Figura 5.12 a) Simulación térmica y b) mallado del arreglo de referencia, la barra central es el elemento que se calienta por efecto Joule ya que en las terminales se le conecta una fuente de voltaje de corriente directa. El circuito se alimenta con un voltaje de 0.004 volts.	118
Figura 5.13 Temperaturas alcanzadas de acuerdo con la línea de análisis.	119
Figura 5.14 a) Simulación térmica y b) temperaturas alcanzadas de acuerdo con la línea de análisis central.	120
Figura 5.15 a) Simulación térmica y b) mallado del arreglo de rectificación, la barra central.	120
Figura 5.16 Temperaturas alcanzadas de acuerdo con la línea central de análisis.	121
Figura 5.17 Magnitud de flujo de calor total medido en el elemento de prueba del arreglo vs temperatura en la barra central (calentador)	122
Figura 5.18 Distribución de temperatura en el arreglo y elementos de prueba donde se tomó la medición de magnitud de flujo de calor.	122
Figura 5.19 Curva característica del diodo térmico propuesto de acuerdo con la figura 5.4.	124
Figura 5.20 Imagen SEM del arreglo fabricado por litografía de haz de electrones, material plata (Ag). .	125

Figura 5.21 Cámara infrarroja, (Optotherm EL InfraSight 320) con una resolución espacial de $5 \mu m/pixel$	126
Figura 5.22 Imágenes térmicas del arreglo experimental, dispositivo con geometría asimétrica. a) arreglo sin voltaje aplicado y b) arreglo con calentamiento por efecto Joule.....	127
Figura 5.23 Gráfica de temperaturas vs píxel, la línea roja representa los valores obtenidos cuándo se aplica el voltaje de corriente directa.	128
Figura 5.24 Comparativo de medidas de temperatura en los elementos de prueba.....	129
Figura 5.25 Arreglo de nanoestructuras para análisis de rectificación térmica.	131
Figura 5.26 Distribución de temperatura, la línea del centro es el elemento que se calienta por efecto Joule ya que en los extremos se le conecta una fuente de voltaje de corriente directa. El circuito se alimenta con un voltaje de 0 hasta 0.05 volts.	132
Figura 5.27 Cámara térmica utilizada para la caracterización térmica, modelo FLIR X6540sc.	133
Figura 5.28 Arreglo experimental montado en el “laboratorio de fotónica” con nanoestructuras en el Instituto de Energías Renovables de la UNAM, campus Cuernavaca.....	134
Figura 5.29 Chip con el arreglo de nanoestructuras (diodo térmico).	134
Figura 5.30 Distribución térmica de acuerdo con simulación numérica, la línea del centro es el elemento que se calienta por efecto Joule ya que en los extremos se le conecta una fuente de voltaje de corriente directa. El circuito se alimenta con un voltaje de 3 volts.	135
Figura 5.31 Imagen que se muestra en el software FLIR ResearchIR, en la parte izquierda se tiene enfocado el arreglo de nanoestructuras, se puede observar que el elemento central de calentamiento se encuentra más frío que el sustrato ya que aún no se le aplica un voltaje para calentarlo por efecto Joule. En la parte derecha tenemos los valores de temperatura medidos para la línea 1 azul posicionada sobre 4 nanoestructuras.	136
Figura 5.32 Microtermograma del dispositivo bajo análisis, alimentando el calentador con 3 volts de corriente directa.....	137
Figura 5.33 Grafica de las temperaturas medidas en la línea de análisis, ver línea blanca en la imagen de la derecha.	137
Figura 5.34 Grafica para analizar los cambios de temperatura en las nanoestructuras	138
Figura 5.35 Grafica para analizar los cambios de temperatura en las nanoestructuras, datos medidos con 729 cuadros por segundo	139
Figura 5.36 Grafica de las temperaturas medidas en el filamento por un tiempo de 8.5 minutos, en este lapso de tiempo se activó y desactivo la fuente de voltaje con la intención de analizar el tiempo en que tarda en estabilizarse el aumento de temperatura y el enfriamiento.	140

Figura 5.37. Puntos bajo análisis térmico.	141
Figura 5.38 Grafica de las temperaturas promedio para los puntos bajo análisis mostrados en la figura 13.	141
Figura 6.1 Capacitor de placas paralelas.	146
Figura 6.2 Capacitor interdigitado (CID) [64].	147
Figura 6.3 Capacitancia en función de η para $N = 32$ negro, $N = 40$ rojo y $N = 50$ azul. Se usaron $\epsilon_0 = 8.8 \times 10^{-12}$ Fm, $L = 8 \times 10^{-3}$ m, $\epsilon S = 11.7$ Fm, $\epsilon_1 = 1$ y $\lambda = 8 \times 10^{-6}$ m [64]....	149
Figura 6.4 Diseño de capacitor interdigitado rectangular y b) diseño de capacitor interdigitado evolutivo. Los materiales utilizados son: oro (Au), dióxido de silicio (SiO ₂) y silicio (Si).	150
Figura 6.5 simulación del potencial eléctrico a) capacitor interdigitado rectangular y b) capacitor interdigitado evolutivo.	152
Figura 6.6 Distribución de la norma de campo eléctrico, a) capacitor interdigitado rectangular y b) capacitor interdigitado evolutivo.	152
Figura 6.7 a) Dimensiones del capacitor interdigitado rectangular y b) Dimensiones del capacitor interdigitado evolutivo. Unidades en micrómetros.	154
Figura 6.8 Imágenes obtenidas con el microscopio óptico de las litografías de los capacitores.	154
Figura 6.9 Esquema de los componentes que conforman al instrumento de medición keithley 4200 SCS [66].	155
Figura 6.10 Esquema del arreglo utilizado para realizar las mediciones con el equipo keithley 4200 SCS.	156
Figura 6.11 Mediciones de capacitancia en función de la frecuencia.	156
Figura 6.12 Generadores de la geometría fractal del capacitor espiral fractal.	158
Figura 6.13 a) Dimensiones del capacitor espiral fractal, b) diseño de capacitor espiral fractal. Los materiales utilizados son: oro (Au), dióxido de silicio (SiO ₂) y silicio (Si). El material que se utilizó para fabricar las estructuras capacitivas es oro (Au), con un espesor de 50 nanómetros.	159
Figura 6.14 Capacitor de dos placas plana paralelas, espesor = 50 nm, L = 12um, A = 6um.	160
Figura 6.15 Norma del campo eléctrico. a) Capacitor con una distancia entre placas de 0.4 μ m, b) Capacitor con una distancia entre placas de 2 μ m.	161
Figura 6.16 Gráfica del capacitor de dos placas, con diferentes distancias entre las placas, desde 0.4 μ m hasta 2 μ m.	162
Figura 6.17 Norma del campo eléctrico. a) Capacitor con un espesor de 50 nm, b) Capacitor con un espesor de 1um.	163
Figura 6.18 Gráfica del capacitor de dos placas, con diferentes espesores de material depositado.	164

Figura 6.19 Norma del campo eléctrico. a) Capacitor con una nanopartícula en el centro de las placas, radio de la Np =100 nm, b) Capacitor con una nanopartícula de radio = 800 nm.	165
Figura 6.20 Gráfica de la capacitancia para diferentes tamaños de nanopartícula.	165
Figura 6.21 Distribución de la norma de campo eléctrico para nanopartícula de oro entre placas metálicas sometidas a un potencial eléctrico.	166
Figura 6.22 Norma del campo eléctrico. a) Capacitor con 11 nanopartículas en el centro de las placas, radio de la Np =100 nm, b) Capacitor con 61 nanopartículas de radio = 100 nm.	167
Figura 6.23 Gráfica de la capacitancia para diferentes cantidades de nanopartículas.	168
Figura 6.24 a) Diseño del modelo geométrico para realizar la simulación numérica en COMSOL Multiphysics, b) Norma del campo eléctrico, geometría sobre un substrato de Si con espesor de 500 μm y con una capa de SiO ₂ con espesor de 300nm.....	168
Figura 6.25 Imagen SEM del capacitor fabricado por litografía de haz de electrones, material oro (Au), sin nanopartículas.....	169
Figura 6.26 Imagen SEM de las nanopartículas de oro (Au).....	170
Figura 6.27 Imágenes SEM del capacitor con NPs de Au.....	171
Figura 6.28 a) Imagen obtenida con el microscopio óptico del micro capacitor. b) Muestra 1 con 3 capacitores, capacitor 1 con nps de Au y capacitor 2 y 3 sin nps.	171
Figura 6.29 a) Imagen obtenida con el microscopio óptico del micro capacitor. b) Muestra 2 con 3 capacitores, capacitor 4 con nps de Au y capacitor 5 y 6 sin nps.	172
Figura 6.30 a) Imagen obtenida con el microscopio óptico del micro capacitor. b) Muestra 3 con 2 capacitores, capacitor 7 con nps de Au y capacitor 8 sin nps.	172
Figura 6.31 Esquema del arreglo utilizado para realizar las mediciones con el equipo keithley 4200 SCS.	173

Lista de tablas

Tabla 4-1 Impedancia térmica obtenida experimentalmente para sustratos de poliimida y <i>SiO2</i>	98
Tabla 4-2 Impedancia térmica obtenida teóricamente para sustratos de poliimida y <i>SiO2</i>	101
Tabla 5-1 Resultados de rectificación térmica para diferentes temperaturas en el calentador (barra central en el arreglo).	123
Tabla 5-2 Temperaturas [°C] para los diferentes puntos de muestreo, cuando la fuente de voltaje está en 0 y en 3 volts.	142
Tabla 5-3 Diferencia de temperatura para cada punto de muestreo cuando la fuente de voltaje está en 3 menos la temperatura cuando la fuente está en 0 volts.	142
Tabla 5-4 Diferencia de temperatura entre el punto más cercano a la fuente y el más lejano, tanto para puntos de muestreo en el triángulo y en el sustrato. Se realizaron tres muestreos	142
Tabla 6-1 Capacitancias por unidad de área para un potencial eléctrico aplicado de 1V de corriente directa.	153
Tabla 6-2 Capacitancias por unidad de área para una frecuencia de 500 <i>kHz</i>	157

Acrónimos y abreviaturas

THz	<i>Terahertz</i>
MEF	<i>Método de Elemento Finito</i>
IR	<i>Infrarrojo</i>
IP	<i>Protocolo de internet</i>
5G	<i>Quinta Generación</i>
IoNT	<i>Internet of Nano Things</i>
UV	<i>Ultravioleta</i>
GHz	<i>Gigahertz</i>
PV	<i>Photovoltaic</i>
NECs	<i>Solar Nanoantenna Electromagnetic Collectors</i>
RF	<i>Radiofrecuencias</i>
NREL	<i>National Renewable Energy Laboratory</i>
FIB	<i>Focused Ion Beam</i>
EBL	<i>Electron Beam Litography</i>
NIL	<i>Nanoimprint Litography</i>

FEM	<i>Finite Element Method</i>
EDP	<i>Ecuaciones en Derivadas Parciales</i>
BiCGSTAB	<i>Biconjugate Gradient Stabilized Method</i>
AEF	<i>Análisis por Elementos Finitos</i>
CAD	<i>Computer Aided Design</i>
HEF	<i>Herramientas de Elementos Finitos</i>

Introducción

La tecnología basada en la radiación electromagnética a frecuencias de terahertz (100 GHz – 30 THz) se ha desarrollado rápidamente en los últimos años. La radiación a terahertz en el siglo XX fue utilizada principalmente por astrónomos y algunos espectroscopistas, en la década de 1980 se desarrolló la espectroscopía en el dominio del tiempo basada en laser de terahertz y en la década de 1990 el campo de la ciencia y tecnología de THz se expandió rápidamente, en medida de que ahora forma parte de muchas áreas de la ciencia fundamental y aplicaciones del “mundo real”.

Actualmente, algunas de las aplicaciones de la tecnología de terahertz son: aprovechamiento-conversión de energía solar y energía térmica desecho, tiene aportaciones en el área médica, en la biología, en imagen, metrología, etc. Realmente son muchos los campos en que la tecnología de terahertz está involucrada. Algunos avances en la teoría apuntan al diseño, fabricación y experimentación de novedosas estructuras. En otros casos, se han desarrollado modelos analíticos o numéricos para mejorar la producción de estructuras novedosas y obtener sus propiedades. Un ejemplo de lo mencionado anteriormente es el reciente interés en el electromagnetismo a nanoescala y sus aplicaciones en tecnología de los terahertz. El estudio y fabricación de nanoestructuras (estructuras cuyas dimensiones son en el orden de los nanómetros) ha madurado hasta el punto donde una antena o arreglo de antenas pueden ser manufacturadas y posicionadas de forma precisa en configuraciones de utilidad. Esto es de particular interés debido a que algunos conceptos de una antena convencional se extienden a aplicaciones a frecuencias de los terahertz.

Este trabajo de investigación está enfocado en aportar al desarrollo de tecnología de terahertz principalmente en la optimización de la respuesta eléctrica y térmica, por lo tanto, en este primer capítulo se mencionan algunas áreas de aplicación de los terahertz para tener un panorama de las posibles áreas en las que nuestros estudios y dispositivos desarrollados en este periodo de doctorado se pueden utilizar.

Tomando en cuenta que la radiación electromagnética a frecuencias de terahertz tiene diversas aplicaciones, el alcance de nuestro trabajo es desarrollar tecnología para

aplicaciones de aprovechamiento de energía térmica y su conversión a energía eléctrica, los objetivos son realizar primero un estudio mediante simulación numérica, posteriormente fabricar mediante litografía de haz de electrones las estructuras propuestas y por último realizar caracterizaciones eléctricas y térmicas de nuestros dispositivos, poniendo como prioridad el estudio de materiales, geometrías, diferentes tipos de sustratos con la finalidad de optimizar la respuesta eléctrica y térmica.

Actualmente en el grupo de investigación, ya se han desarrollado dispositivos Seebeck para conversión de energía, por lo tanto, con este trabajo se busca complementar el desarrollo de esta tecnología buscando alternativas de sustratos flexibles, microcapacitores que puedan operar en conjunto con los dispositivos Seebeck, además se han abordado temas de estudio de transferencia de calor, ya que es necesario optimizar la respuesta térmica de nuestras estructuras a escala micro y nanométrica.

Capítulo 1 Antecedentes

1. Aplicaciones y estado actual de la ciencia y tecnología de terahertz.

En este apartado de la tesis se presenta una revisión bibliográfica del estado actual de la ciencia y tecnología de THz, se proporciona una opinión sobre las oportunidades y desafíos que ofrece el futuro. Los trabajos que se mencionan son de investigadores internacionales expertos en el área que escriben sobre las áreas claves de la ciencia y tecnología de THz.

1.1 Aplicaciones medicas

Hace 25 años, investigadores propusieron que las imágenes de THz en el dominio del tiempo podrían ser utilizadas en el área médica debido a la sensibilidad de absorción de terahertz en partículas de agua; y que el grado de hidratación del tejido podría ser usado como una medida del estado de la enfermedad [1]. El profesor Mittleman y colegas realizaron algunos trabajos preliminares sobre quemaduras, sugieren aplicaciones de imágenes de THz en las quemaduras diagnóstico y cicatrización de heridas [2].

El primer trabajo reportado sobre imágenes de terahertz e identificación de tejido humano enfermo fue por Arnone y colegas quienes demostraron la diferenciación de esmalte y dentina en secciones delgadas de la extracción de premolares y la detección de caries tempranas en humanos. También se presentaron las primeras mediciones *in vivo* en piel humana, donde se demostró que los terahertz pueden detectar un cambio en la hidratación de la piel en tiempo real [3].

Actualmente numerosos grupos han demostrado aplicaciones médicas en cáncer de mama, cáncer de colon, imágenes de quemaduras, e hidratación corneal. La tecnología detrás de las imágenes de terahertz en el dominio de tiempo no ha cambiado mucho; pero en la ingeniería se han hecho esfuerzos para que el sistema sea más adecuado para el entorno clínico que a su vez mejorará la aceptación. Por ejemplo, una sonda intraoperatoria

para la detección de cáncer de mama y la endoscopia, son dispositivos para detección de cáncer in vivo (ver figura 1.1) [4].

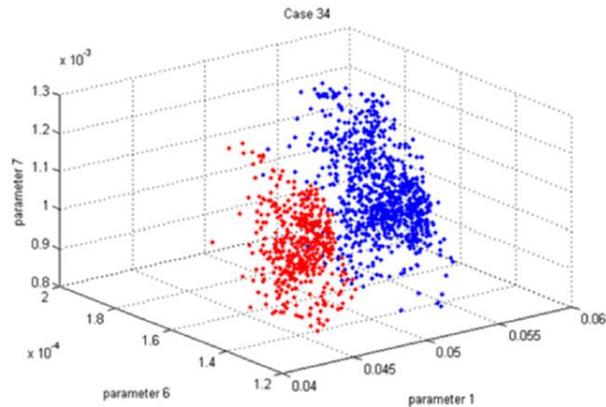
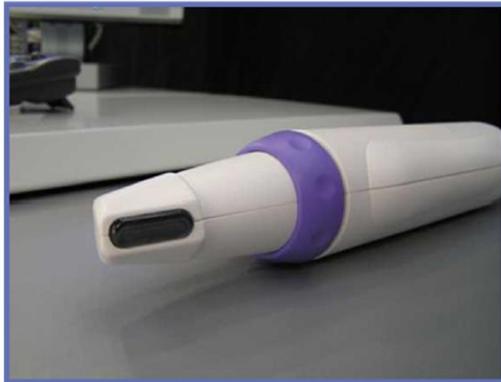


Figura 1.1 La foto (izquierda) muestra el prototipo de sonda quirúrgica intraoperatoria para usar durante la cirugía de cáncer de mama. El gráfico (derecha) muestra la clasificación de los datos de cáncer de mama recopilados con la sonda donde el tumor (rojo) está separado del tejido normal (azul) [4].

Existe una serie de ventajas potenciales en la aplicación de la tecnología de terahertz a las imágenes médicas, la baja energía de los fotones significa que la radiación no es ionizante, hay una dispersión insignificante en los tejidos, la alta sensibilidad al contenido de agua proporciona un contraste entre los estados enfermos, los sistemas de dominio del tiempo pueden proporcionar información cuasi tridimensional y la amplia gama de frecuencias brinda la oportunidad de investigar una serie de parámetros de diagnóstico. Sin embargo, varios desafíos quedan por resolverse respecto a la ingeniería de los dispositivos, aun así, tecnología de terahertz sigue siendo relativamente joven y aunque no se han presentado grandes avances comerciales en el campo de la aplicación médica de los terahertz hasta la fecha, es muy probable que las aplicaciones especializadas evolucionen con rapidez.

1.2 Microcomponentes pasivos de Terahertz (THz)

Algunos ejemplos de aplicaciones de ultra banda ancha de terahertz son la espectroscopia coherente en el dominio del tiempo y la radiometría en el dominio de la frecuencia. En general donde el rendimiento es primordial, implementaciones cuasi ópticas son preferidas

sobre el uso de estructuras de onda guiada debido a la necesidad de minimizar las pérdidas por contribuciones del material.

Muchos investigadores coinciden en hacer sistemas completos más pequeños, más livianos y baratos, las estructuras de onda guiada ofrecen distintas ventajas sobre sus contrapartes cuasi-ópticas; las primeras tienen ventajas inherentes en términos de proporcionar un mejor aislamiento, una opción más amplia de soluciones de implementación y se pueden integrar más fácilmente con dispositivos activos sin necesidad de alineación óptica con exactitud. Mientras que las líneas de transmisión (por ejemplo, microstrip, guía de onda y tira coplanar) representan las soluciones para realizar circuitos integrados pasivos en ondas milimétricas híbridas y monolíticas, en general, estos circuitos pueden sufrir de altas pérdidas por el sustrato y radiación. Además, sus densidades de corriente de conducción relativamente altas dan como resultado una alta disipación (ohmica) pérdidas a frecuencias de terahertz. Como resultado, solo son posibles factores de baja calidad / componentes de alta atenuación a temperatura ambiente. Por lo general, para lograr el mejor rendimiento a temperatura ambiente, se necesitan soluciones con resonadores / filtro fuera del chip. Sin embargo, muchos artículos informan sobre mejoras en el rendimiento obtenido mediante simulaciones numéricas previstas de los filtros de THz basados en líneas de transmisión.

Un notable punto para analizar es que las guías de ondas de plasmón superficial sufren de una eficiencia de conversión de modo relativamente pobre y una alta atenuación debido a las pérdidas óhmicas. No obstante, debido a su estrecho confinamiento de campo, sus características de mejora del campo cercano y su capacidad para superar los límites de difracción, los dispositivos basados en el polaritón de plasmón de superficie (SPP) ofrecen el potencial para futuros circuitos integrados basados en el SPP a frecuencias de THz.

Se consideran tres ejemplos de tecnologías de ondas guiadas de alto rendimiento utilizadas en frecuencias terahertz: 1) solamente metal, 2) metal-dieléctrico y 3) solamente dieléctrico. En general, dado que las pérdidas dieléctricas pueden ser mucho menores que las asociadas a los conductores normales a temperatura ambiente, factores de baja pérdida/alta calidad se puede obtener reduciendo al mínimo las densidades de corriente de conducción e idealmente evitando el uso de los metales por completo. Las tres guías

de onda de pérdidas relativamente bajas se han utilizado en tecnologías para demostrar sus componentes clave (por ejemplo, acopladores y resonadores de potencia, utilizados en el alto rendimiento de acoplamiento de impedancia en redes, filtros y antenas).

Por otra parte, en aplicaciones espaciales, militares, de energía, es necesario tomar en cuenta el costo/beneficio, tamaños, eficiencia, etc. Se han propuesto estructuras con tamaños de micrómetros, alrededor de decenas de micras, también se ha trabajado con tecnología basada en la impresión 3D con deposición opcional de recubrimientos de metales, las tecnologías de micromecanizado y sistemas microelectromecánicos (MEMS) puede aumentar el rendimiento y proporcionar una funcionalidad adicional, respectivamente. Los componentes sintonizables a terahertz, podrían ser difícil de realizar dentro de un entorno integrado. Los Laboratorios Nacionales Sandia en los EE. UU. reportaron sobre una guía de onda rectangular que opera cerca de los 3 THz con tubos metálicos con acoplamiento a una antena, fabricado con micromecanizado de superficie [5]. Una micrografía electrónica de barrido de esta estructura se muestra en la figura 1.2. Con el electro-depósito de oro en paredes, la pérdida de transmisión medida es aproximadamente 1.3 dB/mm en 3,1 THz.

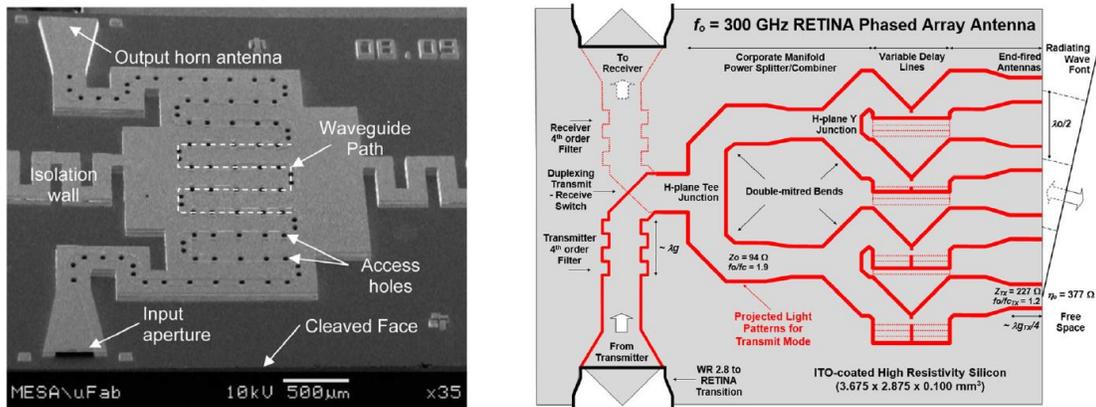


Figura 1.2 a) Guía de onda rectangular que opera cerca de los 3 THz con tubos metálicos con acoplamiento a una antena [5], b) Imagen conceptual de una antena de sistema Reconfigurable Terahertz Integrated Architecture (RETINA) que incorpora la conmutación del duplexor de transmisión y recepción y la dirección del tiempo sintonizable.

Para hacer frente a los futuros desafíos de proporcionar componentes integrados sintonizables y subsistemas reconfigurables, sin el uso de interruptores electrónicos o micro mecánicos convencionales, que pueden ser complicados en las frecuencias de THz, el Imperial College London del Reino Unido propuso una solución [6]. Conocido como Reconfigurable Terahertz Integrated Architecture (RETINA), en lugar de tener las tradicionales estructuras de guía de ondas rectangulares de tubo con paredes laterales de metal, las estructuras RETINA tienen paredes laterales virtuales fotoinducidas dentro de un sustrato de silicio de alta resistividad. En la figura 1.2 (b) se muestra una imagen conceptual de cómo una antena de sistema RETINA puede incorporar la conmutación del duplexor de transmisión y recepción y la dirección del tiempo sintonizable, simplemente cambiando el patrón de luz.

Otras aplicaciones de microcomponentes pasivos de THz son las antenas acopladas a diodos metal-óxido-metal (Diodo MOM) para detección de ondas electromagnéticas, se han presentado trabajos de investigación donde un diodo de metal-óxido-metal acoplado a una antena para la detección de ondas milimétricas infrarrojas de doble banda. Se utilizó litografía por haz de electrones y los métodos convencionales de depósito de materiales para fabricar un diodo Ni-NiO-Ni acoplado a una antena dipolo resonante $\lambda/2$ a 28 THz y una antena de slot $\lambda/2$ mmW a 92,5 GHz; se probó y verificó la detección simultánea de doble banda [7].

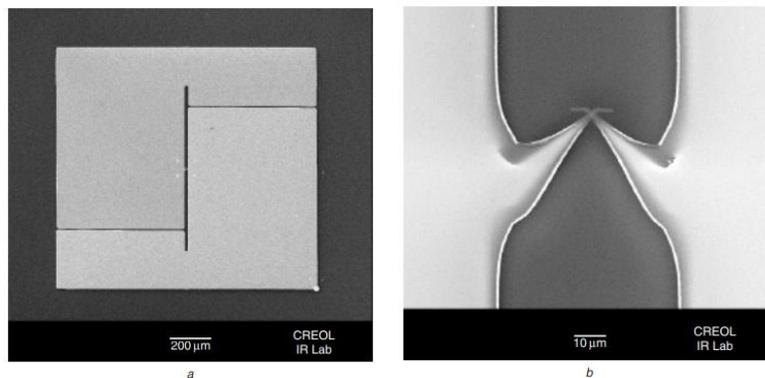


Figura 1.3 Imágenes SEM de antena slot, su conexión entre el diodo MOM y sus bondpads (a) Antena slot de mmW y bondpads de unión, b) conexión entre el diodo MOM y los bondpads de enlace [7].

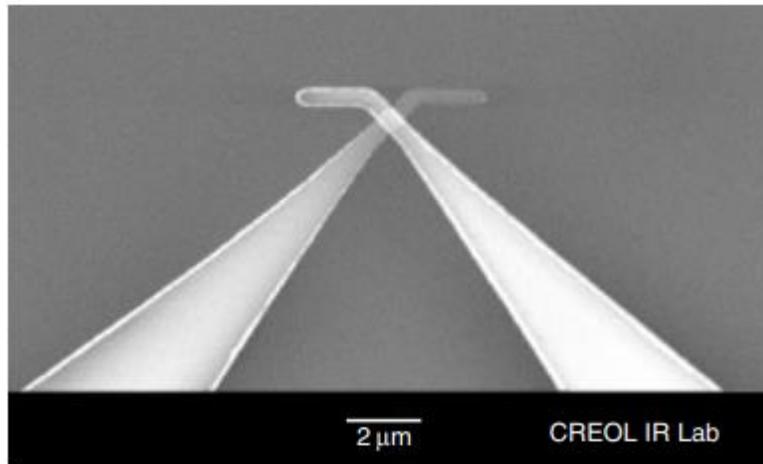


Figura 1.4 Imagen SEM de diodo MOM acoplado a una antena dipolo IR [7].

Con el aumento de avances en micro dispositivos y circuitos activos que constituyen las fuentes, amplificadores, moduladores activos y detectores, los componentes pasivos asociados deben mejorar y no limitar el rendimiento general de los subsistemas de THz. Existen nuevas tecnologías de componentes pasivos, utilizadas para realizar funciones vitales (por ejemplo, impedancia/amplitud/fase en redes, acopladores de potencia, filtros, antenas, polarizadores e incluso los interruptores), es importante encontrar su(s) nicho(s) dentro de las tantas opciones de desarrollo de tecnología de terahertz tomando en cuenta el costo-rendimiento y espacio.

1.3 Microscopia de THz

El rango de frecuencia THz es la clave de muchas excitaciones elementales de baja energía en materia condensada. Estas incluyen plasmones, fonones, magnones y correlación inducida de bandas de energía. La espectroscopía de THz en el dominio del tiempo ha sido extremadamente útil para estudiar la dinámica de tales excitaciones en nanomateriales. Algunos puntos importantes de la espectroscopia de THz son: “sub-cycle time resolution” y “field-resolved detection”, son particularmente valiosos, ya que los nanosistemas pueden exhibir comportamiento transitorio exótico y muy rápido (tiempo de vida < 10 ps). Sin embargo, la microscopia de THz tiene un inconveniente importante, es decir, su resolución espacial es limitada. La difracción no permite una longitud de onda λ

(~150 μm para una frecuencia de 1 THz) y ser enfocada a un punto con diámetro más pequeño que $\lambda/2$. La espectroscopia a THz de nanosistemas, por lo tanto, está restringida a mediciones de conjuntos. Más importante aún, efectos locales que dependen intrínsecamente del tamaño, de la estructura o de la forma de las nanoestructuras individuales pueden no ser estudiados utilizando esta técnica (figura 1.5 (a)). Investigadores de terahertz han enfrentado este desafío para desarrollar un arreglo de técnicas de microscopía que extiende el alcance de la espectroscopia de THz. Estos van desde enfoques basados en no linealidades ópticas [8,9], también han utilizado acoplamiento de campos en una sonda para poder medir propiedades locales de materiales o alternativamente para medir las formas de los campos evanescentes alrededor de una muestra de longitud de onda inferior. Uno de los más populares y de las opciones versátiles para los experimentos con sonda de escaneo de THz son la microscopía de THz de escaneo de campo cercano de tipo dispersión [10,11]. En este caso, una punta metálica de microscopio de fuerza atómica confina luz a THz para un volumen definido por el radio de curvatura del extremo de la punta (figura 1.5 (b)).

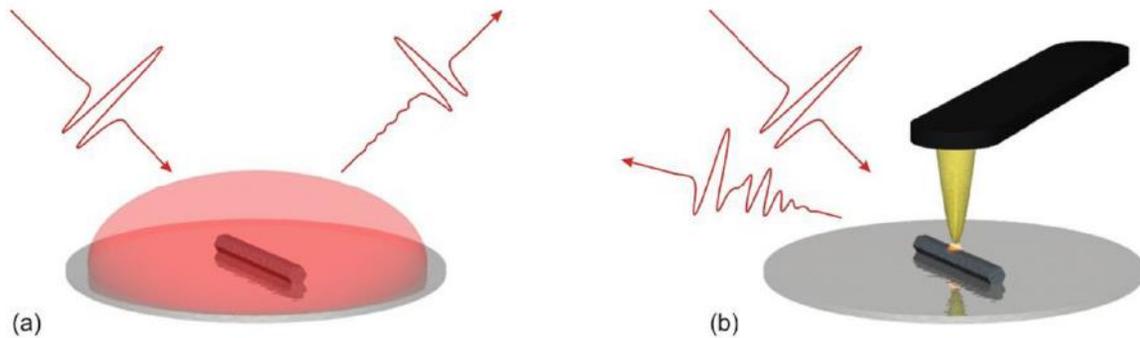


Figura 1.5 Microscopía a THz de campo cercano de tipo dispersión. (a) Pulsos de THz enfocados en una muestra compuesta de nanopartículas, dichos pulsos son reflejados transportando información sobre el promedio de la función dieléctrica efectiva sobre el punto focal de los THz. (b) Punta metálica que genera un confinamiento del campo de THz en el extremo de la punta. Este campo evanescente puede dispersarse en el campo lejano a través de la interacción con una muestra de

nanopartículas, lo que proporciona acceso a la función dieléctrica local de la nanopartícula con resolución espacial definida por el radio de curvatura del extremo de la punta [4].

De acuerdo con un reporte realizado por los investigadores Tyler L Cocker y Rupert Huber expertos en el tema [4], ellos mencionan cuatro objetivos para la microscopía de THz en los próximos años: (i) Mejorar la relación de señal a ruido para ampliar el alcance de la microscopía THz y resolver sutiles efectos a nanoescala. (ii) Implementar operación criogénica para estudiar localmente durante las transiciones de fase de material. Campo cercano ultrarrápido en las mediciones a temperaturas variables. Las bajas temperaturas de la muestra conllevarían a mejorar el enfoque en las resonancias a THz (iii) Avances de espectroscopía de campo cercano de THz de no lineal a no lineal (iv) Llevar las imágenes a THz a la escala de longitud máxima. Resolución atómica podría anunciar el comienzo de una nueva era para la microscopía THz: la de imágenes cuánticas ultrarrápidas.

1.4 Nanoantenas y sus aplicaciones en la banda de los terahertz

Las nanoantenas ópticas e infrarrojas pueden encontrar aplicación en diversos ámbitos de la actividad humana, como la conversión de energía solar, comunicaciones, la medicina, la espectroscopia, microscopía de campo cercano, y la fotónica [12]. En algunas de estas áreas ya se emplean nanoantenas para el funcionamiento de dispositivos (espectroscopia), mientras que en otras se espera empezar a usarlas en un futuro próximo (medicina). Otro de los campos (por ejemplo, la fotovoltaica y la fotónica) siguen siendo los sitios de prueba experimentales con nanoantenas.

En este apartado nos enfocaremos a las aplicaciones de nanoantenas para las comunicaciones y el aprovechamiento de energía solar, las cuales son de nuestro principal interés, sin embargo en caso de que se desee profundizar en el tema de las aplicaciones de nanoantenas, se sugiere al lector revisar la bibliografía [12,13].

Una antena es una varilla metálica, alambre u otra forma estructurada diseñada para transmitir o recibir ondas electromagnéticas. El principal parámetro de diseño de una

antena es su tamaño. Para estar en resonancia con las ondas electromagnéticas que recibirá o transmitirá debe ser aproximadamente del tamaño de la longitud de onda.

El avance tecnológico de las últimas décadas ha hecho posible la fabricación de estructuras cada vez más pequeñas. Con el desarrollo de la nanotecnología diversos métodos (ejemplo: litografía con haz de electrones) hicieron posible fabricar antenas lo suficientemente pequeñas para ajustar su longitud de onda de resonancia en la región del infrarrojo (IR) y visible del espectro electromagnético. En la actualidad, estas nuevas antenas son llamadas “nanoantenas”.

1.4.1 Antecedentes de las nanoantenas

Una nanoantena se define como un dispositivo que convierte radiación infrarroja y óptica en energía confinada, y viceversa. Debido a las altas eficiencias de conversión, las nanoantenas ópticas e infrarrojas se han empleado con éxito en un amplio conjunto de aplicaciones tales como conversión de energía solar, comunicaciones, sensores en biomédica, espectroscopia a nano-escala, microscopia óptica y otras aplicaciones.

El desarrollo de nanoantenas para el espectro infrarrojo y óptico (rango de los terahertz) exige reglas de diseño que hagan que sea posible transferir los diseños de antenas ya establecidas para ondas de radio al rango de los terahertz (THz).

Estas reglas de diseño no se pueden obtener con los mismos formalismos utilizados para las radiofrecuencias, y necesitan una adaptación adecuada para incluir las fuertes propiedades de dispersión de metales en el IR y de luz visible, donde la conductividad dinámica no es tan alta como en el rango de microondas.

Ante el creciente interés por el estudio y aplicaciones de las nanoantenas se han utilizado con éxito simulaciones numéricas para modelar y caracterizar los diseños de nanoestructuras en frecuencias de los THz.

Uno de los mayores factores limitantes para el modelado de nanoestructuras ha sido la suposición de que los materiales a frecuencias infrarrojas y ópticas presentan propiedades electromagnéticas independientes a la frecuencia, sin embargo, se ha demostrado que la

mayoría de los materiales presentan propiedades ópticas dependientes de la frecuencia en el dominio de los THz.

1.4.2 Nanoantenas recolectoras de energía solar

Las antenas no son una nueva tecnología. Se utilizan en una amplia gama de frecuencias en el espectro electromagnético y se pueden considerar como uno de los inventos más revolucionarios para la sociedad moderna. Hoy, las antenas se utilizan para múltiples sistemas de telecomunicaciones, tales como televisores, radios, teléfonos celulares, de radar y de comunicaciones por satélite, por nombrar algunos. Antenas convencionales trabajan a radiofrecuencias (RF), o bien para "transmisión" o "recepción" de señales. En otras palabras, una radio-antena es una estructura en la que una onda en el espacio libre se convierte en una onda guiada, o viceversa. La teoría y los principios de antenas de RF son bien conocidos y parcialmente se pueden aplicar a nanoantenas. Sin embargo, debido a las propiedades únicas que presentan los metales a nanoescala, la aplicación de la teoría de una antena tradicional en el diseño de nanoantenas ha resultado ser complicada [14].

1.4.3 Teoría de operación de una nanoantena

Aunque los primeros modelos de nanoantenas fueron inspirados inicialmente por sus análogas antenas macroscópicas que operan en el dominio de RF, los principios por los cuales operan difieren significativamente.

Debido a su naturaleza cíclica, las ondas electromagnéticas inducen campos eléctricos variantes en el tiempo en los metales que ejercen una fuerza sobre el gas de electrones dentro del material, haciendo que los portadores de carga oscilen en un movimiento colectivo. Este fenómeno se conoce como plasmón superficial. Frecuencias ópticas específicas pueden provocar que la nanoantena pueda resonar a la misma frecuencia que la longitud de onda entrante, lo que permite la absorción de la radiación [14]. En estas frecuencias, la resonancia produce un desplazamiento de cargas en el interior del metal, provocando que los electrones oscilantes (es decir, de plasmones de superficie) se muevan libremente a través de la nanoantena. El flujo de electrones a través de la nanoantena produce una corriente alterna que tiene la misma frecuencia que la de resonancia. Sin

embargo, como la propia nanoantena no proporciona una forma de convertir la corriente recolectada en corriente directa, la estructura debe complementarse con un elemento de rectificación. Toda la estructura se conoce comúnmente como una rectena.

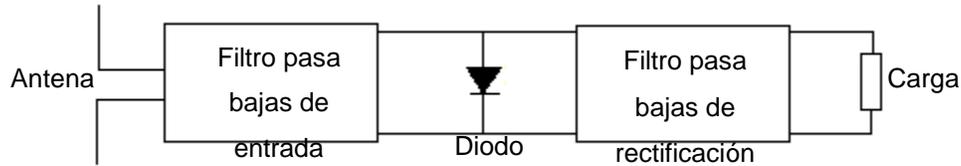


Figura 1.6 Diagrama de bloques de un rectena.

Los componentes de un rectena consisten generalmente en una antena que recolecta la radiación entrante de infrarrojos, un diodo para rectificar la corriente alterna de alta frecuencia en corriente directa, y una carga para el almacenamiento o el uso de la corriente convertida. Además, los filtros pasa bajas proporcionan impedancia de acoplamiento entre los diferentes componentes para garantizar un mayor rendimiento en la estructura.

Sin embargo, se ha demostrado que las eficiencias que se obtienen con estos dispositivos son muy pobres (10^{-6}) para aplicaciones solares [15].

Debido a estos inconvenientes en las rectenas ópticas, se buscan formas alternas para recuperar la energía absorbida por las nanoantenas, lo que da pie a otra propuesta, estos dispositivos son llamados nanoantenas termoeléctricas o antenas ópticas para la detección de luz visible e infrarroja [16,17], las cuales están basadas en el principio básico de un termopar; el cual es un dispositivo conformado por dos metales diferentes unidos en uno de sus extremos, a esta unión se le conoce como punto caliente. Cuando se mantiene una diferencia de temperatura entre la interfaz bimetalica y los extremos de la nanoantena, se desarrolla un voltaje de circuito abierto entre la interfaz y los extremos gracias al efecto Seebeck.

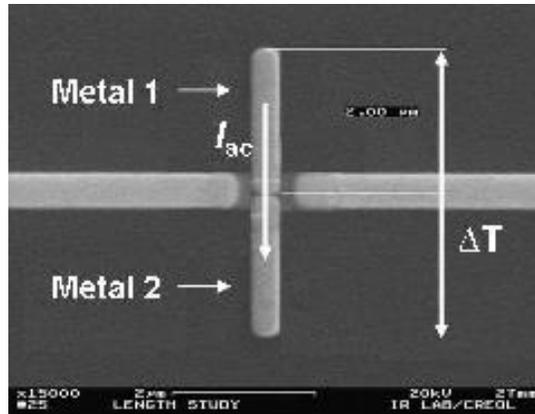


Figura 1.7 Nanoantena termoeléctrica.

1.5 Aplicación de la banda de los terahertz en las comunicaciones

La necesidad de un mayor ancho de banda y mayor rapidez en las comunicaciones inalámbricas es uno de los motivos que ha generado interés por el estudio del espectro de ondas electromagnéticas en la banda de los THz. El ancho de banda de los THz tiene el potencial para lograr velocidades de terabits por segundo de transmisión de datos, para los futuros dispositivos inalámbricos. La banda de los THz no tiene todavía una definición estándar. Comúnmente son usadas definiciones que incluyen la región espectral de 0.1 y 30 THz. Sin embargo, el rango de 10 a 30 THz excede la banda del infrarrojo lejano y llega al infrarrojo medio, donde ya se encuentra bien establecida la tecnología óptica. Nosotros al hablar de la banda de THz, serán las frecuencias de 0.1-100 THz. Aunque la radiación en esta banda se encuentra de forma natural en el ambiente, permanece como la parte menos explorada del espectro electromagnético debido a la dificultad de fabricar fuentes y detectores con esas frecuencias [18]. La tecnología actual se basa en la mezcla de fuentes ópticas tales como láseres para generar de bajos a moderados niveles de potencia. Sin embargo, estas fuentes consumen demasiada energía y son muy voluminosas. Los receptores actuales a frecuencias de THz operan por medio de detección directa, utilizando diodos Schottky, bolómetros, termopilas, piroeléctricos, etc., dispositivos que no son de banda selectiva, tiene un bajo rango dinámico y poca sensibilidad [19]. Cabe mencionar que la radiación a THz es absorbida por muchos materiales, incluyendo las moléculas de vapor de agua en la atmosfera, por lo tanto, el rango de propagación es limitado debido a

las pérdidas por el trayecto. A causa de estas restricciones es necesario generar la mayor potencia de radiación y mejores detectores, es aquí donde las nanoantenas pueden desempeñar un papel importante.

A continuación, se realiza una revisión sobre el estado del arte y el futuro de las comunicaciones inalámbricas a frecuencia de los terahertz.

1.5.1 Telefonía móvil 5G

La comunicación móvil se ha vuelto más popular en los últimos años debido a la rápida evolución en la tecnología móvil. Este rápido avance se debe al aumento de clientes de las telecomunicaciones.

El sistema de comunicación móvil inalámbrica de primera generación (1G) consta de sistemas analógicos de telefonía celular, se utilizó para el servicio de voz durante la década de los ochentas. Los sistemas móviles inalámbricos de segunda generación (2G) son los sistemas celulares digitales. En comparación con la primera generación, el sistema inalámbrico de segunda generación utiliza el esquema de modulación digital. La tercera generación (3G) inicio a finales del año 2000. La tecnología 3G proporciona una velocidad de transmisión de hasta 2 Mbps. Los servicios de la tercera generación 3G combinan el acceso móvil de alta velocidad con el Protocolo de Internet (IP). Además de la mejora de velocidad en transmisión, se aumentó la calidad de los servicios, tales como capacidad de enviar y recibir llamadas en redes móviles fuera del área de servicio local de la propia compañía dentro del país o bien durante una estancia en otro país.

Los sistemas de cuarta generación (4G) ofrecen una velocidad de descarga de 100Mbps. 4G proporciona las mismas características que la 3G y además ofrece acceso a Internet móvil de banda ancha, por ejemplo, para ordenadores portátiles con módems inalámbricos, los teléfonos inteligentes y otros dispositivos móviles. Aplicaciones que incluyen acceso móvil web, telefonía IP, servicios de juego, televisión móvil de alta definición, videoconferencia, televisión en 3D, etc.



Figura 1.8 Evolución de la tecnología móvil.

Los sistemas de comunicación inalámbrica de cuarta generación 4G se han implementado o están por implementarse en muchos países. Sin embargo, con el gran avance y desarrollo de dispositivos móviles y servicios inalámbricos, todavía hay algunos desafíos que no pueden ser cubiertos por la 4G, tales como los problemas de espectro electromagnético y el alto consumo de energía. Los diseñadores de sistemas inalámbricos se han enfrentado a la creciente demanda de altas velocidades de datos y la movilidad requerida por las nuevas aplicaciones inalámbricas y, por tanto, han comenzado a investigar sobre la quinta generación (5G) de sistemas inalámbricos la cual se ha implementado desde el presente año 2020. El objetivo principal de 5G es diseñar el mejor mundo inalámbrico que esté libre de limitaciones y obstáculos de las generaciones anteriores. 5G va a cambiar en la mayoría de los usuarios el acceso a la comunicación de radio móvil de banda ancha [20].

La banda de los THz es utilizada en la generación 5G de pequeños celulares. La banda de los THz ofrece comunicación de datos a alta velocidad con áreas de cobertura de hasta 10 metros. Aplicaciones específicas son ultra-alta definición en multimedia streaming a smartphones, o video conferencias a ultra-alta definición, figura 1.9. Además, enlaces direccionales en la banda de los terahertz se pueden utilizar para interconectar redes inalámbricas a ultra-altas velocidades [21].



Figura 1.9 Comunicación móvil 5G en la banda de los THz.

1.5.2 Redes inalámbricas de área local (T-WLAN)

La comunicación en la banda de los THz permite la interconexión entre las redes a muy alta velocidad por cable, por ejemplo, enlaces de fibras ópticas y dispositivos inalámbricos personales, tales como ordenadores portátiles y tablet (sin diferencia de velocidad entre los enlaces inalámbricos y por cable), figura 1.10.

Algunas aplicaciones específicas son de videoconferencia de alta definición o ultra alta velocidad de distribución inalámbrica de datos [22].



Figura 1.10 Redes inalámbricas de área local a Terabits.

1.5.3 Redes inalámbricas de área personal (T-WPAN)

Es posible establecer enlaces a Tbps entre dispositivos con estrecha proximidad con la comunicación en la banda de los THz. El entorno operativo es principalmente en el interior y por lo general en un escritorio. Las aplicaciones específicas incluyen los quioscos multimedia y transferencia de datos de ultra alta velocidad entre los dispositivos personales, figura 1.11. Por ejemplo, para transferir el contenido equivalente de un disco blue-ray a un dispositivo tipo tablet podría tomar menos de un segundo con un enlace de 1 Tbps [21,22].



Figura 1.11 Redes inalámbricas de área personal a Terabits.

1.5.4 Comunicación inalámbrica segura:

La banda de los THz también puede permitir enlaces de comunicación segura de ultra ancho de banda en los campos militares y de defensa, figura 1.12 La alta atenuación atmosférica a frecuencias THz y el uso de arreglos de antenas muy grandes para superar

los límites de las comunicaciones se pueden aprovechar para limitar drásticamente la probabilidad de espionaje.



Figura 1.12 Comunicación inalámbrica segura para aplicaciones militares.

1.5.5 Sistemas de monitoreo de la salud

Sodio, glucosa y otros iones en la sangre, el colesterol, los bio-marcadores de cáncer o la presencia de diferentes agentes infecciosos pueden ser monitoreados por medio de sensores a nanoescala o nanosensores. Varios nanosensores distribuidos en todo el cuerpo, es la definición de una red de nanosensores del cuerpo humano, esta red puede ser utilizada para recopilar datos relevantes sobre la salud del paciente. Una interfaz inalámbrica entre estos nanosensores y un micro-dispositivo, como un teléfono celular o equipo médico especializado podría ser utilizada para recoger todos estos datos y los retransmitirá al encargado de la atención médica.

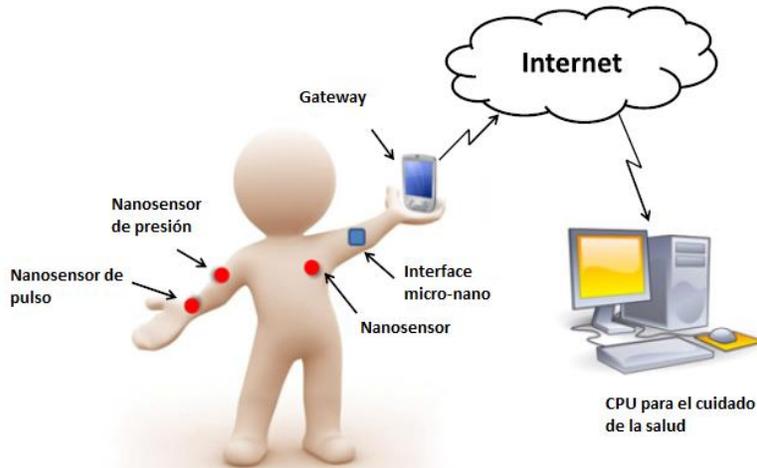


Figura 1.13 Redes de nanosensores para monitoreo de la salud.

1.5.6 El internet de las nano-cosas

La interconexión de las máquinas a nanoescala con las redes de comunicación existentes define un sistema físico-cibernético que se conoce como el Internet de las Nano-Cosas (Nano-IoNT) [23]. El IoNT permite nuevas aplicaciones interesantes que tendrán un impacto también en la forma en que trabajamos. Por ejemplo, en una oficina, un nanoreceptor y nano-antena se pueden incrustar en cada objeto para que puedan estar conectados permanentemente a internet. Como resultado, un usuario puede realizar un seguimiento de todo su tema profesional y personal de una manera fácil.

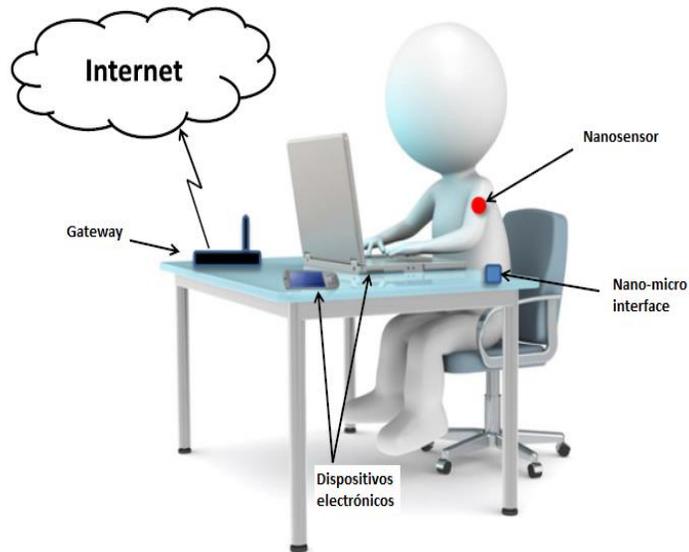


Figura 1.14 Internet de nano-dispositivos

1.5.7 Ultra alta velocidad en chips de comunicaciones:

Los investigadores están trabajando en transceptores a nanoescala basados en grafeno y los protocolos de transmisión que serían necesarios para la comunicación entre nanomáquinas.

La banda de los THz puede proporcionar medios eficientes y escalables de comunicación inalámbrica, mediante el uso de nano-antenas planas para crear enlaces de ultra alta velocidad [24].

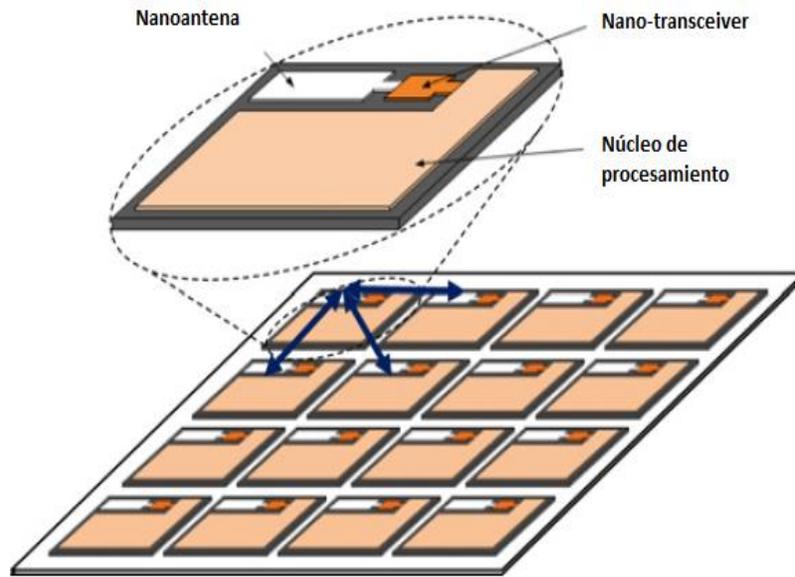


Figura 1.15 Chip de comunicación inalámbrica

Capítulo 2

2. Simulación multi-física eléctrica-térmica por medio del elemento finito. Bases teóricas

En este capítulo se presentan los fundamentos teóricos del método de elemento finito aplicado a simulaciones eléctricas y térmicas.

De manera general se describen las características principales que definen al software COMSOL Multiphysics el cual se utilizó para obtener la respuesta eléctrica y térmica de los diferentes dispositivos a frecuencias de terahertz, en la sección 2.2 se describe la física que gobierna los fenómenos que ocurren en nuestro modelo, en la sección 2.3 se explica a detalle el procedimiento para el modelado y la configuración de COMSOL.

2.1 Introducción al método de elementos finitos

Las simulaciones numéricas son utilizadas para obtener soluciones aproximadas a los problemas de la física matemática. Existen problemas cuyo planteamiento permite la obtención de una solución analítica para ciertas aproximaciones que reducen considerablemente el problema matemático, sin embargo, no se alejan en forma significativa de la realidad física del problema.

En simulación numérica existen técnicas que se basan en la resolución de ecuaciones diferenciales que modelan los problemas matemáticos mediante procedimientos numéricos iterativos, estas técnicas discretizan la ecuación diferencial en una ecuación en diferencias, resolviéndola de forma iterativa. Dentro de estas técnicas destaca la técnica de análisis por elementos finitos.

El método de los elementos finitos (MEF en castellano o FEM en inglés) es un método numérico general para la aproximación de soluciones de ecuaciones diferenciales parciales muy utilizado en diversos problemas de ingeniería y física. Este método fue

introducido por primera vez por R. Courant en 1943 [25], sin embargo, su uso era limitado debido al alto costo de las computadoras centrales. Desde la caída de los costos en las computadoras y su fenomenal incremento en poder de cómputo, el método de elemento finito ha sido desarrollado a una increíble precisión. Hoy en día, el método de los elementos finitos es reconocido como un método preeminente aplicable a una amplia variedad de problemas de ingeniería y matemáticas, incluyendo el área de transferencia de calor, microondas, electromagnetismo, etc.

2.1.1 Técnica de análisis por elementos finitos

La técnica de análisis por elementos finitos (AEF) consiste en el empleo de los métodos numéricos en la resolución de un problema físico determinado. Este método numérico se basa en dividir la geometría en la que se quiere resolver un problema físico, en pequeños elementos en los cuales se resuelven las ecuaciones diferenciales, teniendo en cuenta las propiedades físicas de los materiales empleados, las condiciones de contorno, etc. La resolución de estas ecuaciones se realiza de forma iterativa hasta que se alcanza convergencia en la solución.

Existen herramientas que permiten realizar este proceso de forma eficiente, dichas herramientas de propósito general o multidisciplinar permiten resolver varios problemas físicos como son: electromagnetismo, mecánica de fluidos, transferencia de calor, mecánica estructural, etc. Algunas herramientas o software permiten acoplar dos problemas físicos como es el caso del electromagnetismo y la termodinámica. Es decir, la salida de un problema se emplea como entrada en el otro problema y viceversa, de forma iterativa. Un ejemplo de este tipo de herramientas es el software COMSOL Multiphysics, el cual es utilizado en este trabajo.

El proceso de generación de la solución mediante AEF se realiza en estas herramientas mediante varios pasos: definición de la geometría de objeto de estudio, especificación del régimen a estudiar, asignación de las propiedades físicas de los materiales, mallado de la geometría, resolución del problema y análisis de la solución. A continuación, se realiza una breve explicación de los pasos anteriormente mencionados aplicado a un problema electromagnético de nuestro interés:

Definición de la geometría de objeto de estudio

Consiste en la obtención de un dibujo en 2D o 3D, de las diferentes estructuras en las que se pretende resolver las ecuaciones que describen la física. Algunas herramientas por elementos finitos (HEF) cuentan con la opción de importar y exportar dibujos CAD.

Especificación del régimen a estudiar

Es en esta fase en la que se especifica el tipo de régimen a estudiar. Para el caso del modelado eléctrico, térmico o multi-física, las HEF permiten realizar un análisis en el dominio de la frecuencia.

Asignación de las propiedades físicas de los materiales

Es aquí donde las propiedades de los materiales se asignan a cada uno de los objetos que se han generado en la fase de definición de la geometría, tales como la conductividad eléctrica, constante dieléctrica, índice de refracción, etc.

Mallado de la geometría

La geometría se divide en diferentes elementos en los que resuelven las ecuaciones que describen la física. Algunos programas suelen tener herramientas que generan el mallado de forma automática y permiten generar un mallado de forma más fina las zonas que se requiera. El mallado de la geometría es una tarea clave en el proceso de AEF.

Resolución del problema

En esta fase del proceso, es donde se aplica el método de análisis por elementos finitos para obtener la solución del problema físico de forma iterativa, en este caso la respuesta eléctrica o térmica de nuestras estructuras. La solución se obtiene en cada uno de los elementos en que se descompone la geometría. Aunque es posible sumar o integrar estos pequeños elementos en una región determinada, ya sea área o volumen.

Análisis de la solución

Una vez que se ha obtenido la solución del problema eléctrico-térmico, dicha solución se muestra en forma gráfica, dependiendo de la dimensión del problema en volúmenes o superficies.

Al resolver un problema utilizando el método de elementos finitos el mallado es una de las fases más importantes del proceso. Sin embargo, existen programas de cómputo eficientes

que resuelven problemas asociados al método del elemento finito, deben contemplar esquemas automatizados de generación de mallado, conocidos ahora en el argot computacional como *mesh generators* (generadores de mallado). Existen varios trabajos relacionados con propuestas de algoritmos que lidian con estos tópicos como en [26,27].

En general, los algoritmos que generan el mallado cubren los siguientes aspectos:

Definición de los bloques.

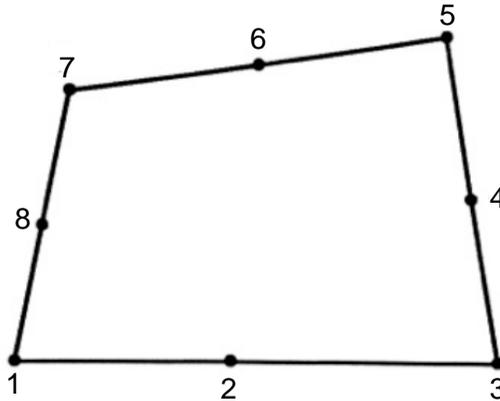


Figura 2.1 Bloque cuadrilateral típico

La región de solución es subdividida en bloques cuadrilaterales. Los subdominios con sus respectivos parámetros constitutivos $(\sigma, \mu, \varepsilon)$ deben ser representados por bloques separados. Como dato de entrada, se deben especificar las topologías de los bloques y las coordenadas en ocho puntos que describen a cada bloque. Cada bloque estará representado por un elemento isoparamétrico cuadrático de ocho nodos. Con un sistema de coordenadas naturales (ζ, η) , las coordenadas y y x serán representadas como:

$$x(\zeta, \eta) = \sum_{i=1}^8 a_i(\zeta, \eta)x_i \tag{2.1}$$

$$y(\zeta, \eta) = \sum_{i=1}^8 a_i(\zeta, \eta)y_i \tag{2.2}$$

Donde $a_i(\zeta, \eta)$ es una función de forma (geometría) asociada con el nodo i , y (x_i, y_i) son las coordenadas del nodo i que definen la frontera del bloque cuadrilateral, como se muestra en la figura 2.1. Las funciones de forma son expresadas en términos de los elementos isoparamétricos cuadráticos o hiperbólicos, como se muestra en la figura 2.2 y están dados por:

$$a_i = \frac{1}{4}(1 + \zeta\zeta_i)(1 + \eta\eta_i)(\zeta\zeta_i + \eta\eta_i + 1), \quad i = 1,3,5,7 \quad (2.3)$$

Y para los nodos de las esquinas,

$$a_i = \frac{1}{2}\zeta_i(1 + \zeta\zeta_i)(1 - \eta^2) + \frac{1}{2}(1 + \eta\eta_i)(1 - \zeta^2), \quad i = 2,4,6,8 \quad (2.4)$$

Para los nodos intermedios. Cabe resaltar las siguientes propiedades de las funciones de forma:

1. Satisface las siguientes condiciones

$$\sum_{i=1}^8 a_i(\zeta, \eta) = 1 \quad (2.5)$$

$$a_i(\zeta_j, \eta_j) = \begin{cases} 1, & i = j \\ 0, & i \neq j \end{cases} \quad (2.6)$$

2. Se convierte en cuadráticas a través de los elementos de la periferia ($\zeta = \pm 1, \eta = \pm 1$).

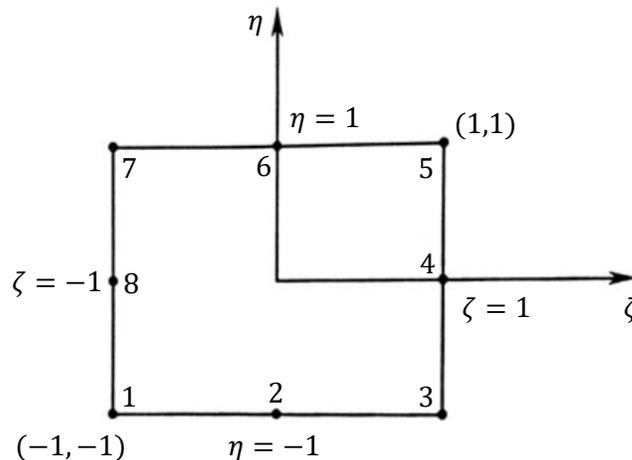


Figura 2.2 Elemento octonodal

Subdivisión de cada bloque.

Para cada bloque se especifica N DIV X y N DIV Y, el número de elementos de subdivisión a ser creados en la dirección ζ y η respectivamente. Además, se especifican los factores de peso $(W_\zeta)_i$ y $(W_\eta)_i$ que permiten la generación del mallado dentro del bloque. Al especificar N DIV X, N DIV Y, W_ζ y W_η se debe asegurar que las subdivisiones a lo largo de las interfaces del bloque (para los bloques adyacentes) son compatibles. Se inicializan ζ y η a un valor de -1 de modo que las coordenadas naturales sean incrementadas de acuerdo con

$$\zeta_i = \zeta_i + \frac{2(W_\zeta)_i}{W_\zeta^T \cdot F} \quad (2.7)$$

$$\eta_i = \eta_i + \frac{2(W_\eta)_i}{W_\eta^T \cdot F} \quad (2.8)$$

Donde

$$W_\zeta^T = \sum_{j=1}^{N \text{ DIV } X} (W_\zeta)_j \quad (2.9)$$

$$W_\eta^T = \sum_{j=1}^{N \text{ DIV } Y} (W_\eta)_j \quad (2.10)$$

y

$$F = \begin{cases} 1, & \text{Para los elementos lineales} \\ 0, & \text{Para los elementos cuadráticos} \end{cases} \quad (2.11)$$

Tres tipos de elementos son permitidos: a) elementos cuadrilaterales lineales de cuatro nodos, b) elementos triangulares lineales de tres nodos, c) elementos isoparamétricos cuadráticos de ocho nodos.

Conexión entre bloques individuales y elementos geométricos de órdenes superiores.

Después de la subdivisión de cada bloque y enumerar sus puntos por separado, es necesario conectar los bloques y tener cada nodo con una numeración única. Esto se logra comparando las coordenadas de cada nodo y asignando el mismo número a todos aquellos que tengan la misma coordenada, e decir se compara la coordenada del nodo 1 con todas las demás de los otros nodos, posteriormente se compara el nodo 2 con todas las demás y así sucesivamente hasta que todos los nodos que se hubieran repetido queden eliminados. Ejemplos de esta etapa algorítmica pueden ser encontrados en [28].

Elementos de órdenes superiores son aquellos en los que la función de forma o interpolación polinomial es de grado dos o mayor y como es de suponerse, la precisión en la solución del elemento finito puede incrementarse al usarse un mallado más fino, o usándose elementos de órdenes superiores o ambos. Desai y Abel [29] muestran un estudio comparativo entre las técnicas de refinamiento del elemento por un refinamiento en el mallado y por un incremento en el orden de la función de forma, pero en general elementos de órdenes menores logran alcanzar los mismos resultados finales en recisión. Los elementos de órdenes superiores son particularmente útiles cuando el gradiente de la variable de campo se espera que varíe rápidamente, como en los casos en que la geometría bajo estudio contenga secciones no homogéneas o gradientes de materiales en su construcción.

Elementos tridimensionales

Las mismas técnicas propuestas en las secciones previas para dos dimensiones pueden ser extendidas a los elementos tridimensionales, con el consecuente aumento en el número de elementos a ser generados y por ende, en el volumen de datos a ser procesados y la cantidad de memoria para llevarlos a cabo, así como el tiempo que tomará el obtener el resultado de los cálculos.

La región de la solución se dividirá ahora en tetraedros o hexaedros (prisma rectangular) como se muestra en la figura 2.3.

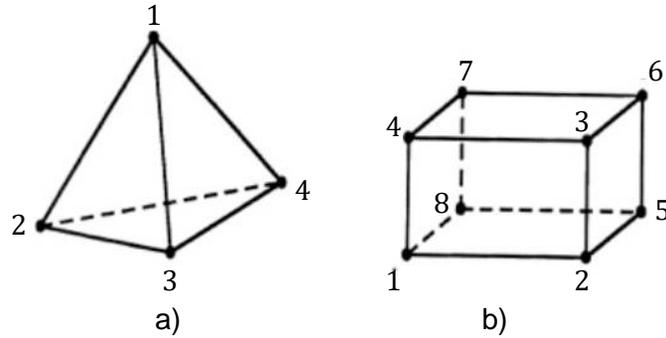


Figura 2.3 Elementos tridimensionales: a) tetranodal o tetraedro de orden lineal, b) octonodal o hexaedro de orden lineal.

Para el elemento tetraédrico, las coordenadas locales son $\xi_1, \xi_2, \xi_3, \xi_4$ cada uno perpendicular a uno de los lados. Ellos son definidos en un punto dado según las propiedades que se desea asignar a la geometría, por ejemplo, como la tasa de cambio entre la distancia desde ese punto dado al eje perpendicular opuesto, y también pueden ser interpretados como tasa de cambio de volumen, es decir, en el punto P

$$\xi_i = \frac{v_i}{v} \quad (2.12)$$

Donde v_i es la frontera del volumen en P y la cara i , de modo que

$$\sum_{i=1}^4 \xi_i = 1 \quad (2.13)$$

o

$$\xi_4 = 1 - \xi_1 - \xi_2 - \xi_3 \quad (2.14)$$

Las siguientes propiedades resultan útiles en el cálculo de las integrales que involucran coordenadas locales:

$$dv = 6v d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3, \quad (2.15)$$

$$\iiint f dv = 6v \int_0^1 \left[\int_0^{1-\xi_3} \left(\int_0^{1-\xi_2-\xi_3} f d\xi_1 \right) d\xi_3 \right] d\xi_3, \quad (2.16)$$

$$\iiint \xi_1^i \xi_2^j \xi_3^k \xi_4^l dv = \frac{i! j! k! l!}{(i + j + k + l + 3) 6v} \quad (2.17)$$

En términos de coordenadas locales, una función arbitraria $\Phi(x, y)$ puede ser aproximada a un elemento en términos de un polinomio completo de n -ésimo orden como

$$\Phi(x, y) = \sum_{i=1}^m a_i(x, y) \Phi_i \quad (2.18)$$

Donde $m = \frac{1}{6}(n + 1)(n + 2)(n + 3)$ es el número de nodos en el tetraedro o el número de términos en el polinomio completo tridimensional pueden ser dispuestos como se muestra en la figura 2.4.

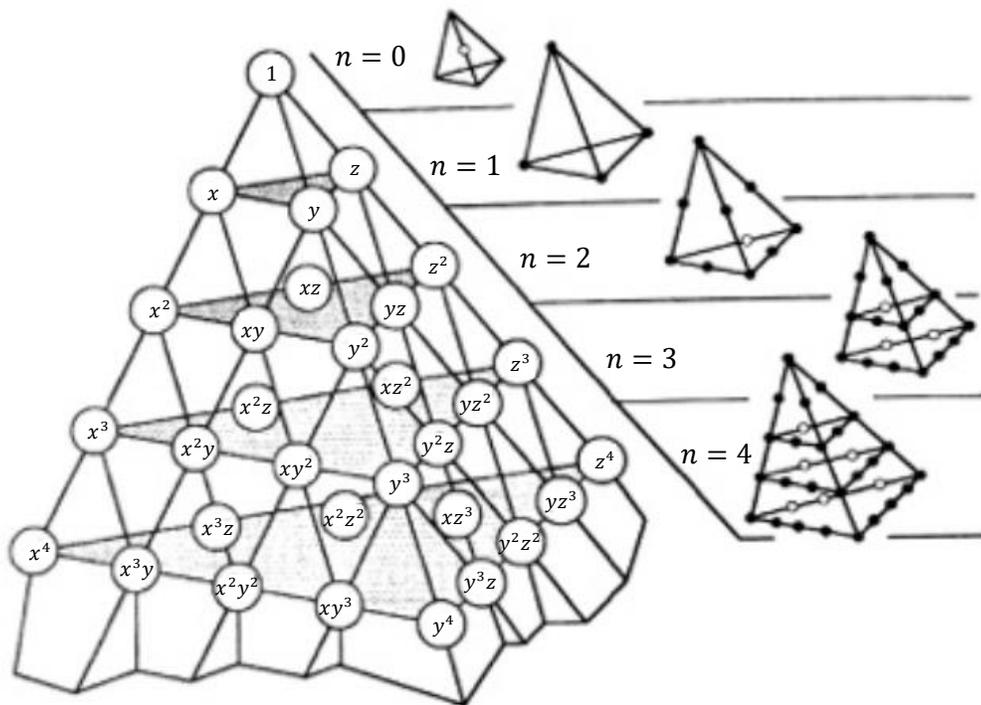


Figura 2.4 Tetraedro de Pascal y sus términos de los arreglos asociados.

Cada punto en los elementos del tetraedro es representado por cuatro enteros i, j, k y l que se utilizan para determinar las coordenadas locales $(\xi_1, \xi_2, \xi_3, \xi_4)$ en el punto $P_{i,j,k,l}$,

$$(\xi_1, \xi_2, \xi_3, \xi_4) = \left(\frac{i}{n}, \frac{j}{n}, \frac{k}{n}, \frac{l}{n}\right), \quad (2.19)$$

de aquí, para cada nodo,

$$a_q = a_{i,j,k,l} = p_i(\xi_1)p_j(\xi_2)p_k(\xi_3)p_l(\xi_4) \quad (2.20)$$

donde $q = 1, 2, \dots, m$

y

$$P_r(\xi) = \frac{(n\xi - r + 1)}{r} P_{r-1}(\xi), r < 0 \quad (2.21)$$

donde $P_0(\xi) = 1$.

Las relaciones entre los nodos de números q e $ijkl$ se ilustra en la figura 2.5 para el tetraedro de segundo orden ($n=2$).

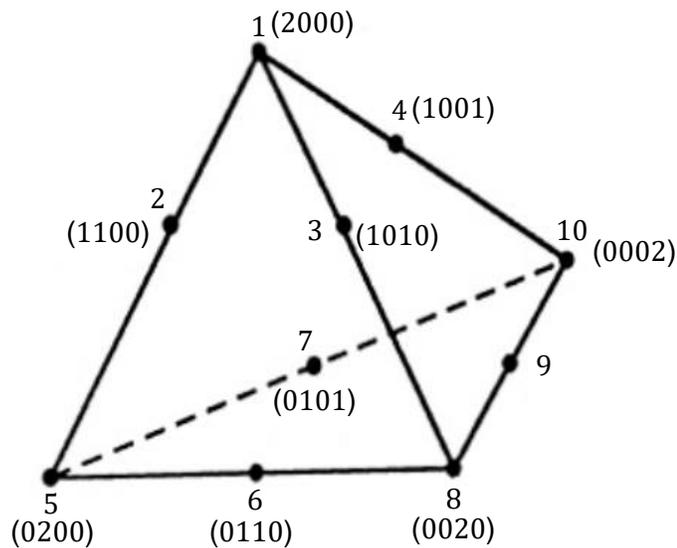


Figura 2.5 Esquema de numeración de un tetraedro de segundo orden.

2.2 Física: electromagnetismo, corrientes eléctricas y transferencia de calor.

La definición de la física en el proceso de simulación es la parte de mayor importancia ya que describe todos los fenómenos que ocurren en nuestro modelo.

Para obtener la respuesta eléctrica y térmica de nuestras estructuras se utilizó el módulo AC/DC y el de transferencia de calor de COMSOL Multiphysics.

El módulo AC/DC, específicamente la interfaz de corriente eléctrica es usada para resolver las ecuaciones del campo eléctrico, corrientes y distribuciones de potencial eléctrico en medios conductores bajo condiciones donde efectos inductivos son insignificantes; esto es, cuando la skin depth o profundidad de piel es mucho más grande que el dispositivo estudiado. La interfaz física resuelve la ecuación de la conservación de la corriente basado en la ley de ohm usando el potencial eléctrico escalar y como la variable dependiente.

Electromagnetismo.

En nuestro campo de investigación y en el estudio que hemos realizado con el software de simulación numérica ha sido fundamental partir de las ecuaciones que describen los fenómenos electromagnéticos, dichas ecuaciones son las ecuaciones de Maxwell:

$$\nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{J} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} \quad (2.22)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \quad (2.23)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho \quad (2.24)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (2.25)$$

Las ecuaciones de Maxwell son utilizadas para aplicaciones de nuestro campo de estudio, tales como:

- Electrostática
- Ondas electromagnéticas
- Calentamiento por efecto Joule
- Calentamiento por microondas
- Calentamiento por inducción

También es importante considerar las ecuaciones subyacentes de electromagnetismo, dichas ecuaciones están automáticamente disponibles en todos los modos de aplicación de COMSOL Multiphysics. Para los problemas de alta frecuencia, el voltaje no es una entidad bien definida, y es necesario definir los parámetros de dispersión en términos del campo eléctrico.

Las fórmulas para las ondas de alta frecuencia pueden ser derivadas de las leyes de Maxwell-Ampere y de Faraday:

$$\nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{J} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} \quad (2.26)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \quad (2.27)$$

Usando las relaciones constitutivas para materiales lineales $\mathbf{D} = \epsilon \mathbf{E}$ y $\mathbf{B} = \mu \mathbf{H}$, así como una corriente $\mathbf{J} = \sigma \mathbf{E}$, estas dos ecuaciones se convierten en:

$$\nabla \times \mathbf{H} = \sigma \mathbf{E} + \frac{\partial \epsilon \mathbf{E}}{\partial t} \quad (2.28)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\mu \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} \quad (2.29)$$

Las relaciones $\mu\mathbf{H} = \nabla \times \mathbf{A}$ y $\mathbf{E} = -\partial\mathbf{A}/\partial t$ permiten reescribir la ley de Maxwell-Ampere utilizando el potencial magnético,

$$\mu_0\sigma \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} + \mu_0 \frac{\partial}{\partial t} \epsilon \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} + \nabla \times (\mu_r^{-1} \nabla \times \mathbf{A}) = 0 \quad (2.30)$$

Escribiendo los campos en una forma armónica en el tiempo,

$$\mathbf{E}(x, y, z, t) = \mathbf{E}(x, y, z)e^{j\omega t} \quad (2.31)$$

$$\mathbf{H}(x, y, z, t) = \mathbf{H}(x, y, z)e^{j\omega t} \quad (2.32)$$

Las dos leyes se pueden combinar en una ecuación ya sea para el campo eléctrico, o una ecuación para el campo magnético

$$\nabla \times (\mu^{-1} \nabla \times \mathbf{E}) - \omega^2 \epsilon_c \mathbf{E} = 0 \quad (2.33)$$

$$\nabla \times (\mu^{-1} \nabla \times \mathbf{H}) - \omega^2 \mu \mathbf{H} = 0 \quad (2.34)$$

Donde la segunda ecuación contiene la permitividad compleja

$$\epsilon_c = \epsilon - j \frac{\sigma}{\omega} \quad (2.35)$$

La conductividad da lugar a pérdidas óhmicas en el medio. Otros tipos de pérdidas, por ejemplo, las pérdidas de polarización se suelen dar como una parte imaginaria de la permitividad compleja,

$$\epsilon_c = \epsilon' - j\epsilon'' \quad (2.36)$$

Donde ϵ' es la parte real de ϵ , y todas las pérdidas están dadas por ϵ'' . Alternativamente, es posible definir una conductividad equivalente que representa todas las pérdidas:

$$\sigma = \omega\epsilon'' \quad (2.37)$$

En las aplicaciones ópticas y fotónicas, el índice de refracción se utiliza a menudo en lugar de la permitividad. En materiales donde μ_r es 1, la relación entre el índice de refracción complejo

$$\tilde{n} = n - jk \quad (2.38)$$

Y la permitividad relativa compleja es

$$\epsilon_{rc} = \tilde{n}^2 \quad (2.39)$$

Esto es

$$\epsilon'_r = n^2 - k^2 \quad (2.40)$$

$$\epsilon''_r = 2nk \quad (2.41)$$

Las relaciones inversas son

$$n^2 = \frac{1}{2}(\epsilon'_r + \sqrt{\epsilon'^2_r + \epsilon''^2_r}) \quad (2.42)$$

$$k^2 = \frac{1}{2}(-\epsilon'_r + \sqrt{\epsilon'^2_r + \epsilon''^2_r}) \quad (2.43)$$

El parámetro k representa un amortiguamiento de la onda electromagnética.

Corrientes eléctricas.

A continuación, describiremos sobre las simulaciones numéricas utilizadas para obtener resultados sobre el efecto Joule en nuestros dispositivos.

El calentamiento de Joule (también conocido como calentamiento resistivo u óhmico) describe el proceso en el que la energía de una corriente eléctrica se convierte en calor a medida que fluye a través de una resistencia. En particular, cuando la corriente eléctrica fluye a través de un sólido o líquido de conductividad finita, la energía eléctrica se convierte en calor por medio de pérdidas resistivas en el material. El calor se genera en la microescala cuando los electrones de conducción transfieren energía a los átomos del conductor por medio de colisiones.

Cuando se manejan corrientes eléctricas estacionarias en medios conductores se debe considerar la ecuación estacionaria de continuidad. En un sistema de coordenadas estacionario, la forma puntual de la ley de Ohm establece que:

$$J = \sigma E + J_e \quad (2.44)$$

Donde σ es la conductividad eléctrica (de acuerdo con el Sistema Internacional de unidades SI: S/m), y J_e es una densidad de corriente generada externamente (unidad SI: A/m²).

La conservación de la Corriente añade la ecuación de continuidad para el potencial eléctrico y proporciona una interfaz para definir la conductividad eléctrica, así como la relación constitutiva y la permitividad relativa para la corriente de desplazamiento.

La forma estática de la ecuación de continuidad entonces afirma:

$$\nabla \cdot J = -\nabla \cdot (\sigma \nabla V - J_e) = 0 \quad (2.45)$$

Para manejar las fuentes de corriente, se puede generalizar la ecuación a:

$$-\nabla \cdot (\sigma \nabla V - J_e) = Q_J \quad (2.46)$$

Donde Q_J es la fuente de corriente (SI: A/m³).

El campo eléctrico lo podemos expresar en términos de potencial eléctrico:

$$E = -\nabla V \quad (2.47)$$

La condición de frontera que se toma en cuenta en la física de corrientes eléctricas en diferentes medios y las fronteras interiores, se le llama condición de frontera de continuidad, esto es:

$$n \cdot j = 0 \quad (2.48)$$

Esta condición de frontera significa que no hay corriente eléctrica que fluya hacia la frontera. En límites interiores, significa que ninguna corriente puede fluir a través de la frontera y que el potencial eléctrico es discontinuo.

En las simulaciones eléctricas es importante establecer los valores iniciales, se añade un valor inicial para el potencial eléctrico que puede servir como una condición inicial para una simulación transitoria o como una conjetura inicial para un solucionador no lineal. Si se requiere más de un conjunto de valores iniciales, desde la barra de herramientas de Física, se puede añadir otros bloques de valores iniciales, por ejemplo, condiciones límite y fuentes de corriente.

Por default el potencial eléctrico inicial V es 0, (SI: Volts).

Transferencia de calor.

En los siguientes párrafos se revisa la teoría sobre las ecuaciones de transferencia de calor en COMSOL Multiphysics.

La transferencia de calor se define como el movimiento de energía debido a una diferencia de temperatura. Se caracteriza por los siguientes mecanismos:

- Conducción. La conducción del calor tiene lugar a través de diferentes mecanismos en diferentes medios. Teóricamente tiene lugar en un gas a través de colisiones de las moléculas; en un fluido a través de las oscilaciones de cada molécula en una "jaula" formada por sus vecinos más cercanos; en los metales principalmente por electrones que transportan el calor y en otros sólidos por movimiento molecular que en los cristales toma la forma de vibraciones de red conocidas como fonones. Lo típico en la conducción del calor es que el flujo de calor es proporcional al gradiente de temperatura.

- Convección- Calor por convección (a veces llamada advección de calor) tiene lugar a través del desplazamiento neto de un fluido, que transporta el calor contenido en un fluido a través de la propia velocidad del fluido. El término convección (especialmente el enfriamiento por convección y el calentamiento por convección) también se refiere a la disipación de calor de una superficie sólida a un fluido, típicamente descrito por un coeficiente de transferencia de calor.

- Radiación: La transferencia de calor por radiación tiene lugar a través del transporte de fotones. Los medios semitransparentes absorben, emiten y dispersan fotones. Las superficies opacas los absorben o los reflejan.

La ecuación de calor

La ley fundamental que rige toda transferencia de calor es la primera ley de la termodinámica, comúnmente conocida como el principio de conservación de la energía. Sin embargo, la energía interna, U , es una cantidad bastante incómoda de medir y utilizar en las simulaciones.

Por lo tanto, la ley fundamental suele reescribirse en términos de temperatura, T . Para un fluido, la ecuación de calor resultante es:

$$\rho C_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) T \right) = -(\nabla \cdot \mathbf{q}) + \tau : \mathbf{S} - \frac{T}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial T} \Big|_p \left(\frac{\partial p}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) p \right) + Q \quad (2.49)$$

Donde

- ρ es la densidad (SI: kg/m^3)
- C_p es la capacidad de calor específico a presión constante (SI: $J/(kg \cdot K)$)
- T es la temperatura absoluta (SI: K)
- \mathbf{u} es el vector de velocidad (SI: m/s)
- \mathbf{q} es el flujo de calor por conducción (SI: W/m^2)
- P es la presión (SI: Pa)
- \mathbf{S} es el tensor de velocidad de tensión (SI: $1/s$)
- Q contiene fuentes de calor distintas (SI: W/m^3)

Para derivar la ecuación 2.49, se han utilizado varias relaciones termodinámicas. La ecuación también supone que la masa se conserva siempre, lo que significa que la densidad y la velocidad debe estar relacionada a través:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho v) = 0 \quad (2.50)$$

Las interfaces de transferencia de calor utilizan la ley de Fourier de conducción de calor, que establece que el flujo de calor conductivo, q , es proporcional al gradiente de temperatura:

$$q_i = -k \frac{\partial T}{\partial x_i} \quad (2.51)$$

Insertando la ecuación 2.51 en la ecuación 2.49, reordenando los términos e ignorando el calentamiento viscoso y la presión, podemos reescribir la ecuación de calor en una forma más familiar:

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} + \rho C_p \mathbf{u} \cdot \nabla T = -\nabla \cdot (k \nabla T) + Q \quad (2.52)$$

La interfaz de Transferencia de Calor con la característica de Transferencia de Calor en Fluidos resuelve esta ecuación para la temperatura, T . Pero si la velocidad se establece en cero, se obtiene la ecuación que rige la transferencia de calor para conducción:

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} + \nabla \cdot (-k \nabla T) = Q \quad (2.53)$$

2.3 Generalidades de software COMSOL Multiphysics

COMSOL Multiphysics (antes conocido como FEMLAB) es un paquete de software de análisis y resolución por elementos finitos para varias aplicaciones físicas y de ingeniería, especialmente fenómenos acoplados, o multifísicos.

COMSOL Multiphysics también ofrece una amplia y bien gestionada interfaz a MATLAB y sus toolboxes que proporcionan una amplia variedad de posibilidades de programación, pre procesado y post procesado. También proporciona una interfaz similar a COMSOL

Script. Los paquetes son multiplataforma (Windows, Mac, Linux, Unix.) Además de las interfaces de usuario convencionales basadas en físicas, COMSOL Multiphysics también permite entrar sistemas acoplados de ecuaciones en derivadas parciales (EDP). Las EDP se pueden entrar directamente o utilizando la llamada forma débil [30].

Los sistemas físicos se pueden expresar mediante ecuaciones, es decir, en su forma matemática que por lo regular son ecuaciones diferenciales parciales (EDP). Las ecuaciones diferenciales parciales, también conocidas como ecuaciones en derivadas parciales, tienen la finalidad de definir problemas físicos tales como, propagación del sonido o del calor, electrostática, dinámica de fluidos, elasticidad, entre otros. Un fenómeno físico puede modelarse a través de un análisis: primero se representa el fenómeno mediante un modelo matemático que se compone de EDP y posteriormente, aplicando algún método específico, se resuelven las ecuaciones.

Como se mencionó anteriormente COMSOL Multiphysics se basa en el método de elemento finito (FEM, Finite Element Method o MEF) el cual se caracteriza por dividir el dominio del modelo en un gran número de subdominios o elementos finitos, de lo cual proviene el nombre del método. El conjunto de elementos finitos forma una partición del modelo que se denomina también como discretización. La división del dominio se considera como una malla y el análisis se lleva a cabo para cada uno de los elementos que se generaron.

El MEF está pensado para ser usado en computadoras y permite resolver ecuaciones diferenciales asociadas a un problema físico sobre geometrías complicadas. El MEF se usa en el diseño, mejora de productos y aplicaciones industriales, así como en la simulación de sistemas físicos y biológicos complejos. La variedad de problemas a los que puede aplicarse ha crecido enormemente, siendo el requisito básico que las ecuaciones constitutivas y ecuaciones de evolución temporal del problema a considerar sean conocidas de antemano [31].

Descripción de las principales partes del software COMSOL Multiphysics 5.4

La interfaz principal está dividida en 4 ventanas:

a) *Model Builder*.

- b) Settings
- c) Graphics.
- d) Progress, results y messages.

En la figura 2.6 se muestran las secciones principales de la interfaz de usuario del software COMSOL versión 5.4.

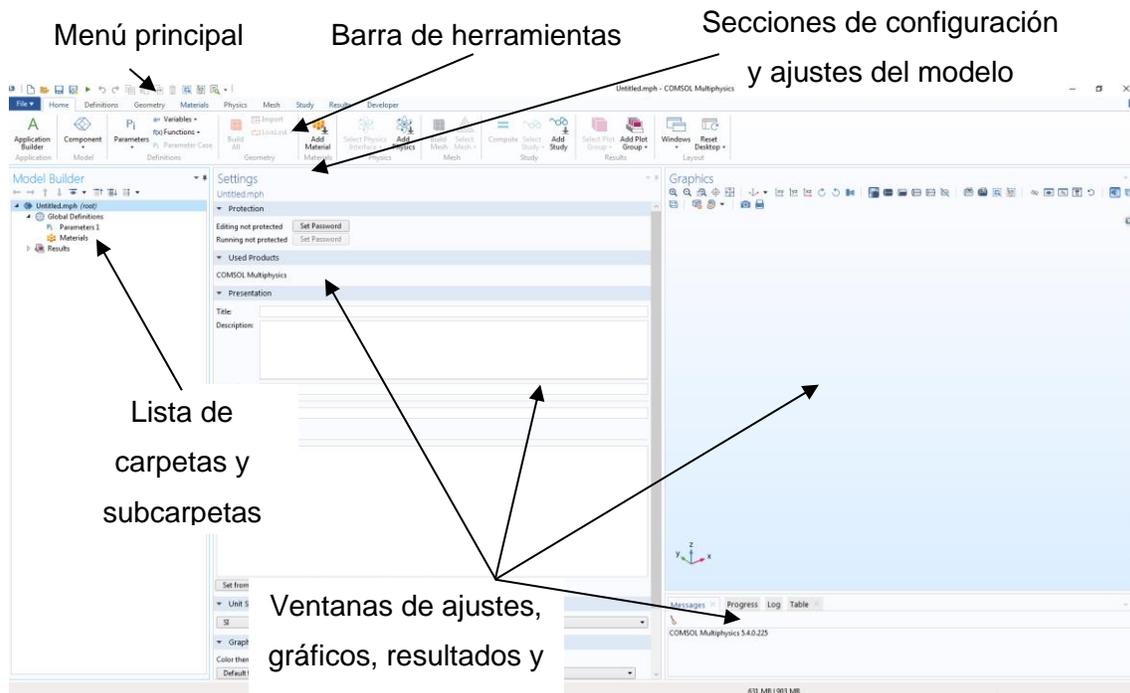


Figura 2.6 Interfaz principal de COMSOL Multiphysics.

Model Builder

En la figura 2.7 se muestra la ventana “*Model Builder*”, la cual tiene el fin de facilitar al usuario el manejo del software, mostrando el contenido de carpetas y subcarpetas que se utilizan durante todo el proceso para que se puedan identificar y ubicar de manera rápida. Así como también permite visualizar las nuevas especificaciones que se van adicionando al modelo.

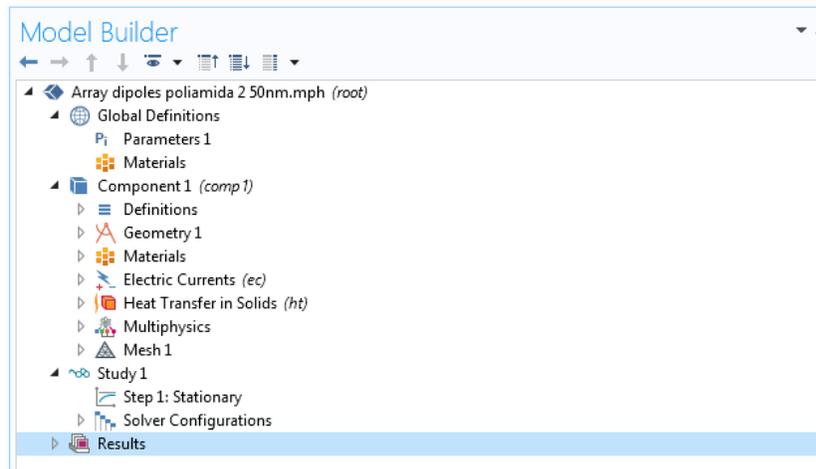


Figura 2.7 Ventana de Model Builder.

Settings

Esta ventana muestra y se lleva a cabo la parte del proceso en que se adicionan los valores de las variables, se realiza la configuración de nuestro modelo.

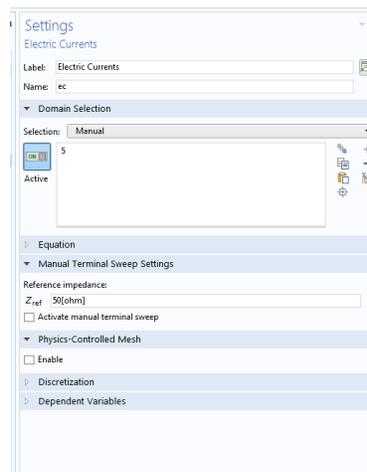


Figura 2.8 Ventana de Model Wizard.

Graphics, progress, results y messages.

En esta ventana se mostrarán las imágenes correspondientes a cada resultado que presenten las etapas durante toda la simulación. En la parte inferior de la ventana se

muestra el progreso, resultados y mensajes que se obtienen al final de cada paso de la simulación.

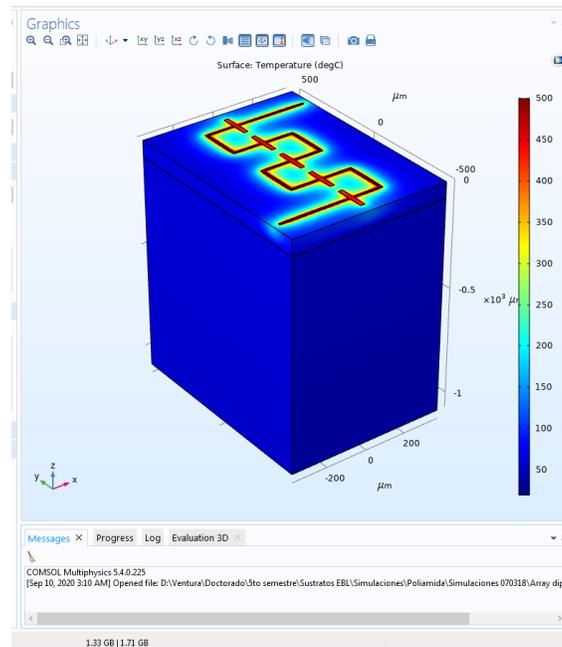


Figura 2.9 Ventana de Graphics.

Para dar una secuencia lógica al desarrollo del experimento en el software de simulación, se dividió en los siguientes pasos:

- Preprocesamiento
- Procesamiento
- Post-procesamiento

El Preprocesamiento, se refiere al modelado del sistema físico (geometría y materiales), a la definición de parámetros, funciones y variables, establecer las ecuaciones diferenciales parciales que describen el sistema físico y el proceso del mallado. Procesamiento o solución es la manipulación de las características del estudio utilizado (estado estacionario, dependiente del tiempo, en frecuencia, entre otros).

Post-procesamiento es la obtención, manipulación y visualización de los resultados obtenidos por el procesamiento. Estos datos pueden ser interpretados mediante gráficas, diagramas, tablas, entre otros.

Capítulo 3

3. Fabricación de micro y nanoestructuras metálicas

Introducción

Litografía por haz de electrones (EBL) es una técnica especializada para la creación de patrones que llegan a tener tamaños de micrómetros hasta nanómetros. Consiste en hacer incidir un haz de electrones a través de una superficie cubierta con una película de resina sensible a esos electrones, por lo que la energía genera en la película de resina el patrón deseado.

Las primeras máquinas de litografía por haz de electrones, con base en el microscopio electrónico de barrido (SEM), fueron desarrollados a finales de 1960. Poco después llegó el descubrimiento del polímero llamado PMMA (polimetacrilato de metilo) el cual es una excelente resina para litografía por haz de electrones. Es notable que incluso hoy en día, a pesar de los avances tecnológicos, muchos trabajos continúan realizándose con PMMA para el desarrollo de EBL comercial.

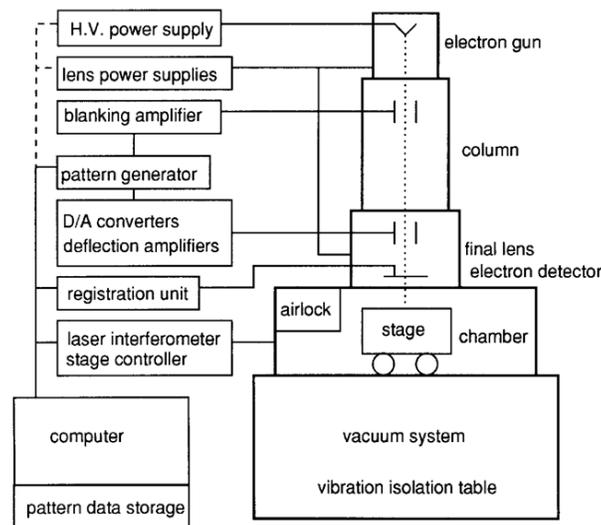


Figura 3.1 Diagrama que muestra la mayoría de los componentes de un sistema básico de litografía de haz de electrones

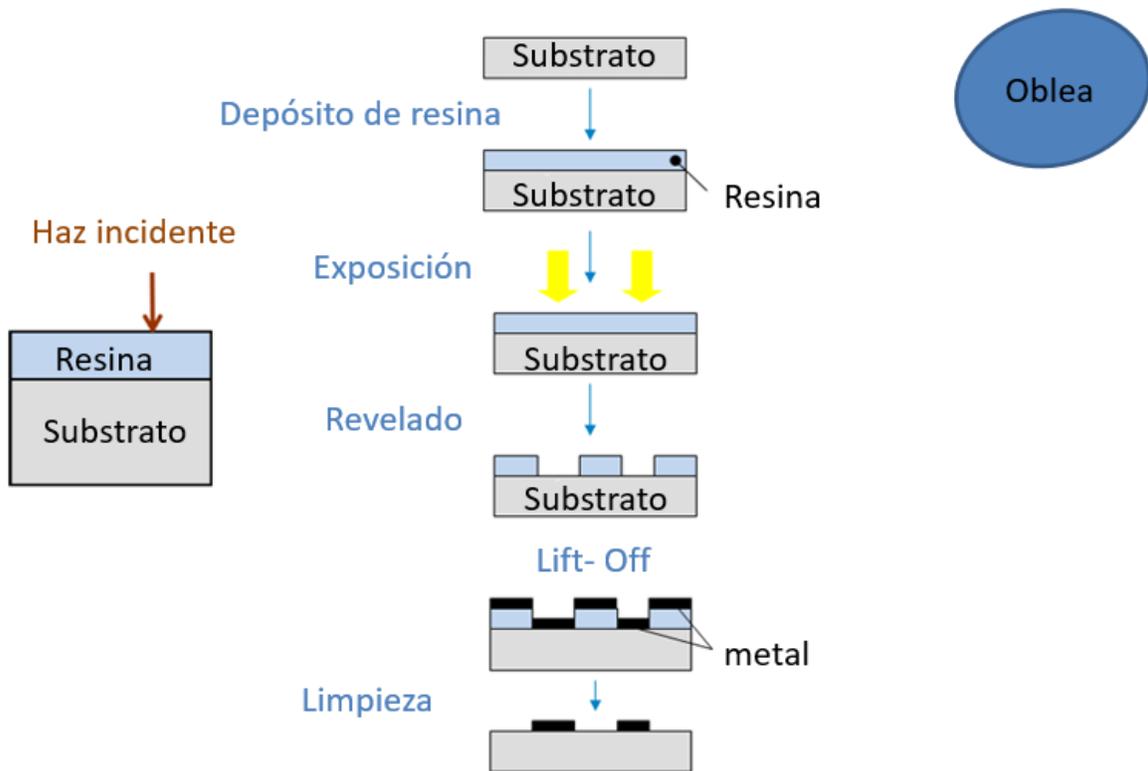


Figura 3.2 Proceso de litografía de haz de electrones.

En este capítulo se detalla la metodología utilizada para fabricación de nuestras estructuras, hacemos referencia a los equipos utilizados en el proceso de diseño, grabado de patrones y depósito de materiales.

Para la fabricación se utilizó la técnica de litografía de haz de electrones mediante el uso del equipo Inspect F50. Los principales pasos que se siguieron para realizar la litografía son los siguientes:

- Diseño de geometría (Autocad)
- Limpieza de sustrato
- Depósito de resina
- Uso del software Elphy Quantum y grabado utilizando SEM-F50
- Revelado de muestra
- Metalización mediante evaporación térmica y pulverización catódica.

- Visualización de resultados (Microscopio óptico, SEM-F50 y Dual Beam FIB-SEM)
- Depósito de material y toma de imágenes de alta resolución con el equipo Helios G4 CX.

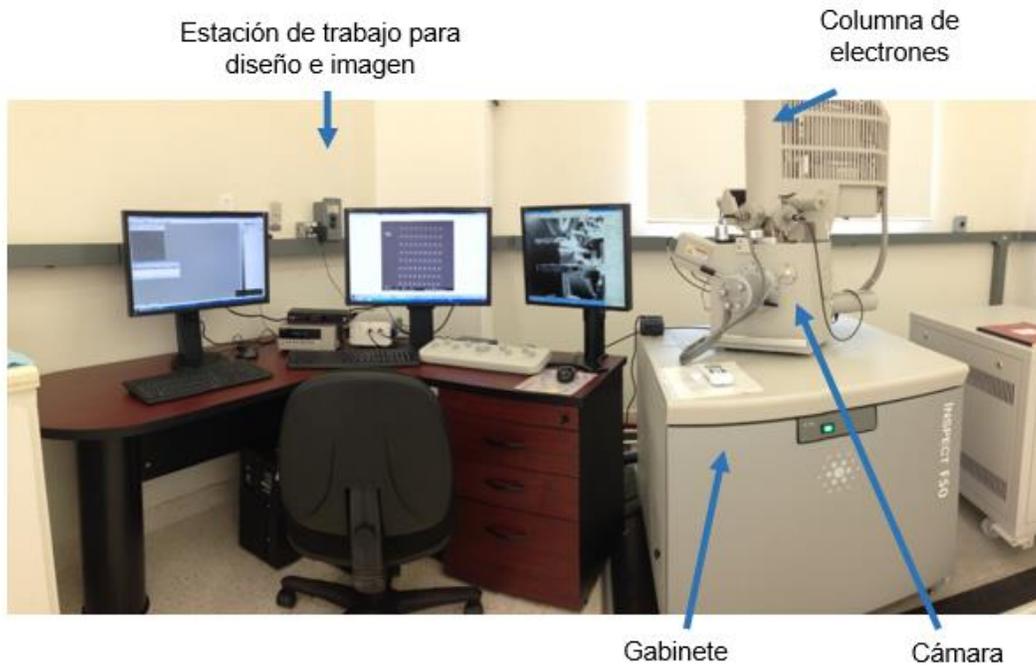


Figura 3.3 Equipo de litografía de haz de electrones – Inspect F50.



Figura 3.4 Equipo Dual Beam FIB-SEM Helios G4 CX.

3.1 Diseño de la geometría

En los procesos de fabricación industriales y tecnológicos es fundamental comenzar con un diseño del producto que se desea fabricar, estableciendo dimensiones, formas y parámetros. Generalmente dicho diseño se realiza utilizando software especializado para esas aplicaciones, en nuestro caso hemos utilizado el software Autocad para las geometrías más complejas que requieren un mayor detalle en sus formas y dimensiones. Autocad es un software que facilita el diseño de estructuras en 3D, con esto podemos modelar digitalmente nuestra geometría y realizar ajustes de manera eficiente, después de realizar el diseño en el software es necesario exportar el archivo en extensión: dxf, ya que para realizar el proceso de litografía por haz de electrones necesitamos importar el diseño en el software Elphy Quantum. A continuación, se mencionan los principales pasos utilizados en el diseño de la geometría:

- Definir diseño
- Realizar diseño en el software Autocad
- Asignar dimensiones
- Exportar archivo en extensión dxf
- Importar archivo en software Elphy Quantum
- Realizar ajustes si es necesario

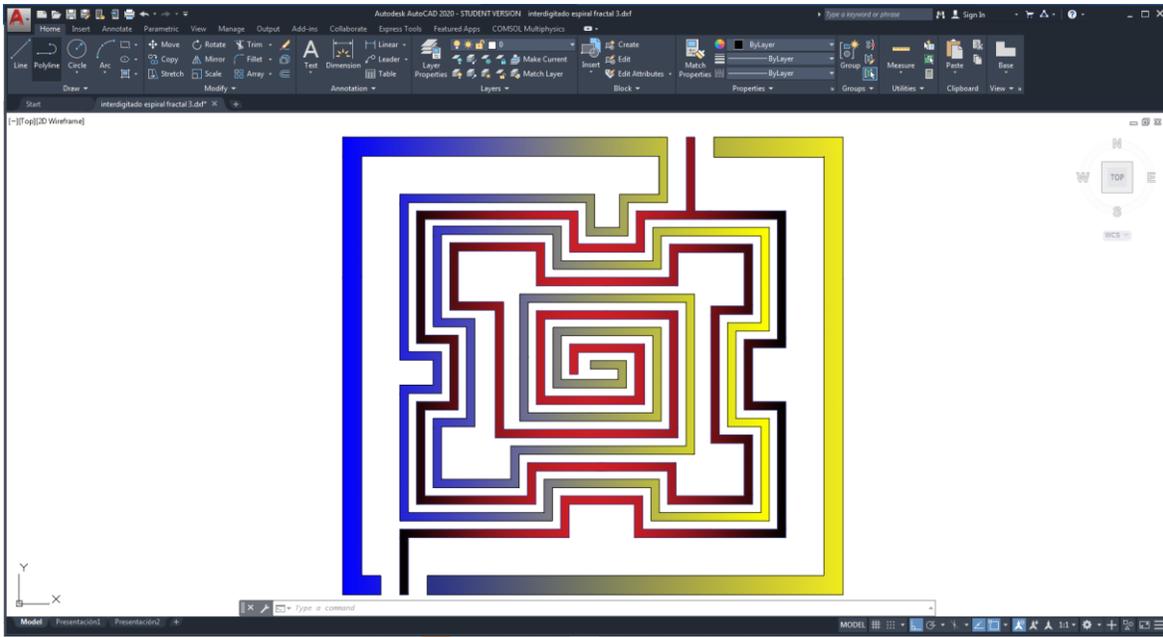


Figura 3.5 Diseño de geometría en autocad, (micro capacitor espiral).

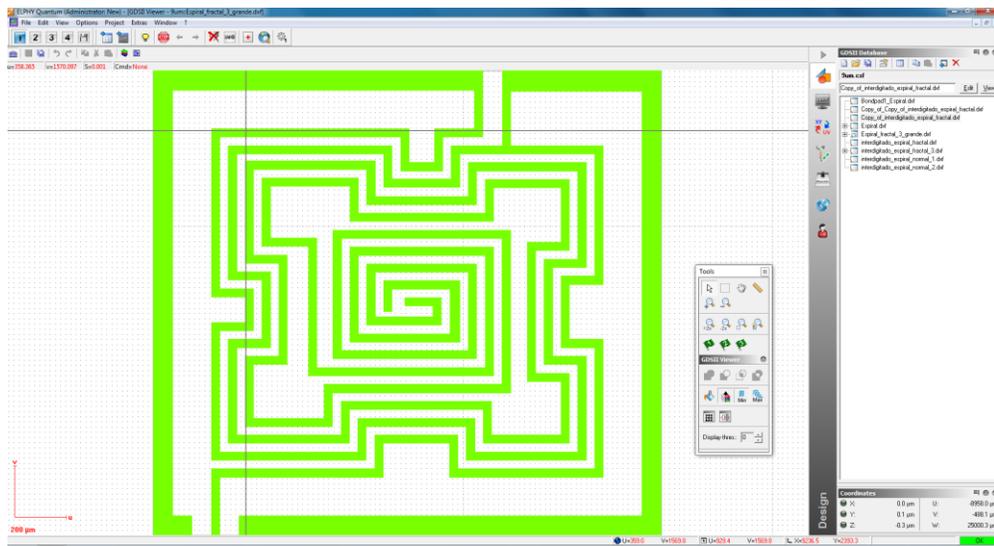
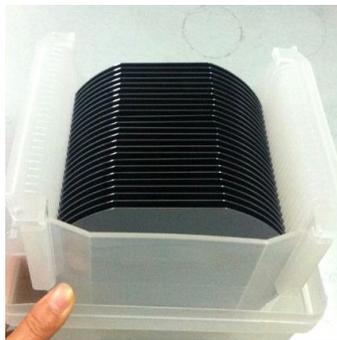


Figura 3.6 Diseño de geometría en Elphy Quantum, (micro capacitor espiral).

3.2 Limpieza del sustrato

Para el proceso de fabricación de micro y nanoestructuras es muy importante tener un procedimiento adecuado desde un inicio, principalmente contar con medidas de limpieza y seguridad, por lo tanto, esta etapa de fabricación se considera de las más importantes ya que el sustrato es el elemento sobre el cual fabricamos nuestras estructuras y cualquier impureza o contaminación afecta nuestro proceso de fabricación.

Para realizar la limpieza del sustrato se utilizó guantes para no contaminar y protegernos de los químicos utilizados para la limpieza, los pasos básicos que seguimos son: bañar con acetona el sustrato, después alcohol isopropílico y por último agua desionizada, se recomienda que en cada baño se realice un secado con nitrógeno para remover las gotas que pudieran dejar residuos.



SiO₂

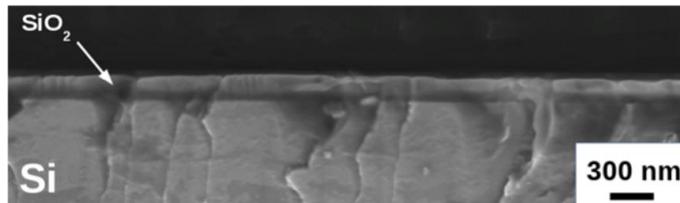
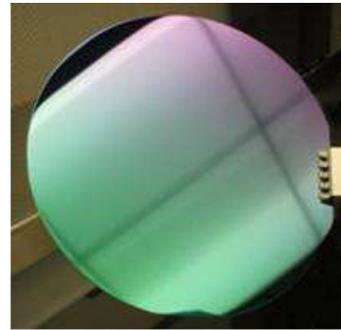


Figura 3.7 Principal sustrato sobre el cual se grabaron nuestras estructuras. Una capa inferior de silicio de 500 micras aproximadamente y otra capa superior de dióxido de silicio de 300 nanómetros.



Figura 3.8 Principales elementos para realizar la limpieza del sustrato.

3.3 Deposición de resina

Para realizar la deposición de resina es necesario utilizar un procedimiento que asegure que nuestra capa de resina tiene el espesor adecuado de acuerdo con nuestras necesidades. Anteriormente mencionamos que la resina utilizada para nuestro proceso es PMMA 950 A4, el proveedor de dicha resina proporciona las metodologías a seguir para obtener los espesores de películas delgadas, una de las técnicas más recomendadas y utilizadas es la deposición por “spin coating” o recubrimiento por rotación.

El método consiste en colocar la cantidad de resina adecuada sobre el sustrato, debe ser colocada en el centro para que el esparcimiento sea lo más homogéneo posible en toda la superficie. El equipo utilizado para la deposición de resina es el spin coater de la serie 6800 SCS, se muestra en la figura 3.9 - 3).

A continuación, se describen los principales pasos que se siguieron para realizar la deposición de la resina:

- 1) La resina PMMA A4 es un polimetacrilato de metilo, se debe tener mucho cuidado al utilizar y almacenar este material, ya que es sensible a la luz UV y también se debe almacenar a ciertas temperaturas para evitar afectar sus propiedades físicas.
- 2) Se debe tomar una cantidad de resina utilizando una micropipeta, cuidando que no se contamine la resina. La cantidad que se toma depende del tamaño del sustrato en el que se hará la deposición de resina. En nuestro proyecto

generalmente se utilizó una cantidad de 60 μl de resina la cual es suficiente para cubrir un área de 1 cm^2 de nuestro sustrato.

- 3) Se debe programar el spin coater, con los parámetros adecuados para obtener el espesor de la película deseada, los valores se programan de acuerdo con las gráficas que el proveedor de la resina recomienda, para nuestro caso mantenemos girando por 60 segundos nuestro sustrato a 2900 revoluciones por minuto.
- 4) El spin coater es una máquina utilizada para la deposición de películas delgadas por centrifugado. Con este equipo hacemos girar nuestro sustrato hasta lograr el espesor de película deseado para nuestro proceso de litografía, sin embargo, debemos también tomar en cuenta las condiciones del ambiente (laboratorio), ya que la temperatura también es un factor que puede afectar el espesor, además de la viscosidad de la resina.
- 5) Ya que se realizó la deposición de resina y se logró el espesor deseado, se debe hornear la resina para lograr solidificar y obtener las propiedades adecuadas para realizar la litografía por haz de electrones. Utilizamos una placa caliente (hot plate) que utiliza una celda de Peltier para calentar la superficie, el valor de temperatura que necesitamos es de 120 $^{\circ}\text{C}$, el sustrato con resina se coloca por 5 minutos sobre la superficie de la placa caliente. Después de esos 5 minutos ya tenemos lista nuestra deposición de resina para pasar al siguiente proceso de grabado utilizando el equipo de litografía de haz de electrones y el software Elphy Quantum.



Figura 3.9 Principales elementos para realizar la deposición de resina.

3.4 Grabado de patrones por litografía de haz de electrones

Anteriormente mencionamos que la litografía por haz de electrones (EBL) es una técnica especializada para la creación de patrones que llegan a tener tamaños de micrómetros hasta nanómetros. Consiste en hacer incidir un haz de electrones a través de una superficie cubierta con una película de resina sensible a esos electrones, por lo que la energía genera en la película de resina el patrón deseado, sin embargo, el equipo EBL necesita un software que controle el hardware, dicho software es Elphy Quantum (figura 3.10), en esta plataforma se cuenta con un apartado para llevar a cabo el proceso de diseño y asignación de parámetros para el grabado de los patrones. En este apartado configuramos las coordenadas globales y locales, así como la calibración del amperaje necesario, ya que de este último dependen la velocidad de grabado, el tamaño del spot y la dosis con la cual se grabaron los patrones.

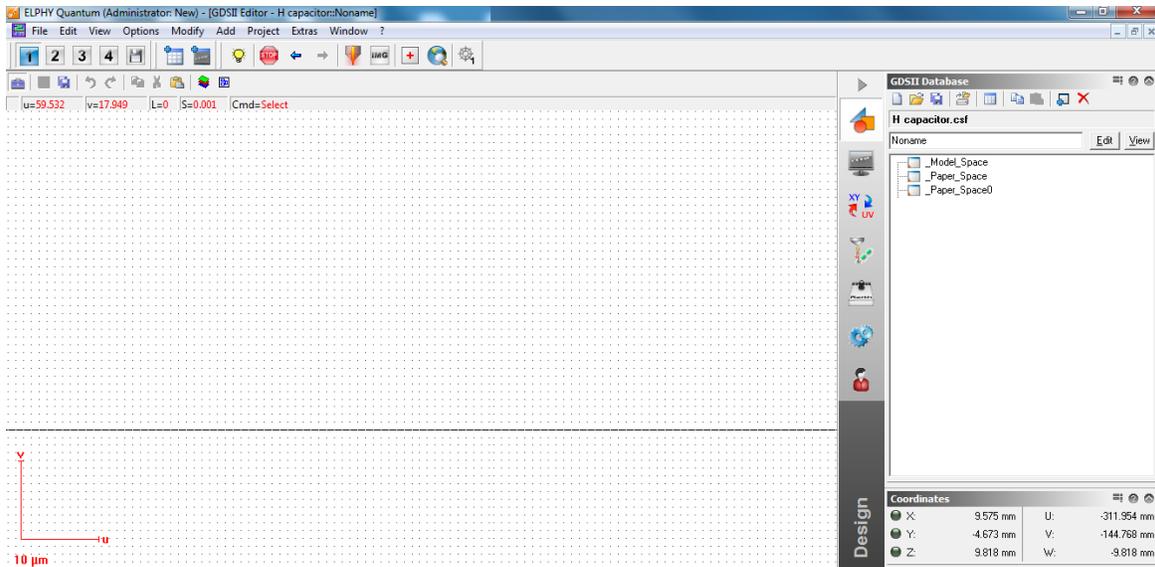


Figura 3.10 Pantalla principal de Elphy Quantum

Las coordenadas globales son las coordenadas que nos sirven de referencia y las cuales podemos ubicar en la muestra llamada CHESSY que es la muestra que otorga la compañía Raith y la cual tiene la semejanza a un tablero de ajedrez. En el chessy fijaremos un punto origen y otros dos puntos a la izquierda y derecha de la muestra figura 3.11 y presionamos el botón de “adjust”. A continuación, nos trasladamos a la muestra que deseamos grabar para ubicar el origen (Cualquier punto de la muestra) y localizamos la esquina izquierda y derecha para posteriormente ajustar figura 3.12.

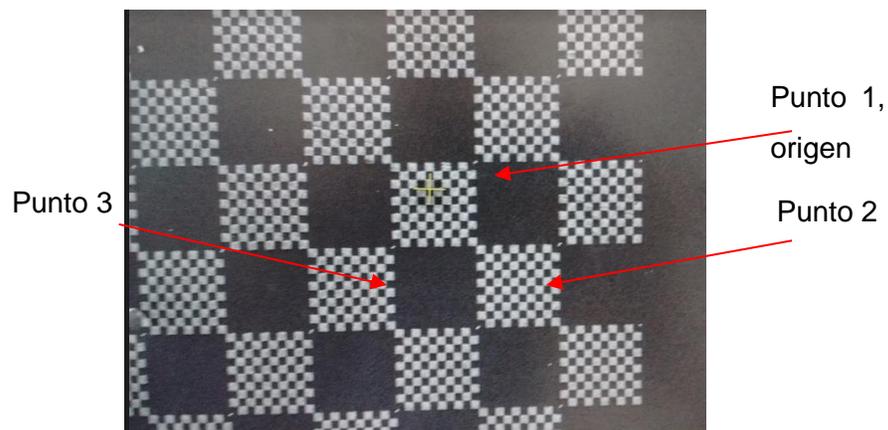


Figura 3.11 Chessy map



Figura 3.12 Ubicaciones de los puntos para establecer las coordenadas locales en la muestra.

3.4.1 Ajuste de la corriente

Para ajustar la corriente es necesario encontrar la FARADAY CUP la cual nos indica dependiendo el spot y el voltaje. Para encontrar la Faraday cup es necesario presionar el botón STAGE CONTROL, seleccionar la posición FARADAY CUP y presionar GO, figura 3.13. Ya que estamos en dicha posición es necesario colocar el cursor en el centro de la circunferencia y aumentar la magnificación hasta 3000x es decir que la circunferencia cubra toda la pantalla. Tomamos lectura del pico-amperímetro.

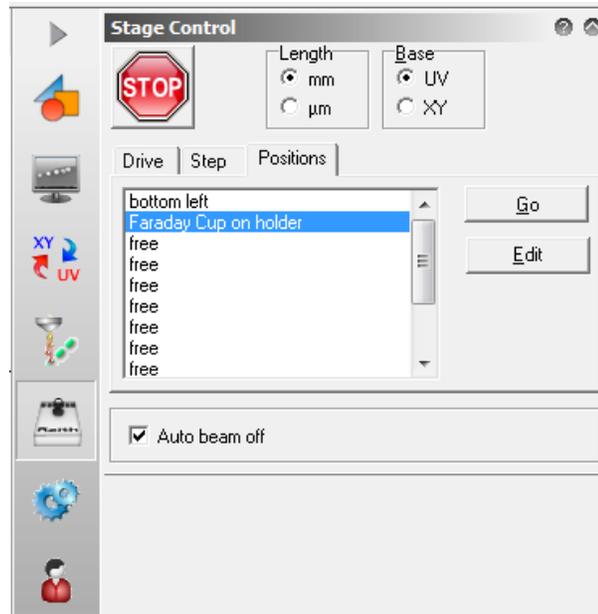


Figura 3.13 Panel de la estación de control

Posteriormente presionamos el botón PATERNING PARAMETER para ajustar los apartados de Areas, Curved Elements, Lines y Dots de acuerdo con el diseño que vamos a realizar figura 3.14. Dentro de estos apartados los parámetros independientes son el Area Dose y Beam Current este último dato lo obtenemos del pico-amperímetro. Ya que ajustamos todos los parámetros dependientes finalizamos esta sección presionando OK.

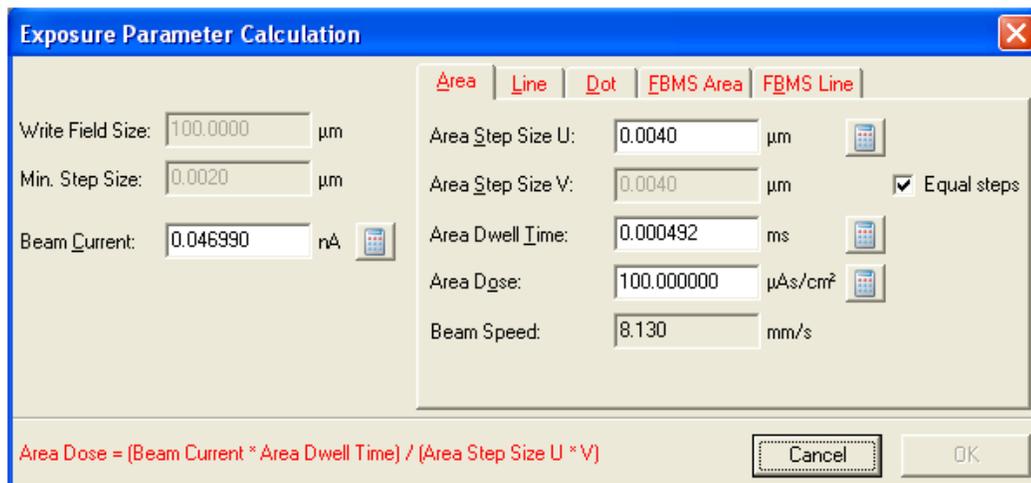


Figura 3.14 Pantalla de los parámetros de grabado

3.4.2 Ajuste del Campo de Escritura (WF)

Para llegar a esta sección es necesario presionar el botón de WriteField Control figura 3.15 en donde se desplegarán una serie de campos de escritura con su magnificación y para saber cuál es el adecuado es necesario saber el tamaño del dispositivo a realizar. Después de escoger el campo de escritura se presiona el botón de la figura 3.15 - b). Al finalizar se le indica que vaya al origen de las coordenadas locales.

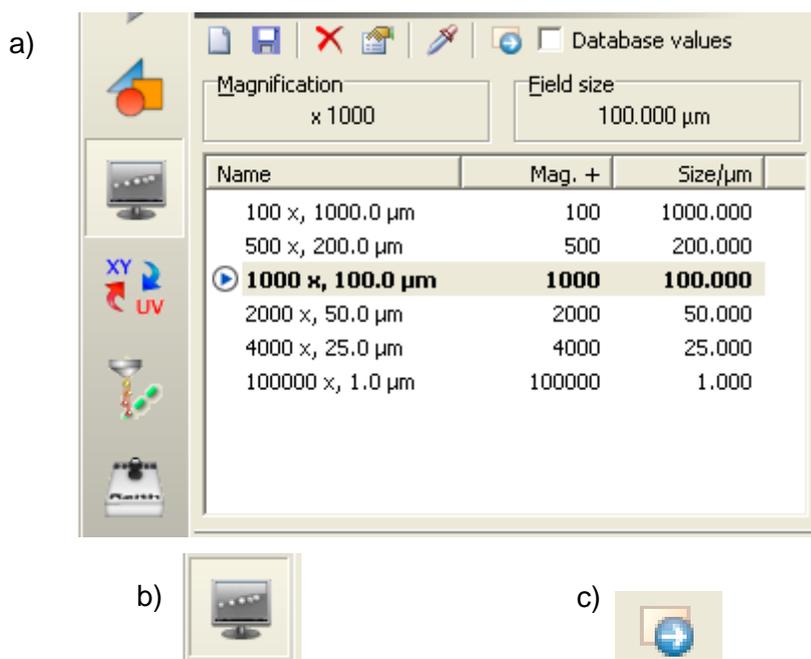


Figura 3.15 Pantalla para selección de magnificación y tamaño del campo de escritura

3.4.3 Grabado

Para comenzar el grabado se le da click en el botón “patterning”. Después de cierto tiempo el equipo finaliza la exposición al haz de electrones y ahora podemos sacar la muestra de la cámara del microscopio electrónico de barrido, para continuar con el proceso de revelado.

3.5 Proceso de revelado

El proceso de revelado se refiere a introducir la muestra con el patrón grabado en las soluciones químicas llamadas “developer” o revelador y “stopper”. La solución “developer” es una mezcla de metil isobutil cetona (MIBK) con alcohol isopropílico (IPA) en una proporción de 1:3 y el “stopper” es alcohol isopropílico figura x.

Se debe introducir la muestra primero en el developer, el tiempo depende de los parámetros de grabado, pero en promedio se deja por 90 segundos sumergida la muestra en el developer. Al introducir la muestra en el developer se genera un efecto químico que afecta los enlaces de doble ligadura de carbono ($C=C$) de la resina PMMA. Dichos enlaces anteriormente fueron afectados por el haz de electrones, para neutralizar este efecto químico se sumerge la muestra en alcohol isopropílico (IPA) por 90 segundos figura 3.16.



Figura 3.16 Sustancias para el proceso de revelado

Deposición de metal

Una de las etapas más importantes es la deposición del material de nuestras estructuras, generalmente utilizamos metales. El procedimiento que se utilizó fue por sputtering o pulverización catódica, esta técnica se refiere a un proceso de deposición basado en el plasma en el que los iones energéticos son acelerados hacia un objetivo. Los iones golpean el objetivo y los átomos son expulsados de la superficie. Estos átomos viajan hacia el sustrato y se incorporan a la película en crecimiento.

Si una superficie es bombardeada con partículas energéticas como iones acelerados, es posible causar expulsión de los átomos de la superficie de un material, un proceso conocido como sputtering o pulverización catódica. Estos átomos eyectados pueden ser condensados en un substrato para formar una película delgada. En la mayoría de los casos, los iones positivos de gases neutrales pesados como argón se usan para bombardear la superficie de materiales. Los materiales de alto punto de fusión pueden ser usados tan fácilmente como unos de bajo punto de fusión, y empleando fuentes de RF o DC la pulverización catódica de ambos materiales puede ser lograda y tanto metales como aislantes pueden ser depositados.

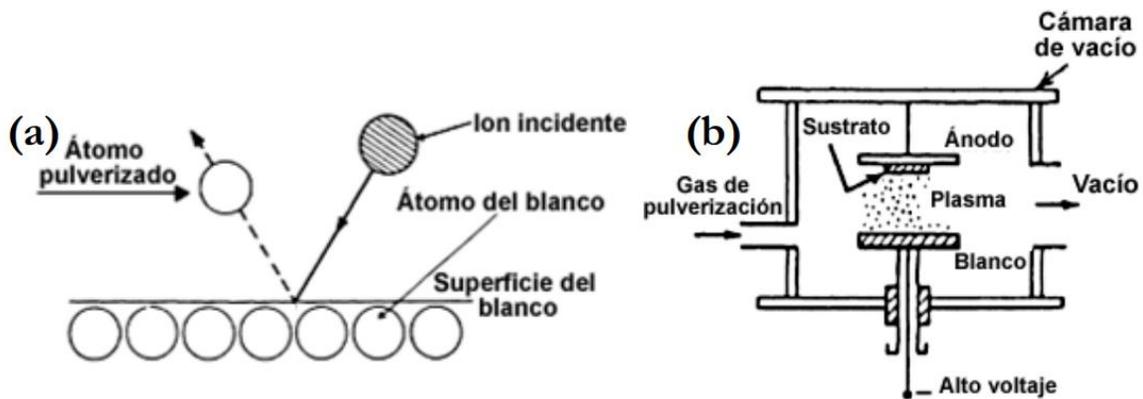


Figura 3.17 Esquema del proceso de deposición de material mediante pulverización catódica [32]

Se fundamenta en tener una cámara de vacío, la cual cuenta en su interior con dos electrodos el ánodo y el cátodo, una descarga eléctrica es establecida entre el ánodo y el cátodo en un ambiente de baja presión controlada por el suministró de un gas residual, como se muestra en la figura 3.17. Por efecto de la diferencia de potencial los átomos del gas residual se ionizan. Los iones del gas residual chocan con el cátodo, en el cual es colocado el blanco o una tarjeta de un determinado material que es desintegrado por las moléculas ionizadas. Los átomos expulsados del blanco forman una nube que se deposita en las superficies circundantes. Este fenómeno es llamado sputtering catódico.

Los átomos del material desintegrado o erosionado dejan la superficie del electrodo ya sea como átomos libres o en combinación química con las moléculas residuales del gas. Una cierta cantidad de los átomos liberados son condensados en superficies rodeando el cátodo mientras el resto es devuelto al cátodo por la colisión con moléculas del gas.



Figura 3.18 Vista interior de la cámara de vacío del equipo de deposición de metal.

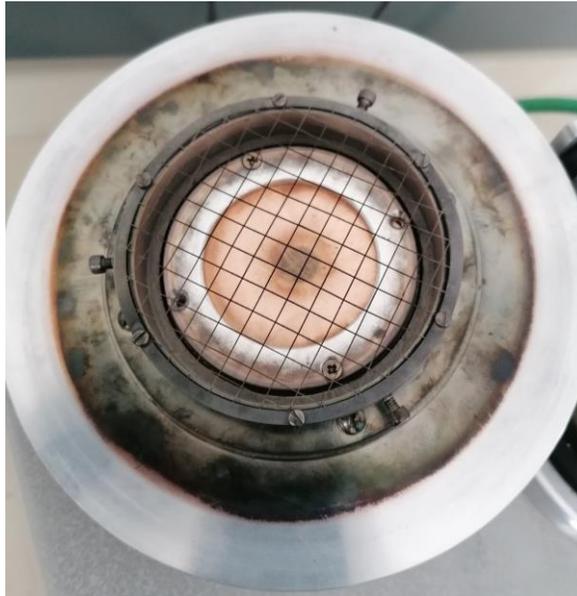


Figura 3.19 Vista del blanco de oro

Una vez expulsados los átomos del blanco viajan hasta que alcanzan una superficie cercana más notable, o el sustrato. La capa depositada es formada o crece en la estructura del sustrato, ésta es influenciada por algunos parámetros como la tasa de depósito, temperatura del sustrato, presión y composición del gas y composición del blanco.

El argón es un gas inerte, el cual es escogido para actuar como el medio sputtering más común, porque es un gas raro, pesado y sobre todo es abundante. También tiene un bajo potencial de ionización. La naturaleza inerte de argón inhibe compuestos a formarse en la superficie del blanco.

Si el blanco es conductivo, una fuente de corriente directa puede ser usada (DC sputtering) mientras que RF sputtering (fuente de RF) es preferido al usar un blanco de poca conducción. Esto implica que, si el blanco es un aislante en el sistema de sputtering, el proceso de neutralización da como resultado una carga positiva en la superficie del blanco.

Esta carga puede aumentar al punto que los iones (\pm) que bombardea son repelidos y el proceso que sputtering se detendrá. Para hacer el proceso continuar la polaridad del blanco debe ser puesto al revés para atraer bastantes electrones de la descarga para eliminar la superficie cargada [32].

3.6 Proceso de lift-off

En las metalizaciones realizadas con la técnica de sputtering, como sucede también con otras técnicas como la evaporación por efecto Joule o la implantación iónica, se cubre toda la superficie de la oblea. Por lo general, interesa metalizar zonas concretas (contactos, busbar, fingers, etc.). Por ello, tras la metalización habrá que eliminar el metal depositado no deseado.

Otra técnica es la conocida como lift off, en la que la litografía se hace antes de la metalización, y tras ésta, se elimina toda la resina de la oblea; y con ella, el material depositado sobre la misma.

En esta técnica se sumerge la muestra en acetona para remover las zonas donde se tiene resina PMMA y exceso de metal que se encuentre adherido a dicha resina.

El tiempo puede variar, pero generalmente se recomienda 60 minutos o más tiempo.

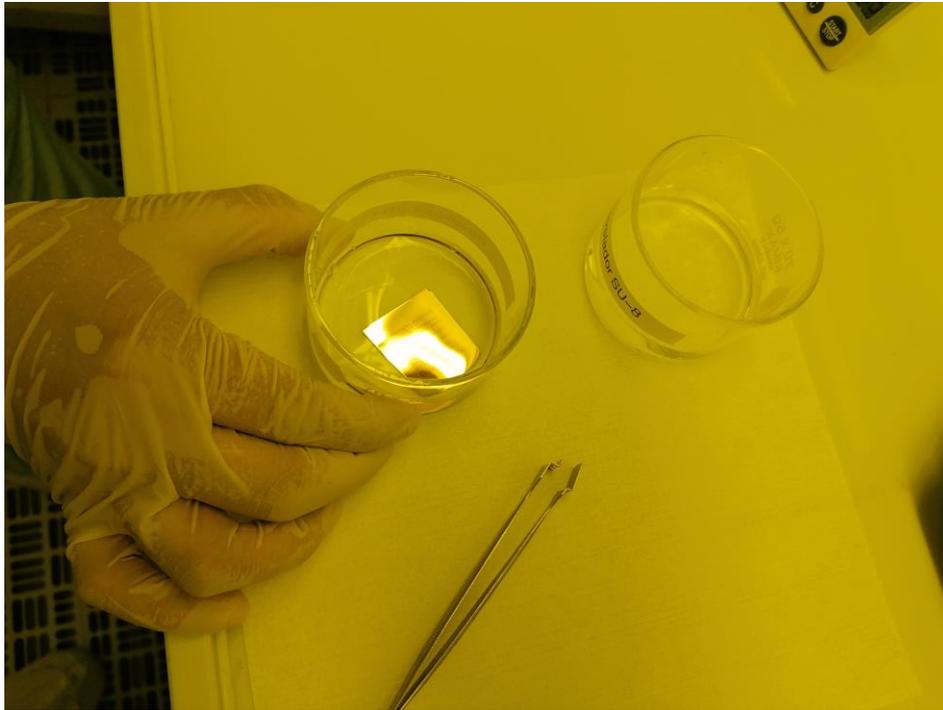


Figura 3.20 Muestra sumergida en acetona (Lift-off).

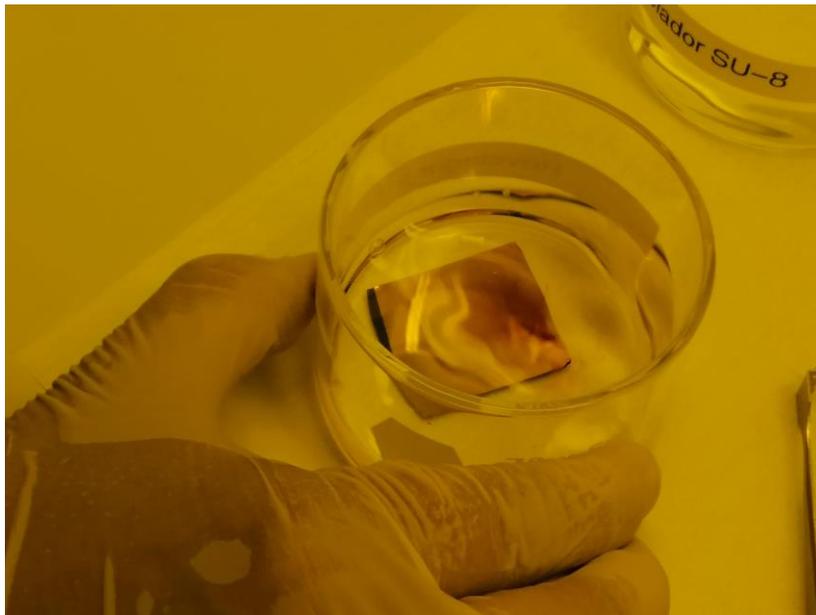


Figura 3.21 Muestra sumergida en acetona (segundo proceso de lift-off).

3.7 Limpieza y secado de muestra con patrones metalizados

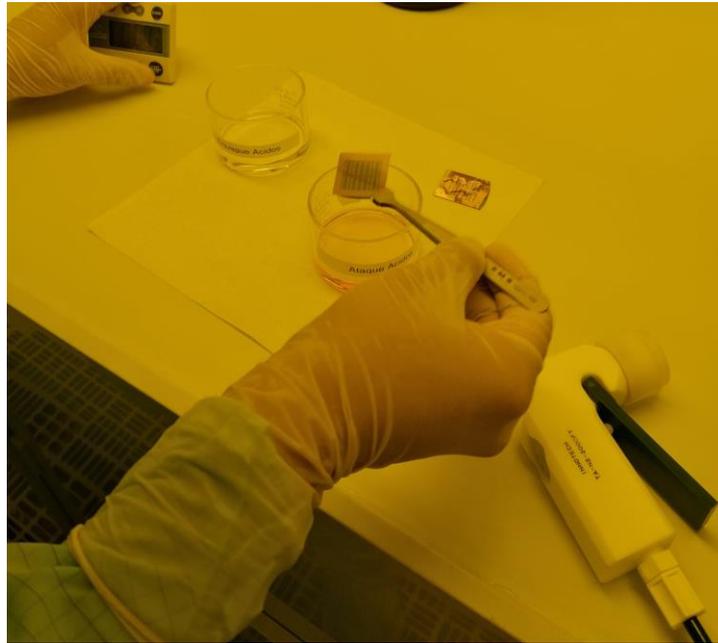


Figura 3.22 Proceso de limpieza, secado con nitrógeno.

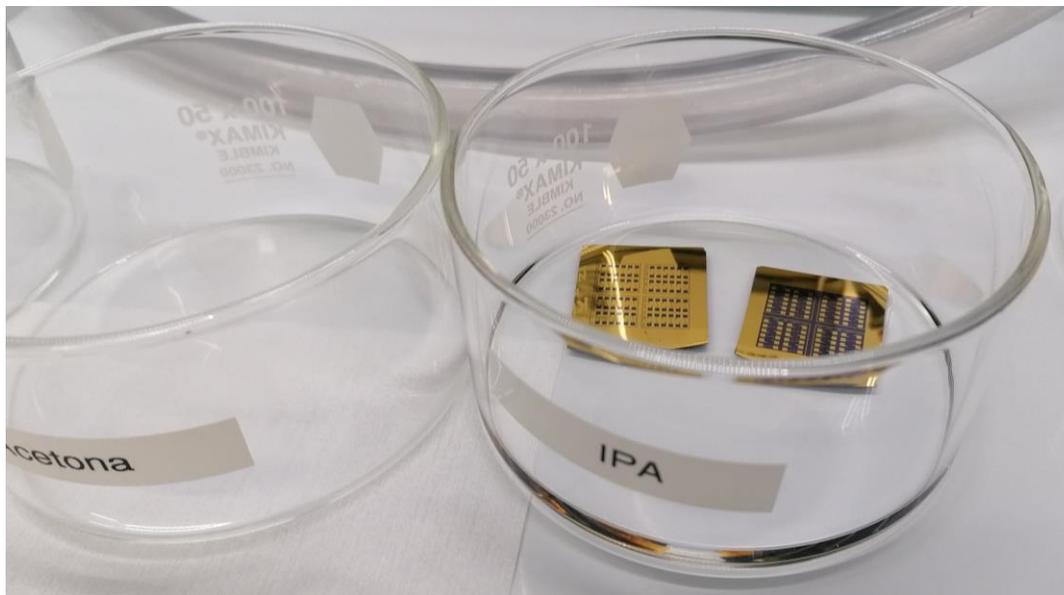


Figura 3.23 Limpieza con alcohol isopropílico.

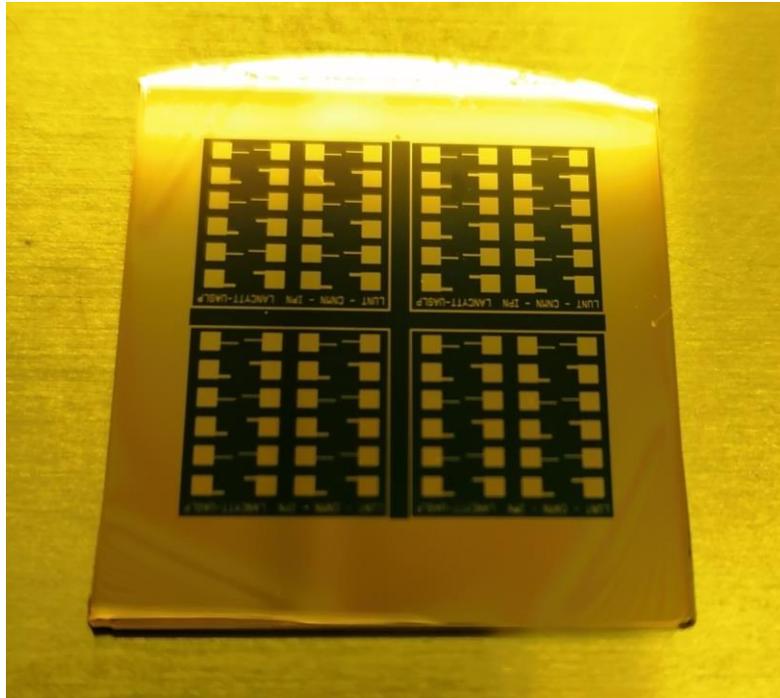


Figura 3.24 Resultado final (muestra después de lift-off y limpieza).

Capítulo 4

4. Efecto térmico de los substratos en micro y nanoestructuras

(Este trabajo se publicó en la revista: *Infrared Physics and Technology* con un factor de impacto de 2.3, para más detalles ver el apartado de anexos).

Introducción

El aprovechamiento de radiación térmica y electromagnética ha ganado atención durante las últimas décadas en diferentes áreas, tales como: dispositivos optoelectrónicos, nanogeneradores, termoeléctricos [33,34]. Por ejemplo, aplicaciones de aprovechamiento de energía térmica desperdiciada, que a su vez es convertida en corriente eléctrica útil. Varios estudios han mostrado que la respuesta de disipación térmica depende de diferentes parámetros tales como: temperatura, material del substrato, morfología y las dimensiones.

Recientemente, algunos reportes se han enfocado en problemas de transferencia de calor que aparecen debido al desempeño térmico de los materiales del substrato [35–37]. Una de las propuestas que se han reportado en la literatura para aprovechamiento de energía térmica son las llamadas nanoantenas termoeléctricas o también se les conoce como nanoantenas Seebeck (captan energía de las ondas infrarrojas que se propagan libremente, convirtiéndolas en corriente inducida), han sido utilizadas exitosamente como cosechadores de energía debido a que son sintonizables y su posibilidad de coleccionar las longitudes de onda del espectro solar, también pueden convertir energía térmica desecho en electricidad a través del efecto Seebeck [38].

Actualmente, esfuerzos teóricos y experimentales en aplicaciones termoeléctricas han contribuido a mejorar y lograr altas eficiencias usando diferentes geometrías, materiales y substratos [39,40]. En efecto, una mejora en la eficiencia de los dispositivos termoeléctricos podría ser lograr un incremento en sus propiedades de aislante térmico. Por ejemplo, Szakmany y colegas han propuesto nano-dispositivos fabricados en substratos de silicio

con una capa de dióxido de silicio (SiO_2) para el estudio de aislamiento térmico y eléctrico. De hecho, ellos han mostrado que una capa de (SiO_2) actúa como un aislante térmico permitiendo a las estructuras lograr gradientes de temperatura altos [41–44]. Por lo tanto, el uso de polímeros ha sido propuesto para mejorar el aislamiento térmico de los dispositivos termoeléctricos, uno de los materiales que tiene propiedades interesantes es la poliimida, dicho material tiene las ventajas, cuando es usado como sustrato, de ser, flexible, peso ligero, resistente a altas temperaturas y un coeficiente de expansión térmica bajo, entre otras características [45–48].

Es ampliamente sabido que los estudios de impedancia térmica requieren el uso de teoría de transferencia de calor incluyendo: conducción, radiación, convección y la impedancia térmica en condiciones estacionarias. Por lo tanto, para describir la física envuelta en el fenómeno de transporte térmico, es necesario considerar como afecta la geometría, la disipación de potencia y el tiempo a la distribución de temperatura.

En este capítulo se reporta el estudio de la impedancia térmica de nanoarreglos con dipolos fabricados en sustratos flexible (poliimida) y en sustrato duro (silicio con una capa de 300 nm de SiO_2). El estudio incluye: experimentos térmicos utilizando una cámara térmica (Optotherm EL Infravision 320), también se usó simulación numérica (software COMSOL Multiphysics) para analizar la impedancia térmica en estado estacionario asociada al dispositivo termoeléctrico. Los resultados muestran que la poliimida podría ser un sustrato con mejor respuesta térmica para aplicaciones de aprovechamiento de energía térmica en contraparte con los dispositivos fabricados en sustrato de SiO_2 .

4.1 Concepto de impedancia térmica

La impedancia térmica la podemos definir como la temperatura ΔT que alcanza la unión (disipador y la fuente de calor) y dividida por la potencia P disipada en la misma unión, asumiendo que la temperatura del aire del ambiente tiene una temperatura de referencia. En otras palabras, T denota la temperatura relativa en llegar la fuente de calor a la temperatura ambiente.

La impedancia térmica la podemos calcular con la siguiente ecuación:

$$Z_{th} = \frac{\Delta T}{P} \quad (4.1)$$

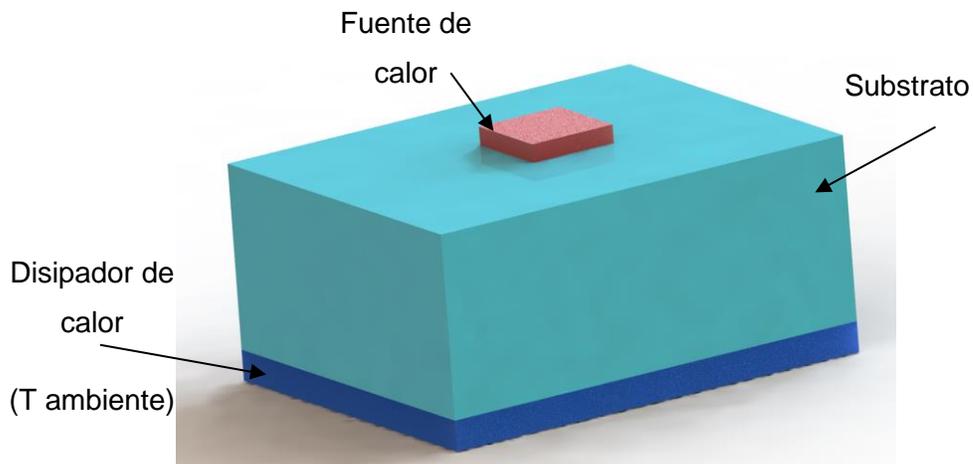


Figura 4.1 Esquema representativo del arreglo para obtener la impedancia térmica.

4.2 Fabricación y análisis elemental

Las nanoestructuras térmicas, fueron modeladas como un simple nanoarreglo de dipolos, fueron fabricados por litografía de haz de electrones sobre dos diferentes sustratos: uno es una oblea de silicio con una capa de SiO_2 con espesor de 300 nm, el otro es sobre una capa de poliimida. Los nanoarreglos fueron grabados usando el equipo: SEM por sus siglas en inglés, Scanning Electron Microscope, modelo "FEI INSPECT F50", el cual posee un cañón de emisión de campo (FEG), también se utilizó un sistema de nano fabricación Raith Elphy Quantum software. El procedimiento para realizar la fabricación de los nanoarreglos puede revisarse con más detalle en el capítulo 3 de esta tesis y en la referencia [49].

Después del proceso de lift-off, un nanoarreglo de 1×5 elementos es finalmente fabricado, son nanoantenas dipolo conectadas en serie, tal como se muestra en la figura 4.2.

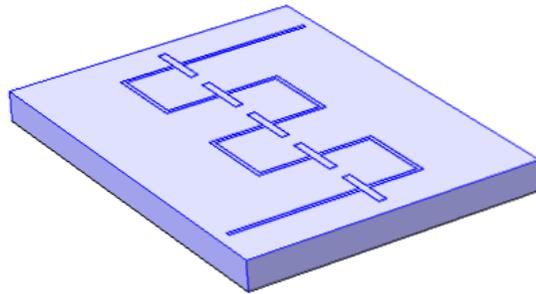


Figura 4.2 Esquemático de la representación del arreglo de dipolos en un substrato.

La antena dipolo tiene una longitud de $125 \mu\text{m}$, de ancho $20 \mu\text{m}$ y de espesor 50nm .

La pista que interconecta las nanoantenas dipolo tiene un ancho de $10 \mu\text{m}$ y el mismo espesor que el dipolo.

Se fabricaron varios nanoarreglos, con la finalidad de realizar pruebas de repetibilidad y reproducibilidad, en la figura 4.3 se puede observar las micrografías del arreglo de dipolos y sus dimensiones reales. El material que se depositó fue oro (Au), utilizando el proceso de sputtering, para más detalles revisar el capítulo 3 de esta tesis.

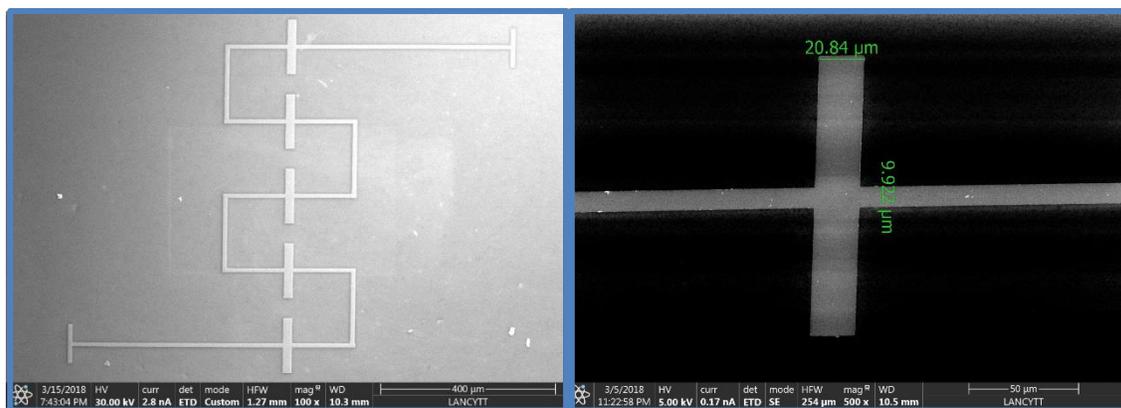


Figura 4.3 Microscopia electrónica de barrido del nanoarreglo de dipolos interconectados en serie.

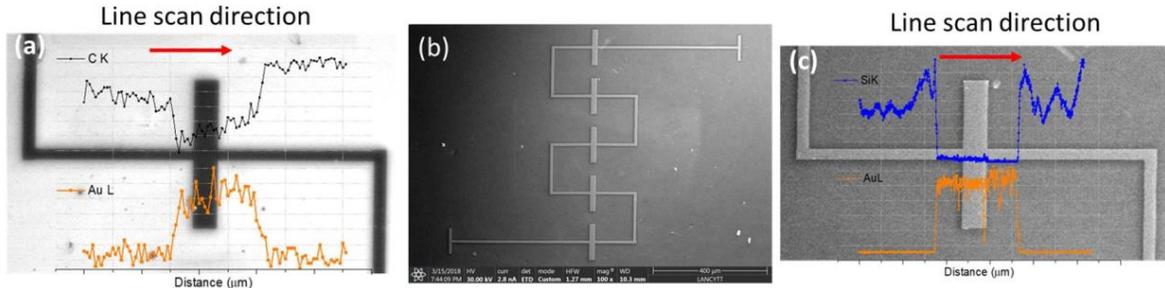


Figura 4.4 La imagen del nanoarreglo fue adquirida con el microscopio Helios G4 CX, (a) Análisis EDXS a lo largo del elemento dipolo sobre un sustrato de poliimida. (b) Micrografía del nanoarreglo. (c) Análisis EDXS a lo largo del elemento dipolo sobre un sustrato de silicio.

Un análisis elemental fue realizado a lo largo del dipolo en el nanoarreglo permitiendo la sobreposición entre el arreglo de dipolos y la línea de escaneo EDXS para ambos sustratos. En la figura 4.4 (a) y (c) podemos observar un incremento de la señal de oro (línea naranja), el escaneo corre del sustrato de poliimida a través del elemento dipolo (flecha roja sobre el camino de escaneo).

4.3 Análisis térmico

El estudio térmico de los nanoarreglos fue realizado usando una cámara de imagen térmica (Optotherm EL InfraSight 320) con una resolución espacial de $5 \mu\text{m}/\text{pixel}$ y una diferencia equivalente a ruido (NETD) de $0.15 \text{ }^\circ\text{C}$.



Figura 4.5 Cámara infrarroja, (Optotherm EL InfraSight 320) con una resolución espacial de $5 \mu\text{m}/\text{pixel}$.

Un voltaje de corriente directa fue aplicado entre las terminales del nanoarreglo, para producir un calentamiento en los dipolos por efecto Joule (una ilustración del experimento se puede observar en la figura 4.5. Antes de aplicar el voltaje, el sistema que contiene el nanoarreglo se ajusta en estado estacionario, después de un tiempo el arreglo llega a la temperatura deseada, es el tiempo suficiente, para que el arreglo de dipolos se caliente de manera uniforme.

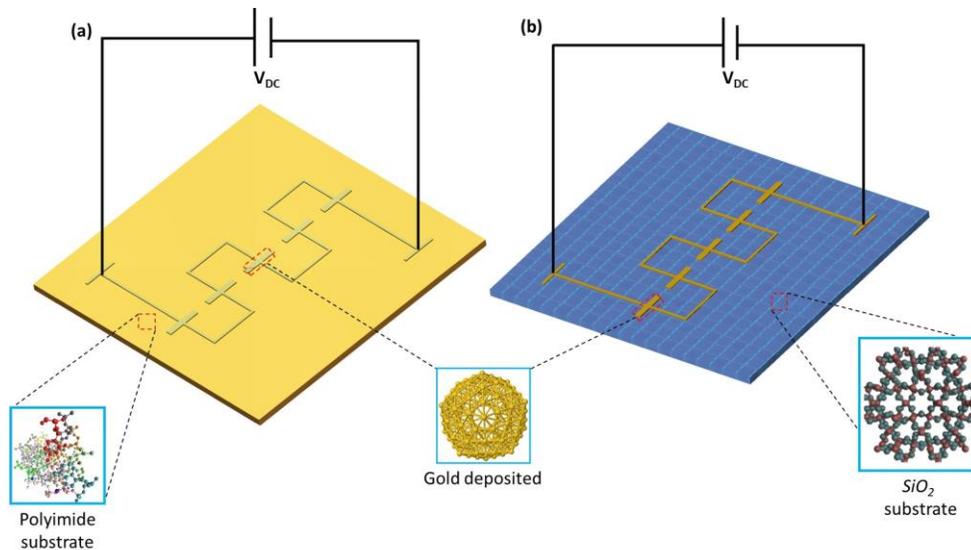


Figura 4.6 Representación del nanoarreglo de dipolos en los dos diferentes substratos. (a) Poliimida, (b) SiO_2 . Los recuadros-inserciones representan la nanoestructura orgánica (poliimida) y la estructura cristalina (SiO_2) respectivamente en los substratos. Y el recuadro del centro representa la nanoestructura metálica de oro depositada durante el proceso de sputtering.



Figura 4.7 Muestra con nanoarreglos de dipolos sometida a mediciones de temperatura con la cámara infrarroja y mediciones de resistencia eléctrica.

Varias muestras se fabricaron y se realizaron mediciones repetidamente, con la finalidad de estabilizar el sistema y tener mediciones confiables, uno de los parámetros importantes

en las mediciones es el valor de la emisividad del material a medir con la cámara infrarroja, los valores de emisividad utilizados en las mediciones fueron obtenidos experimentalmente utilizando un material de referencia. Dando como resultado una emisividad para el oro de 0.73, para el SiO_2 de 0.78 y para la poliimida de 0.95.

En la figura 4.8 (a) se muestra la distribución de temperatura alrededor de un elemento dipolo del nanoarreglo fabricado sobre el substrato polimérico (poliimida), lo cual coincide perfectamente con los resultados de las simulaciones térmicas (ver inserción-figura 4.8(a), se discutirá con mayor detalle más adelante). Se puede observar que la disipación de potencia térmica que ocurre en el dipolo del nanoarreglo es más eficiente en la poliimida que en su contraparte (substrato de SiO_2) ver figura 4.8 (b), donde la disipación ocurre a lo largo del substrato y esto se puede observar en los resultados experimentales y de simulación (ver figura 4.8 (b)).

Por lo tanto, para tener una medición de la ganancia en cuestión de potencia térmica disipada para ambas configuraciones (poliimida y SiO_2), se calculó la impedancia térmica, la cual en condiciones de estado estacionario está dada por la ecuación $Z_{th} = \frac{\Delta T}{P}$ [50].

Es esta ecuación, $\Delta T = (T_2 - T_1)$ representa el incremento de temperatura con respecto al punto de referencia (ver el círculo punteado en la figura 4.8 (a-b)), P es la potencia eléctrica disipada por el circuito y es calculada de la resistencia eléctrica y el voltaje medido directamente en el nanoarreglo. La figura 4.8 (a-b) muestra las temperaturas marcadas como T_2 para $t_{2 \gg 0}$, con T_1 como la temperatura de referencia $T_1=60^\circ\text{C}$. De los resultados de la imagen térmica, la impedancia térmica fue calculada considerando T_1 y T_2 como se muestra en la tabla 4.1.

	Poliimida	SiO₂
T₁ (°C)-Bias (t=0, T=60)	66.1	62.8
T₂ (°C) – Medidas (t>>0)	89.8	63.9
Z_{th} (K/W)	292.2	13.5

Tabla 4-1 Impedancia térmica obtenida experimentalmente para substratos de poliimida y SiO_2 .

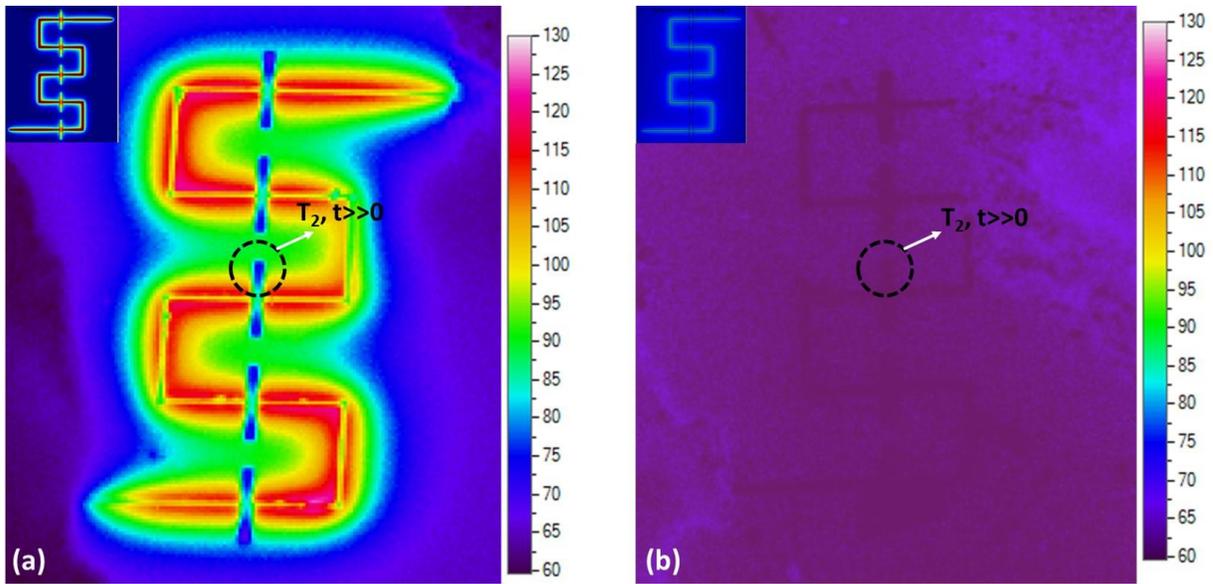


Figura 4.8 Distribución de la temperatura a lo largo del nanoarreglo de dipolos fabricado en: (a) Poliimida y (b) Dióxido de silicio. El círculo punteado en (a) y en (b) indica el punto medido de gradiente de temperatura usado para el cálculo de la impedancia térmica mostrada en la tabla 4.1.

De las mediciones de impedancia térmica, es posible definir un desempeño térmico que corresponde a un 95%, el cual es obtenido de la siguiente forma:

$$\eta = \left(1 - \frac{Z_{th}(SiO_2)}{Z_{th}(poliimida)}\right) \times 100 \quad (4.2)$$

De la tabla 4.1 se puede deducir que el nanoarreglo fabricado en el sustrato de poliimida muestra una alta impedancia térmica Z_{th} a diferencia del sustrato de SiO_2 . Se llega a la conclusión, que en el sustrato de poliimida se disipa de mejor manera la potencia en el arreglo de dipolos y no en el sustrato. Adicionalmente, se presenta la gráfica del perfil de temperatura a lo largo de un dipolo mediante una línea de análisis, para obtener el gradiente de temperatura a lo largo del elemento activo en el nanoarreglo (figura 4.9). El perfil de temperatura está asociado con la longitud (μm) que atraviesa con una línea al dipolo, el cual es referido como longitud de arco de la antena (*arc length antenna*). La figura 4.9 (a-b) muestra los perfiles de temperatura obtenidos experimentalmente y teóricos para

los substratos de poliimida y dióxido de silicio respectivamente. De los datos se puede observar que la poliimida exhibe mayor disipación térmica a lo largo del dipolo en el nanoarreglo en comparación con la baja disipación térmica ocurrida en el dipolo sobre el substrato de dióxido de silicio.

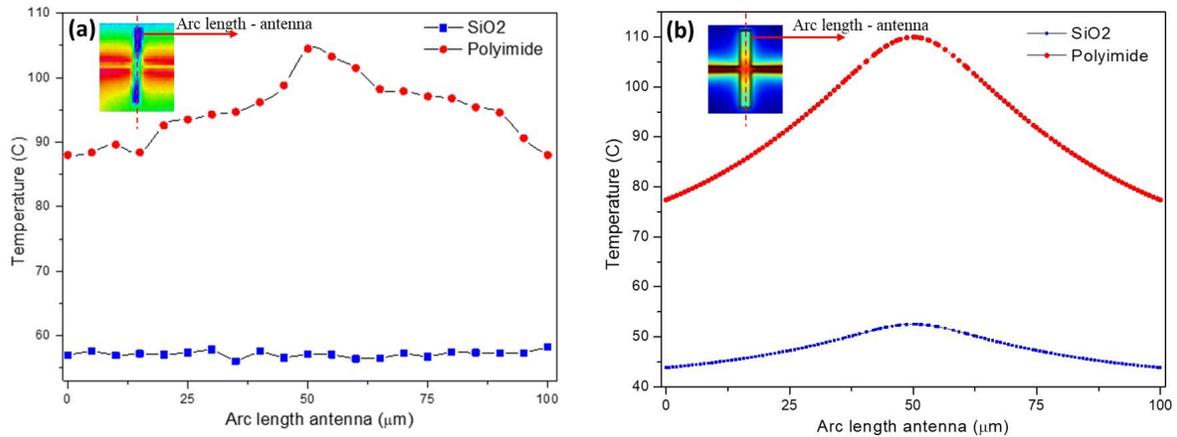


Figura 4.9 Perfil de temperatura a lo largo de una línea que atraviesa un dipolo del nanoarreglo fabricado sobre los dos diferentes substratos. (a)-(b) Mediciones experimentales y teóricas de la longitud de arco a lo largo del dipolo respectivamente.

Los estudios teóricos del nanoarreglo de dipolos en los dos diferentes substratos fue llevada a cabo utilizando el método de elemento finito mediante el software COMSOL Multiphysics. Para la simulación numérica el conjunto de arreglos tiene dimensiones de $800 \times 650 \mu\text{m}$ (figura 4.10 (a) and (b)).

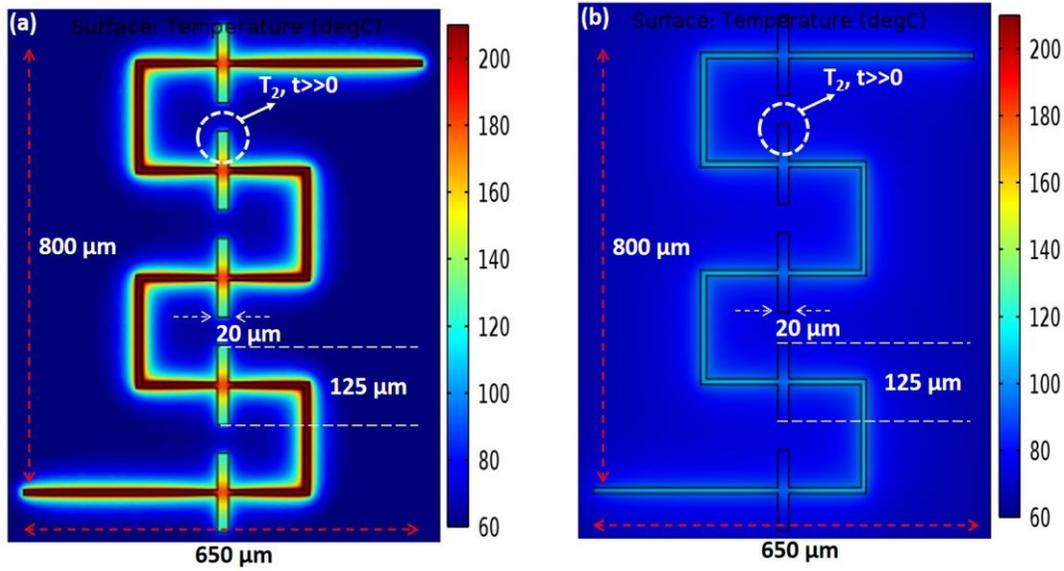


Figura 4.10 Distribución de la temperatura para: (a) sustrato de poliimida y (b) sustrato de dióxido de silicio.

De acuerdo con la tabla 4.2, fueron asignados dos diferentes puntos de análisis $T_1(t=0)$ y $T_2(t \gg 0)$ (ver los círculos punteados en la figura 4.10 (a-b)). Los valores teóricos de la impedancia térmica para la poliimida y para el de dióxido de silicio son obtenidos de los valores de la tabla 4.2. Los resultados claramente muestran un incremento en la impedancia térmica del sustrato de poliimida respecto al de SiO_2 . Este comportamiento puede ser explicado en términos de las propiedades físicas térmicas de los materiales. Por esta razón, se ha determinado que la poliimida posee una baja conductividad térmica debido a sus propiedades intrínsecas. Al igual que en la tabla 4.1, un 61% del desempeño térmico ha sido determinado de los cálculos teóricos usando los datos de la table 5.2.

	Poliimida	SiO_2
T_1 (°C)-Bias (t=0, T=60)	60	60
T_2 (°C) - Medidas (t>>0)	71.5	64.4
Z_{th} (K/W)	159.7	61.1

Tabla 4-2 Impedancia térmica obtenida teóricamente para sustratos de poliimida y SiO_2 .

Adicionalmente, se ha simulado la respuesta térmica del nanoarreglo de dipolos en función del espesor (figura 4.11). Específicamente, los elementos fabricados sobre el sustrato de poliimida (curva roja) muestran una impedancia térmica más alta que los fabricados en el sustrato de SiO_2 , el análisis se hizo para un rango de espesores (0.3 – 500 μm). inclusive, es posible lograr una alta impedancia térmica cuando el dispositivo está completamente aislado del ambiente, reduciendo la conducción del calor a través del sustrato se puede lograr un incremento en la responsividad de dispositivos termoeléctricos [50,51]. Por lo tanto, se realizó el cálculo de las impedancias térmicas para ambos sustratos (poliimida y SiO_2), conservando la misma fuente para condiciones de estado estacionario (corriente directa). La respuesta del nanoarreglo (en sustrato de poliimida) bajo estudio térmico muestra un comportamiento cercano a un incremento lineal de la impedancia térmica con respecto a los valores del espesor de $h = 25$ hasta 500 μm . Claramente, la impedancia térmica en el sustrato de poliimida tiene una alta impedancia térmica en comparación al sustrato de SiO_2 para el mismo rango de espesores y potencia eléctrica simulada, los resultados obtenidos coinciden perfectamente con resultados previamente reportados por otros investigadores [5]. Incluso, Vermeersch B. y colegas han reportado que para valores de espesor pequeños existe un “fenómeno de transición”, el cual también es presentado en nuestros resultados. Por ejemplo, la figura 4.11 (a), muestra que, para un espesor pequeño del sustrato, está presente una pequeña disminución de alrededor de 25 μm tanto para sustratos de poliimida como de silicio. De hecho, la región lineal de ambas curvas puede ser representada con una relación de la forma $Z_{th} = R_0 + hR$. Entonces, para la curva de poliimida se obtuvo $Z_{th\text{-polyimide}} = 1324 + h*10$ [(K/W)/ μm]. Por otra parte, en el sustrato de dióxido de silicio se obtuvo $Z_{th\text{-SiO}_2} = 145 + h*1.1$ [(K/W)/ μm]. Esto permite llegar a la conclusión, que para nuestras aplicaciones el rango de impedancia térmica en la poliimida es alrededor de 10 veces mayor a la eficiencia del sustrato de dióxido de silicio.

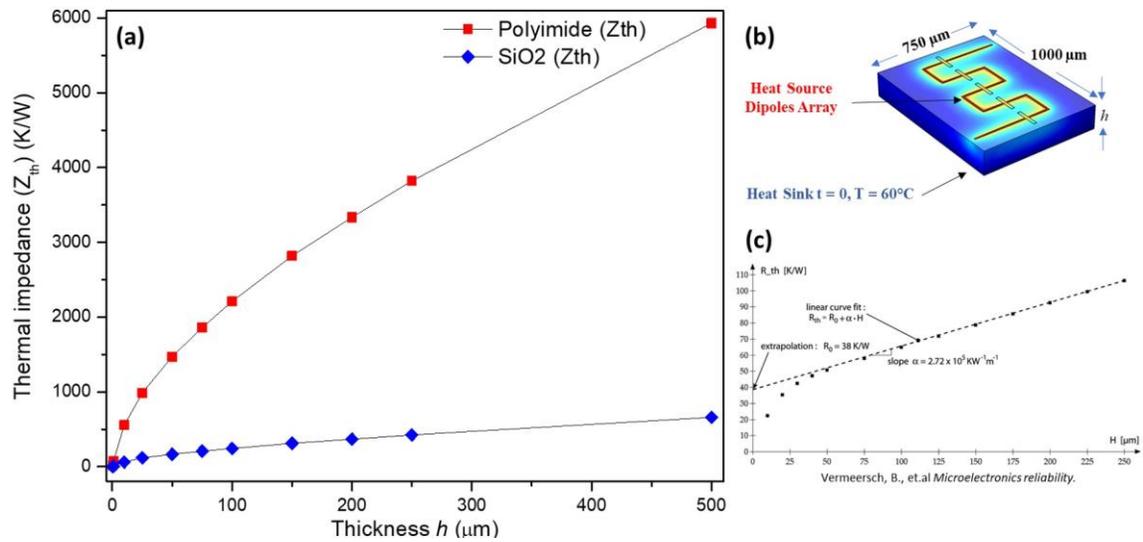


Figura 4.11 (a) Impedancia térmica simulada en función del espesor: (curva roja) poliimida, (curva azul) sustrato de dióxido de silicio. (b) El diagrama muestra la configuración del nanoarreglo de dipolos simulado bajo parámetros similares para obtener las curvas de impedancia térmica. (c) La inserción muestra los resultados de impedancia térmica previamente reportados en sustratos de silicio [37].

4.4 Discusión y conclusiones

Se realizó el estudio de la respuesta térmica de un nanoarreglo de dipolos fabricado en dos diferentes sustratos para aplicaciones de aprovechamiento de radiación térmica, el estudio fue tanto teórico como experimental. Se midió la impedancia térmica en estado estacionario para los nanoarreglos de dipolos fabricados en sustrato de poliimida y de dióxido de silicio. Las mediciones de la impedancia térmica fueron obtenidas usando una cámara infrarroja, las mediciones indican una alta impedancia para el sustrato de poliimida $Z_{th} = 292.2 \text{ (K/W)}$, en contraparte con los valores obtenidos para el sustrato de dióxido de silicio $Z_{th} = 13.5 \text{ (K/W)}$. Similarmente, las simulaciones numéricas nos permiten corroborar la alta impedancia térmica para el sustrato de poliimida y bajos valores para el sustrato de dióxido de silicio. Adicionalmente, se observó el incremento en la impedancia térmica

en función de variar el espesor del sustrato. En conclusión, los resultados experimentales y teóricos muestran que el desempeño térmico de dispositivos termoeléctricos nanoestructurados puede incrementarse usando sustratos de poliimida.

Capítulo 5

5. Diodo térmico

Introducción

Tomando en cuenta el impacto de los diodos eléctricos en la industria electrónica, también se han realizado esfuerzos en la investigación en desarrollar otros dispositivos para rectificar, controlar y transportar energía en forma de calor. Sin embargo, el control de carga eléctrica y calor nunca han sido tratados y desarrollados de manera similar. El principal problema es que es más difícil controlar el flujo de calor en un sólido que el flujo de electrones en el mismo. Esto es debido a que los principales portadores calor, los fonones a diferencia de los electrones no tienen carga y masa, por lo tanto, no pueden ser afectados por campos electromagnéticos. Se puede interpretar que la rectificación térmica (RT) es un comportamiento tipo diodo en el que la corriente de calor cambia de magnitud cuando fluye en un sentido en específico, en otras palabras, se busca que solo exista corriente de calor en una sola dirección.

Un rectificador térmico perfecto sería uno que sea altamente conductor térmico en una dirección mientras que aísla en la otra, y se espera que funcione como un prometedor componente para control térmico en aplicaciones de microelectrónica. Actualmente, los mecanismos utilizados para lograr tales efectos de rectificación térmica se basan principalmente en efectos geométricos, electrónicos, interacciones fonón - electrón y vibraciones inarmónicas de la red.

Numerosos estudios han predicho o demostrado la existencia de RT en sistemas a macro escala o nano escala, la mayoría de los cuales son heterouniones o sistemas graduados [52–55]. Un rectificador térmico además de control de calor podría recolectar energía en forma de calor y ser la base de dispositivos más complejos, como transistores y dispositivos lógico-térmicos [56,57].

Los esfuerzos por desarrollar un rectificador térmico tienen como objetivo lograr controlar el calor y en caso de que algún día logremos desarrollar un dispositivo capaz de controlar el flujo de calor con la facilidad con que se controla una corriente eléctrica, sin lugar a dudas se tendría un logro que impactaría principalmente el campo de la calefacción y de la refrigeración, y también los dispositivos que de un modo u otro se ven afectados por flujos de calor en direcciones no deseadas, desde artefactos como ropa hasta computadoras.

Tomando en cuenta las investigaciones sobre rectificadores térmicos, se analizaron diferentes geometrías, las cuales se presentan en este capítulo de la tesis, se reportan estudios tanto teóricos como experimentales de arreglos microestructurados que podrían comportarse como rectificadores térmicos (diodos térmicos).

5.1 Transferencia de calor

La transferencia de calor es aquella ciencia que busca predecir la transferencia de energía que puede ocurrir entre cuerpos materiales, como resultado de una diferencia de temperatura. La termodinámica enseña que esta transferencia de energía se define como calor. La ciencia de la transferencia de calor no sólo trata de explicar cómo puede ser transferida la energía calorífica, sino también trata de predecir la rapidez a la que se realizará este intercambio bajo ciertas condiciones especificadas.

Existen tres modos de transferencia de calor: conducción, convección y radiación.

5.1.1 Transferencia de calor por conducción

Se ha demostrado que cuando existe un gradiente de temperatura en un cuerpo, hay una transferencia de energía de la región de alta temperatura a la de baja temperatura. Decimos que la energía es transferida por conducción y que la rapidez de transferencia de energía por unidad de área es proporcional al gradiente normal de temperatura:

$$\frac{q}{A} \sim \frac{\partial T}{\partial x} \quad (5.0)$$

Cuando se inserta la constante de proporcionalidad,

$$q = -kA \frac{\partial T}{\partial x} \quad (5.1)$$

En donde q es la rapidez de transferencia de calor y $\frac{\partial T}{\partial x}$ es el gradiente de temperatura en dirección del flujo de calor. A la constante positiva k se le llama conductividad térmica del material, y el signo menos se inserta para que se satisfaga el segundo principio de la termodinámica, es decir el calor deberá fluir hacia abajo en la escala de temperatura. A la Ec. 5.1 se le llama la ley de conducción de calor de Fourier en honor al físico matemático francés Joseph Fourier, quien realizó importantes contribuciones en el tratamiento analítico de la transferencia de calor por conducción.

5.1.2 Transferencia de calor por convección

Sabemos muy bien que una placa de metal caliente se enfría con mayor rapidez cuando se le coloca frente a un ventilador, que cuando se le expone a un aire en reposo. Decimos que el calor se disipó por convección y llamamos al proceso transferencia de calor por convección.

Para expresar el efecto total de la convección, utilizamos la ley de enfriamiento de Newton:

$$q = hA(T - T_A) \quad (5.2)$$

Aquí la rapidez de transferencia de calor está relacionada con la diferencia de temperatura total entre la placa caliente y el fluido (aire), y el área de la superficie A . A la cantidad h se le llama el coeficiente de transferencia de calor por convección.

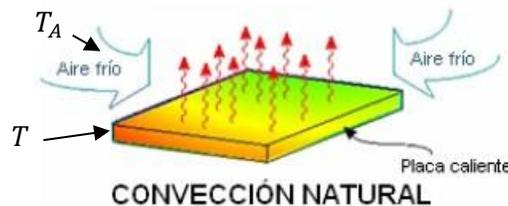


Figura 5.1 Transferencia de calor por convección en una placa

Para algunos sistemas se puede realizar un cálculo analítico de h . Para situaciones complejas se deberá determinar experimentalmente. En algunas ocasiones se llama *conductancia de película* al coeficiente de transferencia de calor debido a su relación con el proceso de conducción en la delgada capa estacionaria del fluido sobre la superficie de la placa.

La transferencia de calor por convección, además de su dependencia de las propiedades térmicas del fluido (conductividad térmica, calor específico, densidad), tiene cierta dependencia de la viscosidad del fluido. Esto es de esperarse porque la viscosidad influye el perfil de velocidad y, de manera correspondiente, la rapidez de transferencia de energía en la región cercana a la placa.

5.1.3 Transferencia de calor por radiación

En contraste con los mecanismos de conducción y convección, en donde está involucrada la transferencia de energía a través de un medio material, el calor también se puede transferir a regiones donde existe el vacío perfecto. En este caso, el mecanismo es la radiación electromagnética. Limitaremos nuestro estudio a la radiación electromagnética que es propagada como resultado de una diferencia de temperaturas; a esto se le llama radiación térmica.

Consideraciones termodinámicas muestran que un radiador ideal, o cuerpo negro, emitirá energía a una rapidez proporcional a la cuarta potencia de la temperatura absoluta del cuerpo. Cuando dos cuerpos intercambian calor por radiación, el intercambio de calor neto es entonces proporcional a las diferencias en T^4 , entonces tenemos que:

$$q = \sigma A(T_1^4 - T_2^4) \quad (5.3)$$

Donde σ es la constante de proporcionalidad y se le llama constante de Stefan-Boltzmann con el valor de $5.669 \times 10^{-8} \text{ W/m}^2 \cdot \text{K}^4$. A la Ec. 6.4 se le llama ley de radiación térmica de Stefan-Boltzmann, y se aplica solo a los cuerpos negros. Es importante observar que esta ecuación únicamente es válida para la radiación térmica; otros tipos de radiación electromagnética no pueden ser tratados de una manera tan simple.

Se debe tomar en cuenta que en ocasiones tendremos cuerpos llamados “grises” debido a sus propiedades para absorber o reflejar radiación térmica, por lo tanto, se introduce otro factor en la Ec. 5.3, llamado la emisividad ε , que relaciona la radiación de la superficie “gris” con la de una superficie negra ideal. Además, debemos tomar en cuenta el hecho de que no todas las radiaciones que dejan una superficie alcanzan la otra superficie, ya que la radiación electromagnética viaja en línea recta y algunas se pierden en los alrededores. Por consiguiente, para tomar en cuenta ambas situaciones, introducimos dos nuevos factores en la Ec. 5.4.

$$q = F_\varepsilon F_G A (T_1^4 - T_2^4) \quad (5.4)$$

donde F_ε es la función de emisividad y F_G es la función geométrica de “factor de vista”.

Hasta aquí se ha descrito de manera general los modos de transferencia de calor, para más detalles se recomienda revisar el libro: “Heat Transfer, Holman, J. P.” [58].

5.2 Rectificación térmica

De acuerdo con lo presentado en la introducción de este capítulo, el efecto de rectificación térmica se puede explicar con su análogo eléctrico, esto son llamados comúnmente diodos, donde existen desde cámaras de vacío que solo se usan para aplicaciones de alta potencia y los diodos electrónicos semiconductores, donde su trabajo es no dejar pasar la corriente eléctrica más que en un solo sentido. Si nosotros realizamos una curva de corriente contra voltaje (curva IV), esta consta de dos regiones, en la parte positiva se comporta como un circuito cerrado, esto es, que deja pasar toda la corriente en este sentido, y en la parte izquierda de la curva aparece como un circuito abierto como se ve en la figura 5.2, esto es que no deja pasar nada de corriente en este sentido, sin embargo, esto son en condiciones ideales, para iniciar el paso de corriente en un sentido se requiere cierta energía que se le denomina energía de polarización, y en el sentido opuesto el diodo puede detener cierta cantidad de corriente, esta se encuentra en la región de polarización inversa, hasta llegar un límite llamado punto de ruptura, donde este ya no evita el paso de la corriente.

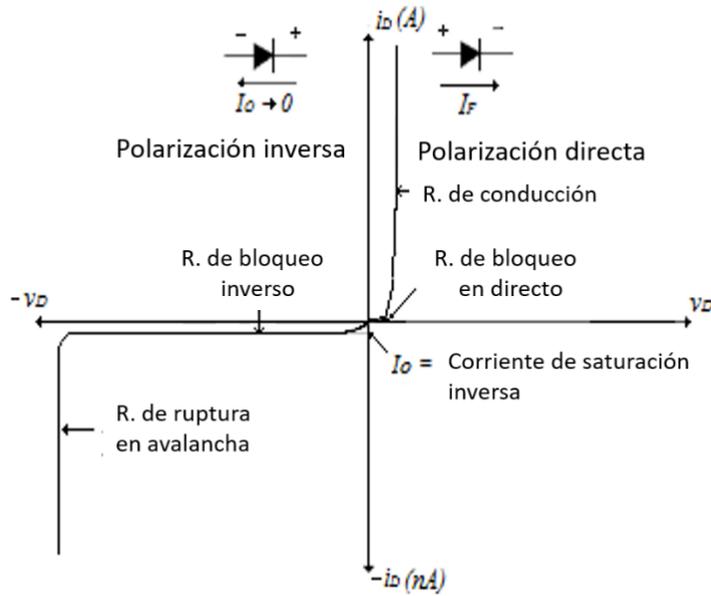


Figura 5.2 Curva característica del diodo y sus regiones de trabajo

En el campo de transferencia de calor, se pueden expresar ecuaciones que hacen analogía a cada una de las expresiones de su contraparte eléctrica, para más detalle sobre estas ecuaciones ver la figura 5.3.

Corriente eléctrica	I	q	Potencia térmica
Diferencia de potencial	ΔV	ΔT	Diferencia de temperatura
Resistencia eléctrica	$R = \frac{\rho_e L}{A}$	$R_T = \frac{\Delta X}{kA}$	Resistencia térmica
Ley de Ohm	$I = \frac{\Delta V}{R}$	$q = \frac{\Delta T}{R_T}$	Ley de Fourier

Figura 5.3 Comparación de constantes eléctricas con su equivalente térmico.

Podemos explicar el fenómeno de rectificación térmica, de la misma manera que con su análogo eléctrico, por lo tanto, se refiere a que el calor fluye en mayor cantidad en un sentido a diferencia que en sentido inverso, esto se puede obtener realizando la proporción del flujo de calor que pasa en dirección directa e inversa, al igual que en electrónica usamos la ecuación 5.5, nosotros podemos escribirla en términos de transferencia de calor, de tal

manera que el factor de rectificación se puede expresar como se muestra en la ecuación 5.6 [59,60].

$$f_r(\text{electrónico}) = \frac{I_{\text{Polarización directa}}}{I_{\text{Polarización inversa}}} \quad (5.5)$$

$$f_r(\text{térmico}) = \frac{|q_F - q_B|}{\max(q_F, q_B)} \times 100\% \quad (5.6)$$

Donde q_F es el flujo de calor en dirección directa y q_B es en dirección inversa.

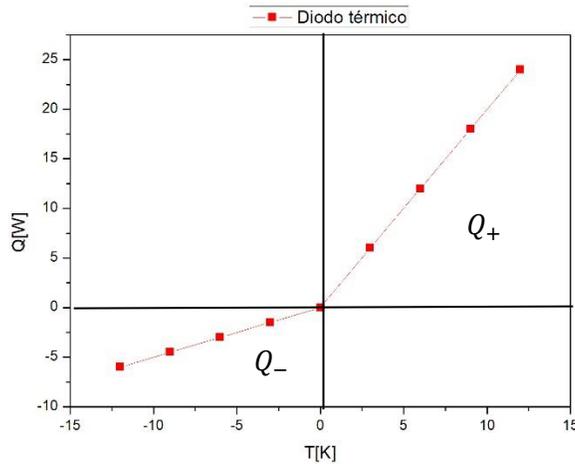


Figura 5.4 Rectificación térmica, relación en el cambio de la pendiente al graficar calor contra temperatura [61].

De acuerdo con la literatura se han propuesto varias maneras para realizar rectificación térmica, las más destacadas son mediante geometrías y utilizando materiales: con cambio de fase (Phase Change Material-PCM), en la figura 5.5 se muestra un esquema de un diodo térmico hecho con materiales con cambio de fase y sin cambio de fase.

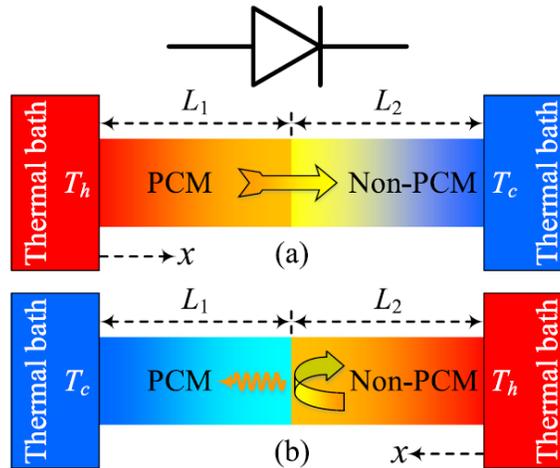


Figura 5.5 Esquema de un diodo térmico conductor compuesto por un material con cambio de fase y un material sin cambio de fase, (a) configuración en directo, hacia adelante, (b) configuración en inverso, hacia atrás. Se tienen terminales calientes y frías a temperaturas T_h y T_c respectivamente [59].

5.3 Rectificación térmica mediante microestructuras en forma de barras fabricadas por litografía de haz de electrones.

El científico Markus Schmotz y colegas [62], han propuesto diodos rectificadores basados en nano y microestructuras fabricadas con litografía con haz de iones, utilizando geometrías han logrado obtener resultados en rectificación térmica.

En este trabajo se presenta arreglos micrométricos fabricados por litografía de haz de electrones que pueden servir como rectificadores térmicos con aplicación en el control de calor y mejorar la recolección o bloqueo de energía en forma de calor.

Se decidió comenzar analizando una geometría sencilla, son barras de diferente tamaño ordenadas de tal manera que forman una especie de triángulo, tal como se puede apreciar

en la figura 5.6. Sin embargo, tomando en cuenta que necesitamos una fuente de calor para evaluar el factor de rectificación, se optó por fabricar una pista rectangular y aplicarle un voltaje de corriente directa para utilizarlo como calentador, mediante el efeto Joule se logró generar gradientes de temperatura de hasta 60 °C.

Ya que necesitamos tener mediciones en ambos sentidos de nuestro arreglo, se propuso un arreglo con el calentador en el centro y de esta manera aseguramos que la cantidad de calor generada es la misma para ambas condiciones de medición y así tener una medición más confiable.

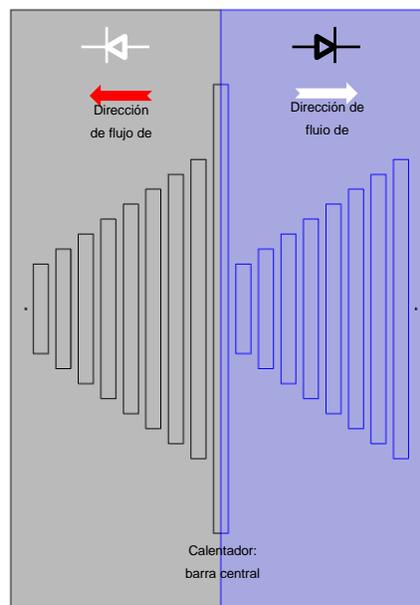


Figura 5.6 Arreglo de microestructuras para análisis de rectificación térmica. En la imagen se muestra en color gris la configuración para el rectificador en directo-hacia delante de la fuente de calor y en color azul la configuración en inverso- hacia atrás de la fuente de calor. La fuente de calor (calentador) es la barra central.

Los materiales utilizados para el análisis térmico son plata (Ag) para las barras y el sustrato es un polímero llamado poliimida (Cinta Kapton). La poliimida tiene propiedades térmicas interesantes que favorecen al comportamiento deseado del diodo térmico, ya que posee una baja conductividad térmica $k = 0.15 \text{ (} W/m * K \text{)}$.

Los sustratos de poliimida (PI) se han estudiado por muchos investigadores porque es un excelente material polimérico. Ha atraído los intereses de muchas partes en actividades de desarrollo e investigación fotovoltaica (PV) debido a su flexibilidad, peso ligero, bajo costo (por lo tanto, se pueden fabricar dispositivos potencialmente de bajo costo sobre PI), resistencia a altas temperaturas (típicamente hasta a 400 ° C de temperatura de proceso), bajo coeficiente de expansión térmica (CTE), baja absorción de humedad y características de alta liberación de humedad, excelentes propiedades eléctricas y también mayor resistencia de voltaje. Debido a sus propiedades superiores, PI ha encontrado sus aplicaciones como sustratos en celdas solares flexibles de película fina, circuitos impresos flexibles e interconexiones de alta densidad [47,48].



Figura 5.7 Poliimida flexible, cinta Kapton

En un sistema o dispositivo es importante tener mediciones confiables y eso involucra tener parámetros o mediciones de referencia, es por esta razón que se decidió comparar el arreglo presentado en la figura 5.8 con arreglos de referencia que a continuación se muestran:

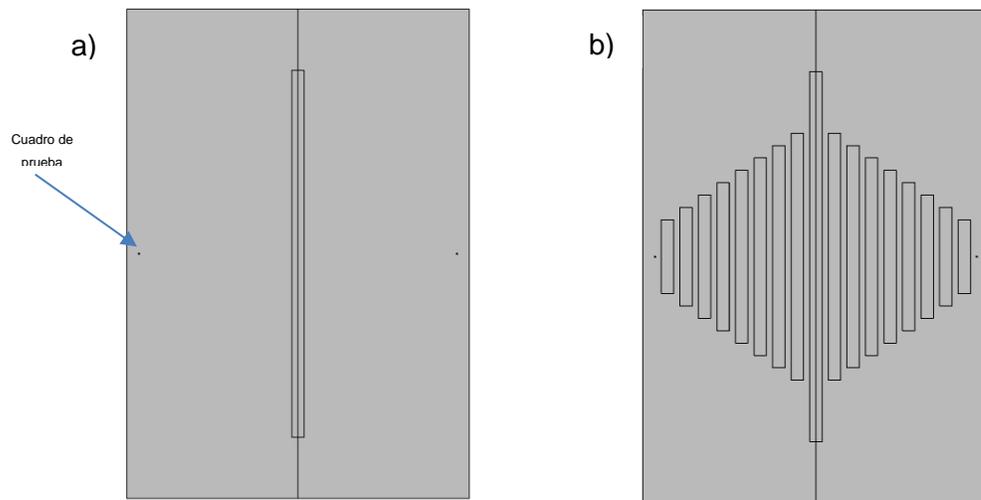


Figura 5.8 Arreglos analizados como referencia a) Barra central que realiza la función de fuente de calor y b) Arreglo de microestructuras de referencia.

Es necesario comprobar que el efecto de rectificación sea por las microestructuras fabricadas en el sustrato y no por otros factores. En el inciso a) de la figura 5.8 se presenta el diseño de la barra calentadora y tenemos dos elementos (cuadros de pruebas) en los cuales tomamos la medición de temperatura o flujo de calor. Estos elementos de prueba están a la misma distancia de la barra calentadora. En el inciso b) de la figura 5.8 observamos un arreglo de microestructuras acomodadas de manera simétrica respecto a la barra calentadora, de esta manera tomamos medición de temperatura o flujo de calor en los elementos de prueba y se comprueba que en acomodo simétrico no tenemos un factor de rectificación.

5.3.1 Simulación numérica

Antes de fabricar los arreglos, se realizaron estudios teóricos utilizando el método de elemento finito mediante el software COMSOL Multiphysics. Se utilizó el módulo de AC/DC y el de transferencia de calor. Para las simulaciones se diseñaron en el software de AutoCAD barras con un ancho de $1\mu\text{m}$ y un espesor de 50nm . El cuadro de prueba es de 100nm de ancho por lado y el mismo espesor que las barras.

Las ecuaciones que gobiernan el calentamiento por efecto Joule están dadas de la siguiente manera:

$$q_{prod} = dQ_{DC} \quad (5.7)$$

Donde $Q_{DC} = \mathbf{J} \cdot \mathbf{E} = \sigma |\nabla_t V|^2$ ($\frac{W}{m^3}$), es la densidad de potencia.

Para más información sobre el proceso de simulación numérica, se recomienda revisar el capítulo 2 de este documento.

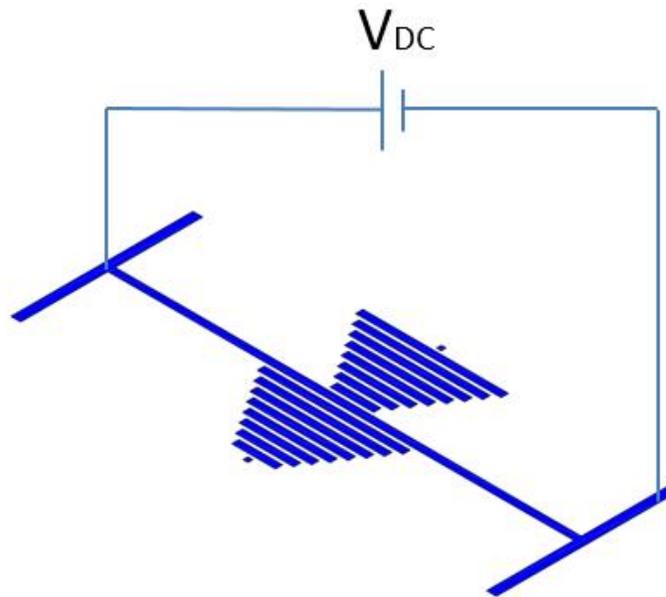


Figura 5.9 Esquema de la conexión del arreglo y la fuente de voltaje de corriente directa.

En la figura 5.10 tenemos el potencial eléctrico aplicado en la simulación numérica en 3D de la barra metálica que sirve como calentador, le hemos aplicado 0.004 V en las terminales.

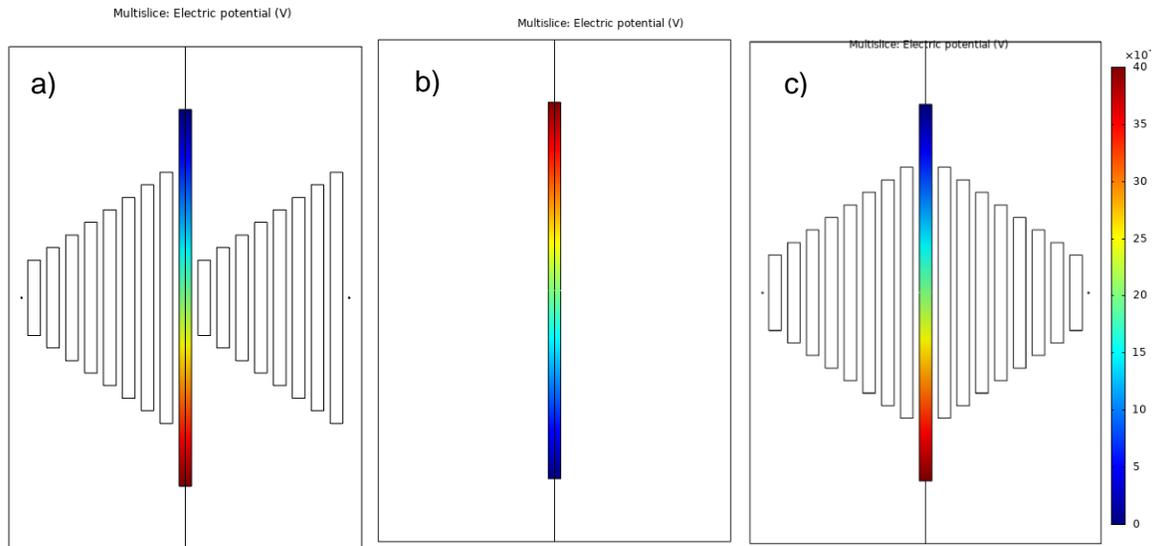


Figura 5.10 Simulación del potencial eléctrico a) Arreglo de diodo rectificador, b)

Arreglo de referencia y c) Arreglo de diodo rectificador de referencia.

Ya que se aplicó un potencial eléctrico, se realizó la simulación numérica utilizando multi física para hacer el análisis térmico. Los valores de temperatura para los arreglos presentados en la figura 5.10 se obtuvieron resolviendo las ecuaciones que gobiernan la transferencia de calor en sólidos, es importante mencionar que para estas simulaciones se tomó en cuenta un espesor de 50 nm para el sustrato de poliimida, con la finalidad de reducir el tiempo de cómputo, utilizar un espesor del sustrato no real, para las mediciones de distribución de temperatura no nos afecta. En la figura 5.11 se muestra el arreglo de referencia, se trazó una línea (color rojo) de análisis para medir la temperatura en los puntos que conforman la línea.

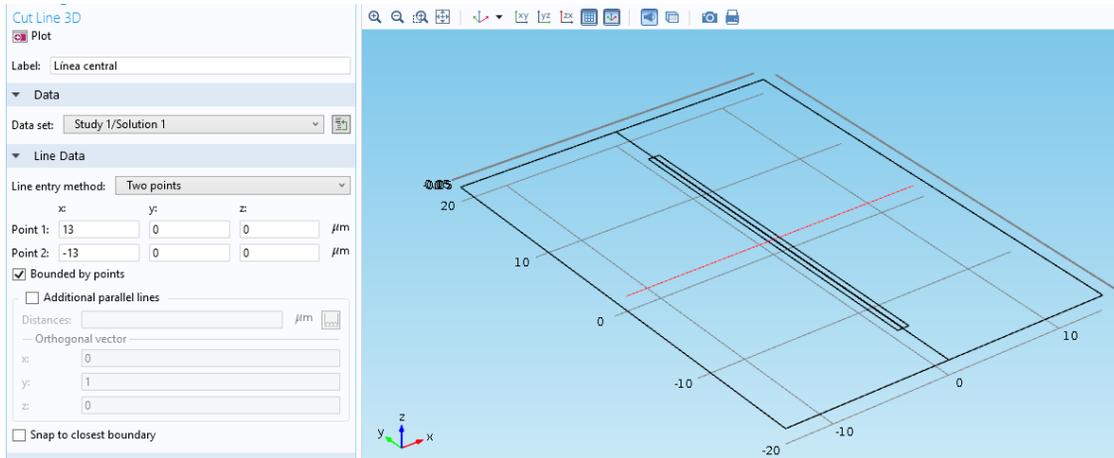


Figura 5.11 Línea roja de análisis para medir la temperatura.

En simulaciones numéricas basadas en el elemento finito, el mallado de los elementos juega un papel importante, por eso es necesario comprobar que la calidad del mallado sea adecuada para que no afecte a la exactitud de las mediciones. En la siguiente figura se muestra el mallado en forma de tetraedros utilizado en el arreglo, podemos observar que es simétrico considerando la barra como punto central, de esta manera aseguramos que el mallado no alterara los valores de temperatura.

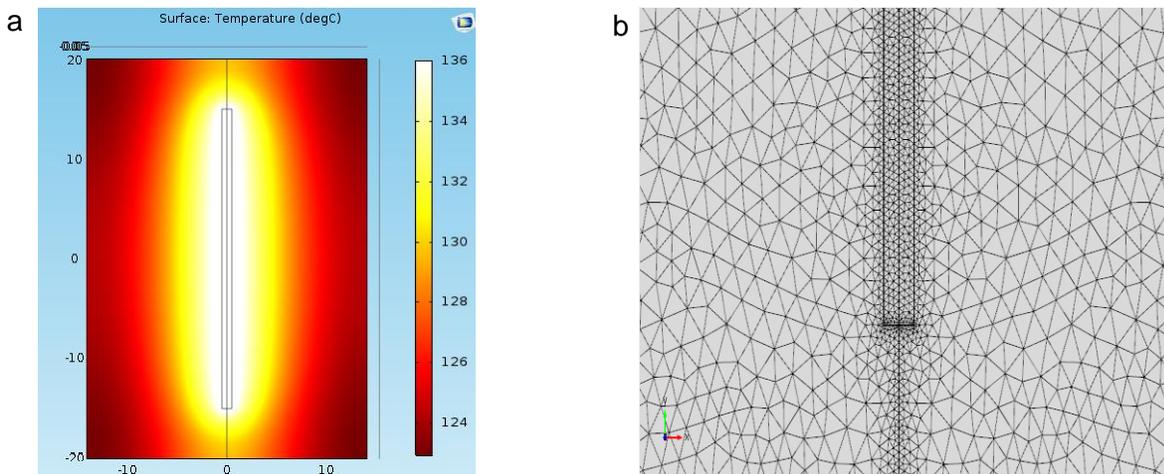


Figura 5.12 a) Simulación térmica y b) mallado del arreglo de referencia, la barra central es el elemento que se calienta por efecto Joule ya que en las terminales se le

conecta una fuente de voltaje de corriente directa. El circuito se alimenta con un voltaje de 0.004 volts.

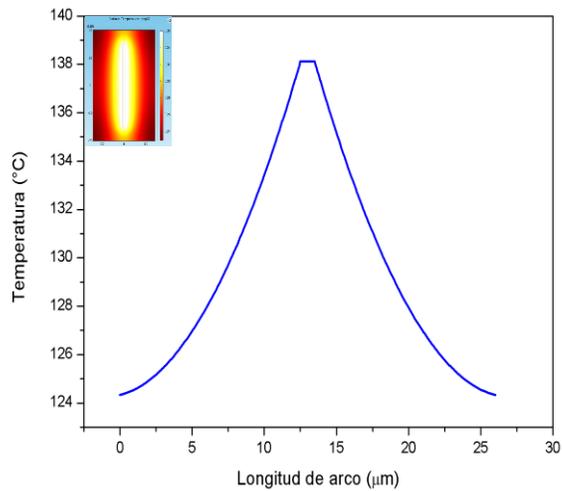


Figura 5.13 Temperaturas alcanzadas de acuerdo con la línea de análisis

Se puede observar en la figura 5.13 que la distribución de temperatura es simétrica, por lo tanto, comprobamos que nuestra simulación está bien y no influye en la obtención de un factor de rectificación.

Se propuso una geometría utilizando barras rectangulares ordenadas para formar un triángulo, con el objetivo de demostrar el efecto de la geometría en la transferencia de calor, en la siguiente figura se puede observar que para un acomodo de barras de manera simétrica se tiene un comportamiento térmico también simétrico. Se debe tomar en cuenta que el elemento calentador se encuentra en el centro.

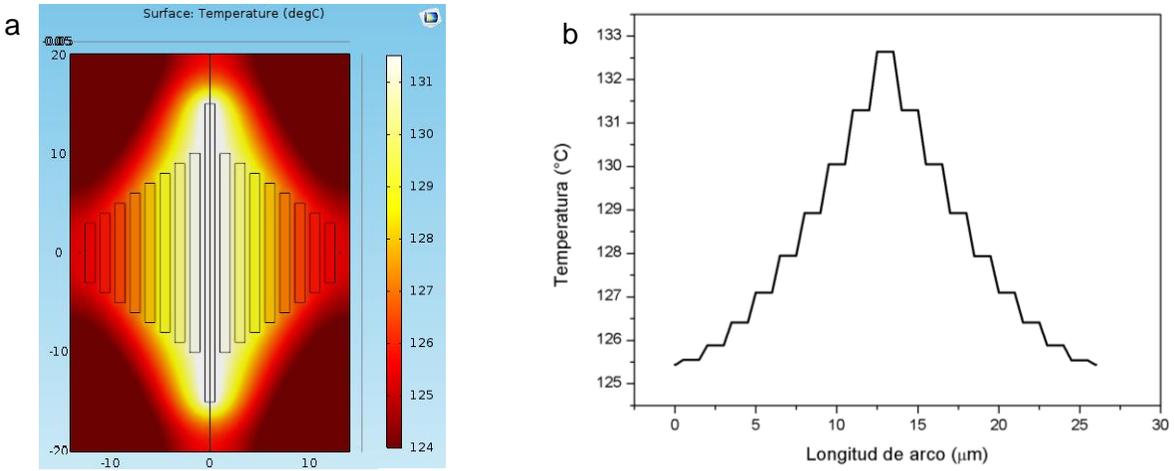


Figura 5.14 a) Simulación térmica y b) temperaturas alcanzadas de acuerdo con la línea de análisis central.

En la siguiente figura se puede ver que se cambió la orientación de las estructuras y se muestra el efecto de la geometría en la transferencia de calor. La distribución de temperatura nos da una idea de la rectificación sin embargo más adelante se presentan los valores del factor de rectificación.

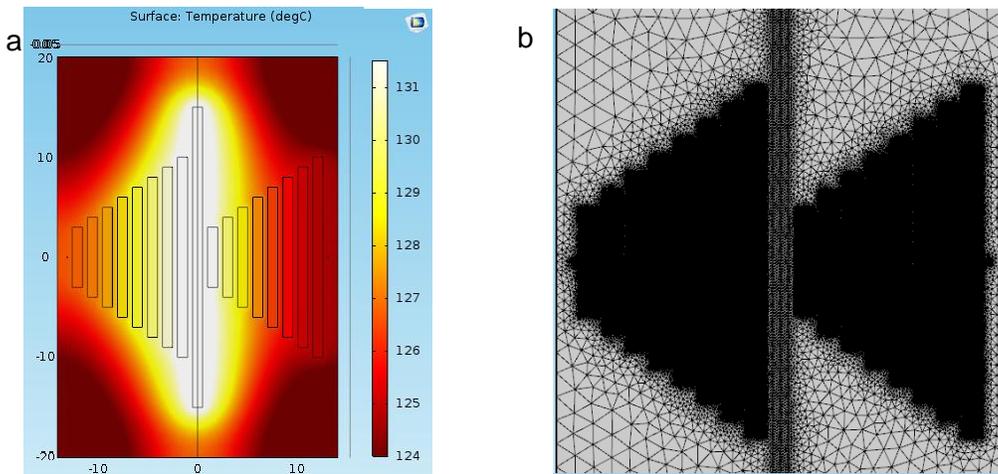


Figura 5.15 a) Simulación térmica y b) mallado del arreglo de rectificación, la barra central.

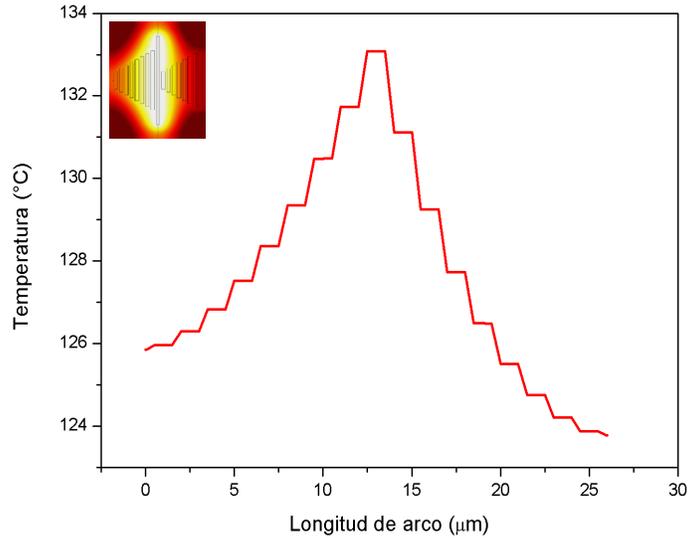


Figura 5.16 Temperaturas alcanzadas de acuerdo con la línea central de análisis.

Se puede observar en la figura 5.16, que el arreglo si tiene efecto en la transferencia de calor, por lo que se decidió fabricar dicha geometría y realizar la caracterización experimental.

Tomando en cuenta que, para poder calcular el factor de rectificación del arreglo propuesto, es necesario tener el valor de flujo de calor q_F y q_B , de acuerdo con la ecuación 6.6 presentada anteriormente, por lo tanto, utilizando el software COMSOL hemos obtenido los valores de magnitud de flujo de calor total, los valores obtenidos se muestran en tabla 5.1. En la figura 5.17 se muestra la imagen de los elementos de prueba, donde se realizaron las mediciones.

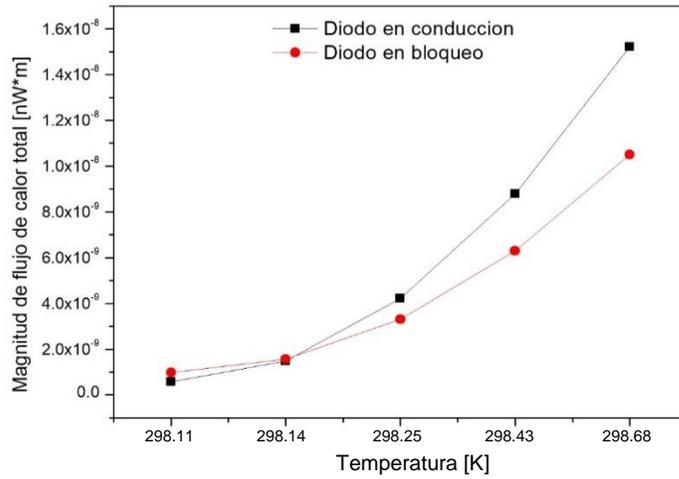


Figura 5.17 Magnitud de flujo de calor total medido en el elemento de prueba del arreglo vs temperatura en la barra central (calentador)

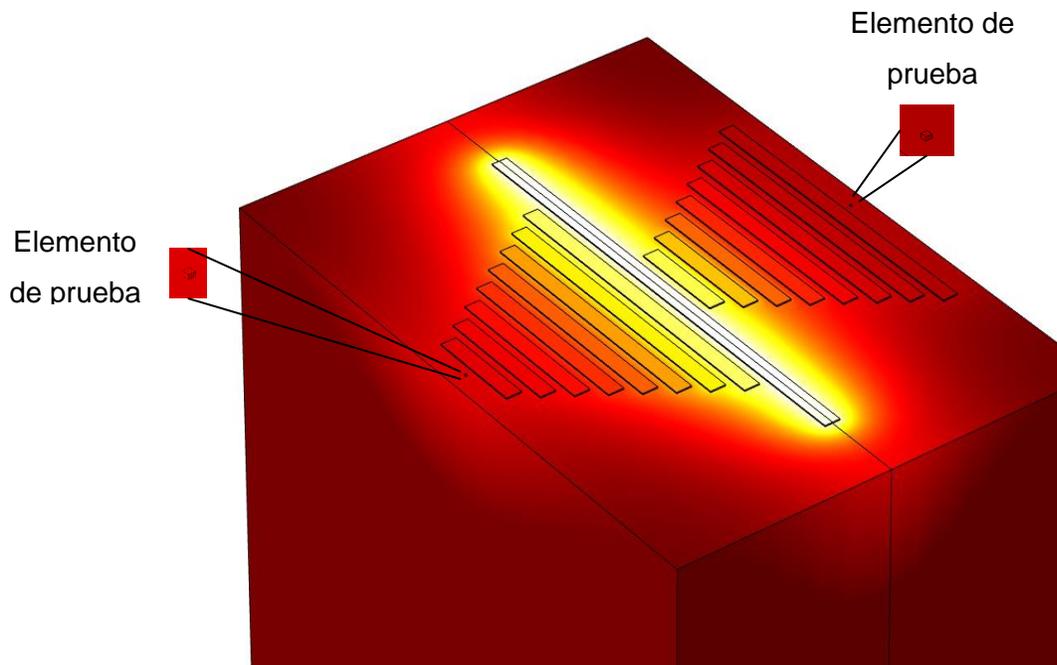


Figura 5.18 Distribución de temperatura en el arreglo y elementos de prueba donde se tomó la medición de magnitud de flujo de calor.

En la figura 5.18 se puede observar que el comportamiento del flujo de calor describe una curva no lineal respecto al aumento de temperatura.

En la tabla 5.1 se presentan los valores de factor de rectificación para cada temperatura, calculados de acuerdo con la ecuación 5.6.

Voltaje aplicado en la barra central (calentador) [Volts]	Temperatura máxima en barra central (calentador) [k]	Factor de rectificación (porcentaje)
0	298.11	0
0.001	298.14	-5.1
0.002	298.25	27.3
0.003	298.43	39.3
0.004	298.68	44.8

Tabla 5-1 Resultados de rectificación térmica para diferentes temperaturas en el calentador (barra central en el arreglo).

Con la finalidad de comparar nuestros resultados con los obtenidos en otros trabajos, se presenta en la figura 5.19 la curva característica de nuestro diodo térmico, para transferencia de calor en directo y en inverso, se tomaron los valores obtenidos presentados en la figura 5.17.

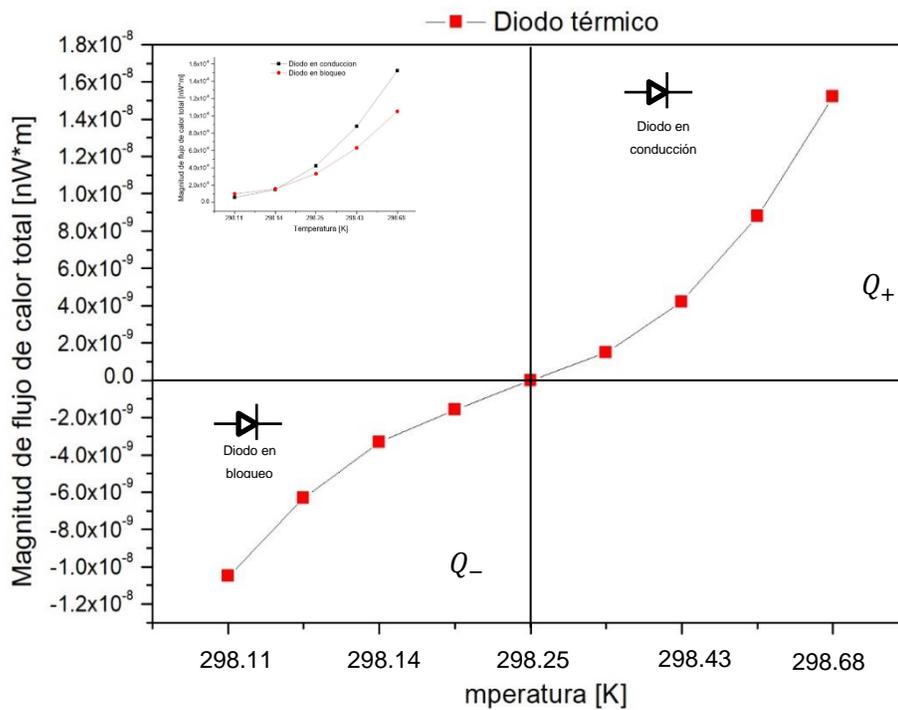


Figura 5.19 Curva característica del diodo térmico propuesto de acuerdo con la figura

5.4.

5.3.2 Fabricación y caracterización experimental

Para la fabricación del arreglo de rectificación térmica se utilizó la técnica de litografía de haz de electrones mediante el uso del equipo Inseptect F50. Los principales pasos que se siguieron para realizar la litografía son los siguientes:

- Diseño de geometría (AutoCAD)
- Limpieza de substrato
- Depósito de resina
- Uso del software Elphy Quantum
- Revelado de muestra
- Metalización mediante evaporación térmica
- Visualización de resultados (Microscopio óptico y SEM)

Para más detalles sobre el proceso de fabricación revisar el capítulo 3 de esta tesis.

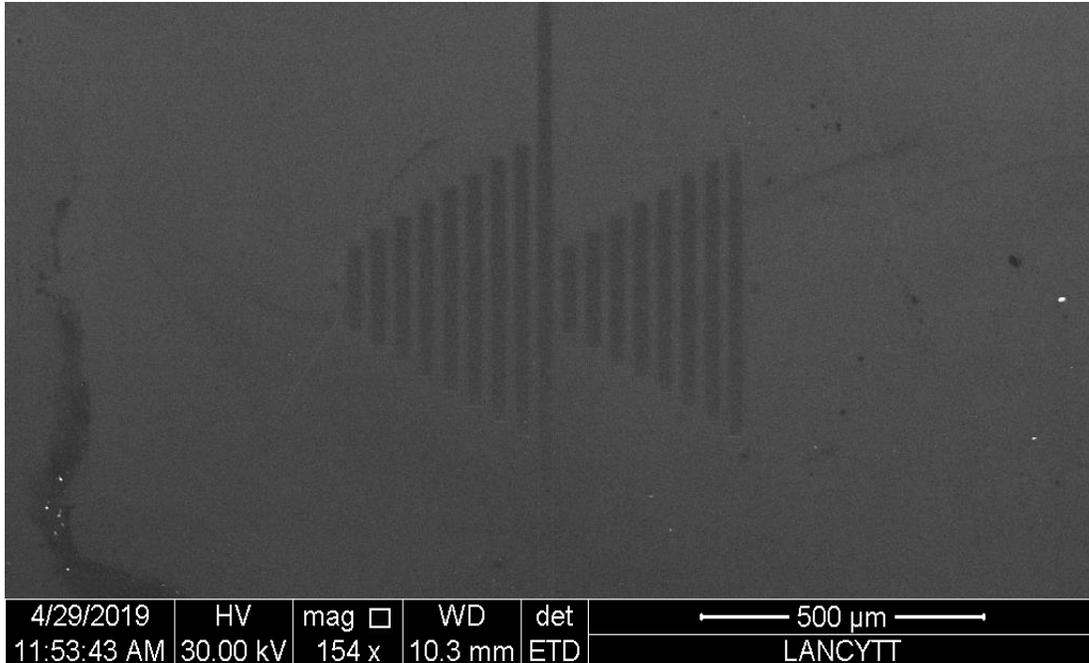


Figura 5.20 Imagen SEM del arreglo fabricado por litografía de haz de electrones, material plata (Ag).

Las dimensiones de las barras metálicas son $30 \mu\text{m}$ de ancho, espesor de 50 nm .

Para la caracterización experimental se utilizó una cámara de imagen térmica (Optotherm EL InfraSight 320) con una resolución espacial de $5 \mu\text{m}/\text{pixel}$ y una diferencia equivalente a ruido (NETD) de $0.15 \text{ }^\circ\text{C}$.



Figura 5.21 Cámara infrarroja, (Optotherm EL InfraSight 320) con una resolución espacial de $5 \mu\text{m}/\text{pixel}$.

Un voltaje de corriente directa fue aplicado entre las terminales del arreglo de acuerdo con el esquema de la figura 5.9, para producir un calentamiento por efecto Joule. Antes de aplicar el voltaje, el sistema que contiene el arreglo se ajusta en estado estacionario, después de un tiempo el arreglo llega a la temperatura deseada, es el tiempo suficiente, para que el arreglo se caliente de manera uniforme. Es importante mencionar que se utilizó una celda Peltier para calentar el sustrato a una temperatura de $60 \text{ }^\circ\text{C}$ y con esto poder observar el arreglo, ya que a temperatura ambiente no fue posible identificar las estructuras, el colocar un set de temperatura de $60 \text{ }^\circ\text{C}$ también no ayuda a eliminar ruido térmico.

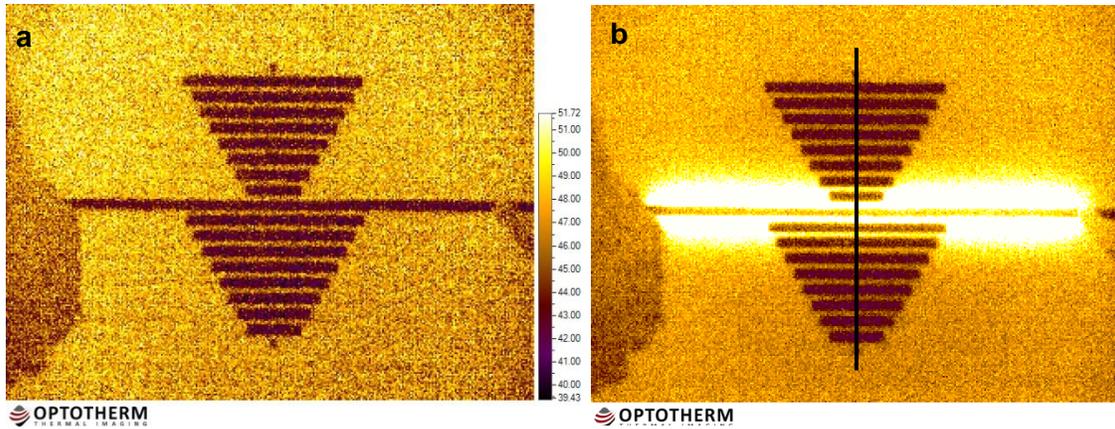


Figura 5.22 Imágenes térmicas del arreglo experimental, dispositivo con geometría asimétrica. a) arreglo sin voltaje aplicado y b) arreglo con calentamiento por efecto Joule.

Es importante mencionar que los arreglos fueron fabricados sobre un sustrato de poliimida, en el capítulo 5 de esta tesis se puede revisar a detalle las propiedades de este material, gracias a sus propiedades térmicas es posible realizar un estudio térmico experimental.

Para tomar las medidas de temperatura, se utilizó la cámara térmica que se muestra en la figura 5.21, la cual nos da un valor por cada pixel de $5\mu m \times 5\mu m$. De esta manera es posible obtener una línea de medición a lo largo del arreglo de acuerdo con la figura 5.22 b). La línea negra que se observa en dicha imagen representa la línea de análisis y su gráfica se muestra en la siguiente figura 5.24:

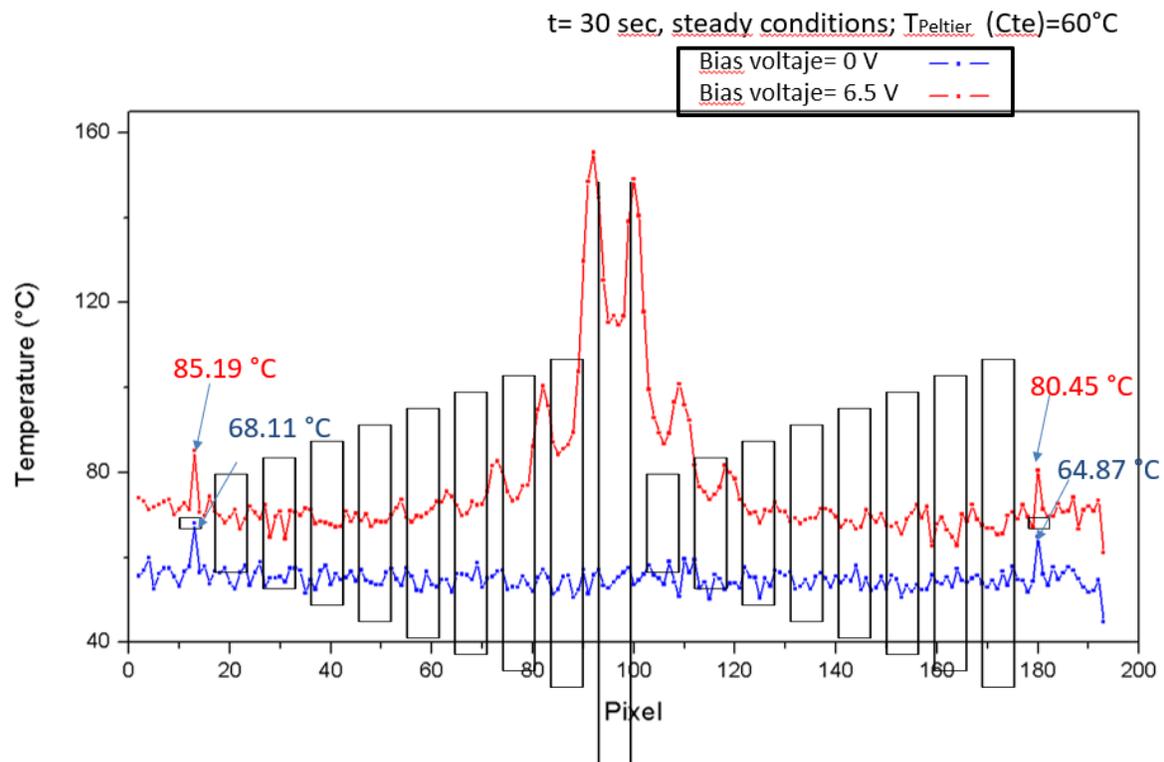


Figura 5.23 Gráfica de temperaturas vs píxel, la línea roja representa los valores obtenidos cuándo se aplica el voltaje de corriente directa.

Las mediciones experimentales fueron realizadas en condiciones de laboratorio controladas, la temperatura ambiente del cuarto de mediciones se controló manteniendo las puertas cerradas y evitando corrientes internas de aire, en la figura 5.23 se observan los datos obtenidos para las dos situaciones, la línea azul representa los valores de temperatura cuando el diodo térmico se encuentra sin un voltaje aplicado, quiere decir que el calentador no está generando calor, sin embargo, podemos observar que los valores de temperatura están en rangos de 40°C a 60°C aproximadamente, esto es debido a que se utilizó una celda peltier para ajustar un set de temperatura y de esta manera lograr observar el arreglo y eliminar el ruido térmico, pero no fue posible eliminar del todo el ruido térmico, por esta razón en la figura 5.24 se muestran la comparación de los valores obtenidos de temperatura y se puede observar que existe una diferencia de temperatura de aproximadamente 1.5°C comparando el valor de los elementos de prueba.

Se puede observar que los valores de temperatura medidos con la cámara térmica muestran una tendencia de rectificación similar a los resultados simulados previamente.

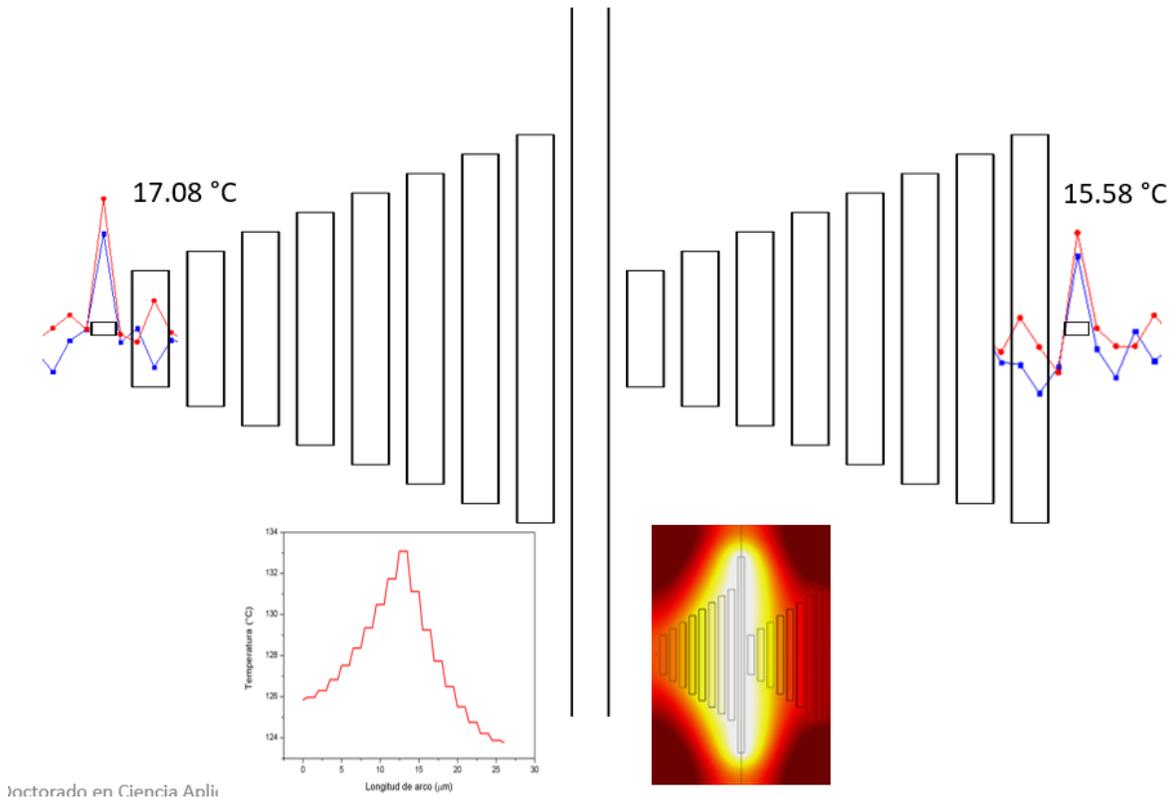


Figura 5.24 Comparativo de medidas de temperatura en los elementos de prueba.

5.3.3 Discusión y conclusiones

Se logró analizar térmicamente los arreglos fabricados por litografía de haz de electrones, los arreglos se fabricaron sobre un sustrato flexible de poliamida. Se utilizó una fuente de corriente directa para alimentar el elemento calentador, utilizando la cámara infrarroja se pudo medir los cambios de temperatura en el arreglo y el sustrato cuando se le aplicó voltaje al calentador y disipó calor por efecto Joule. Los resultados en la simulación numérica muestran un factor de rectificación de 40 % para un voltaje de 4 mV aplicado en

el calentador. Se obtuvo un comportamiento no lineal en la curva de rectificación del diodo similar a la curva característica de un diodo eléctrico.

Es importante mencionar que en la parte de caracterización experimental hemos tenido problemas con el ruido térmico, sin embargo, hemos obtenido resultados que coinciden con los resultados obtenidos en la simulación.

5.4 Caracterización térmica de microestructuras triangulares y rombos para aplicaciones de rectificación térmica

En el apartado anterior se mencionó que varios científicos han propuesto diodos rectificadores basados en nano y microestructuras, utilizando diferentes geometrías se ha logrado obtener resultados en rectificación térmica.

En esta etapa de la investigación, se analizó térmicamente nano estructuras que podrían ser utilizadas para aplicaciones de rectificación térmica. En la caracterización térmica se utilizó una cámara termográfica IR de la marca FLIR modelo X6540sc.

Se analizó la transferencia de calor utilizando simulación numérica y posteriormente se realizaron mediciones experimentales. Se realizó el diseño de un arreglo de nano estructuras con geometrías de triángulos y rombos, también se analizó el sustrato de poliimida. En la figura 5.25 se muestra el arreglo fabricado sobre el sustrato de poliimida.

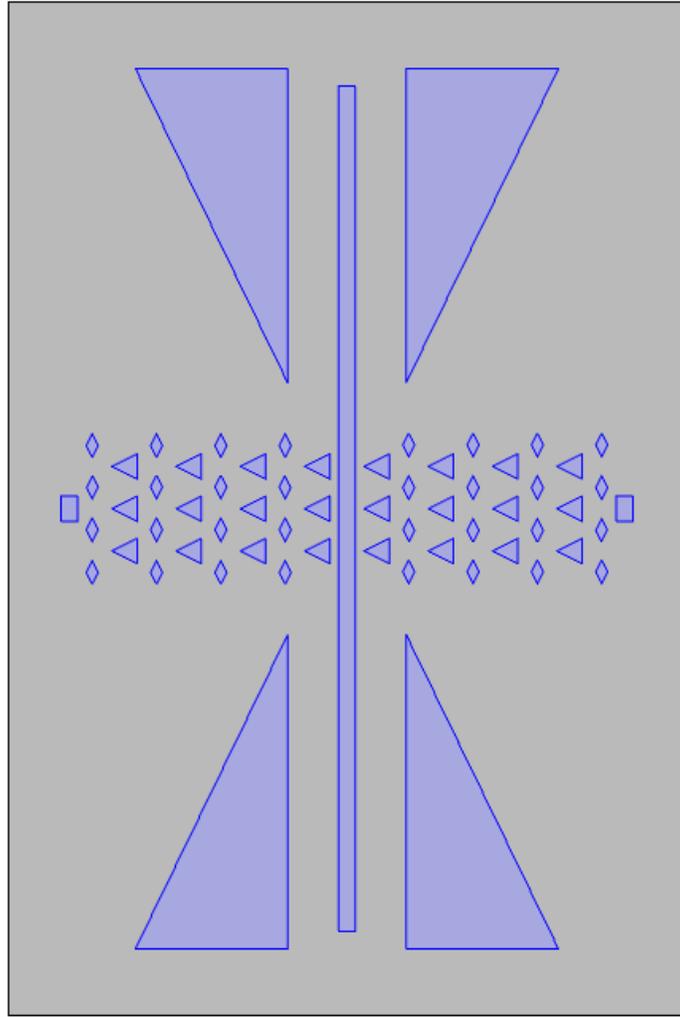


Figura 5.25 Arreglo de nanoestructuras para análisis de rectificación térmica.

El esquema del arreglo de triángulos y rombos se muestra en la figura 5.25. Los triángulos pequeños miden $15\mu\text{m}$ por lado, los rombos $10\mu\text{m}$ por lado, la línea central para calentar mide $10\mu\text{m}$ de ancho y todas las estructuras tienen un espesor de 50nm . Se colocaron 4 triángulos con la intención que funcionen como disipadores, las medidas de estos triángulos son $90\mu\text{m} \times 190\mu\text{m} \times 205\mu\text{m}$.

Las simulaciones numéricas fueron realizadas siguiendo el mismo procedimiento descrito anteriormente en el apartado 6.3 de esta tesis. En la siguiente imagen podemos observar

la distribución de temperatura en el arreglo de triángulos y rombos, se ha utilizado un elemento calentador de forma rectangular, posicionado en el centro, de esta manera aseguramos que la transferencia de calor es similar para ambos lados del arreglo.

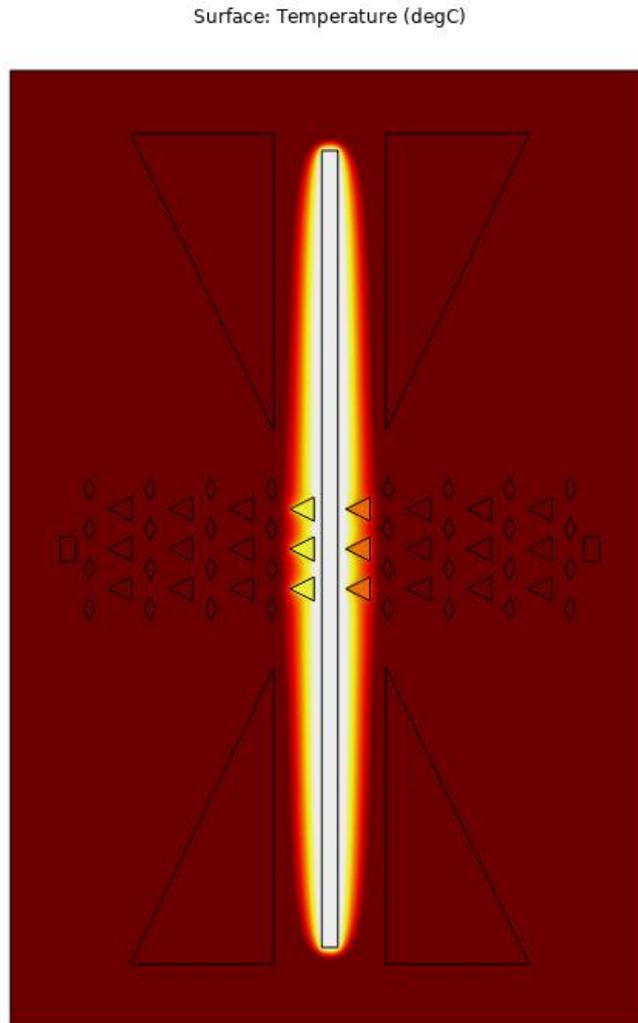


Figura 5.26 Distribución de temperatura, la línea del centro es el elemento que se calienta por efecto Joule ya que en los extremos se le conecta una fuente de voltaje de corriente directa. El circuito se alimenta con un voltaje de 0 hasta 0.05 volts.

Después de analizar el arreglo por simulación numérica, se procedió a fabricar el dispositivo, utilizando el proceso de litografía de haz de electrones.

Se realizó un estudio térmico del arreglo de nano estructuras y el sustrato, se suministró un voltaje de corriente directa al arreglo y con esto se observó la disipación de potencia, logramos observar la distribución de temperatura utilizando una cámara térmica FLIR X6540sc con una resolución espacial de $3\mu\text{m}/\text{píxel}$, se utilizó para el análisis el software FLIR ResearchIR versión 4.40.1.6.



Figura 5.27 Cámara térmica utilizada para la caracterización térmica, modelo FLIR X6540sc.

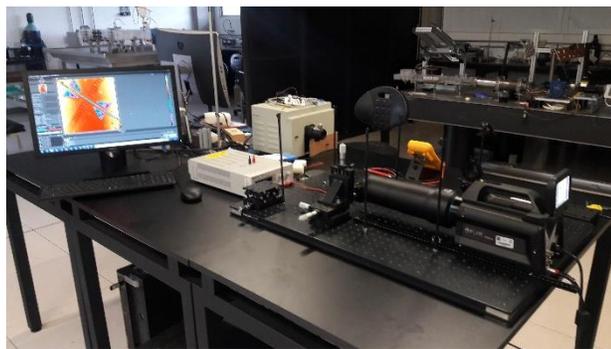
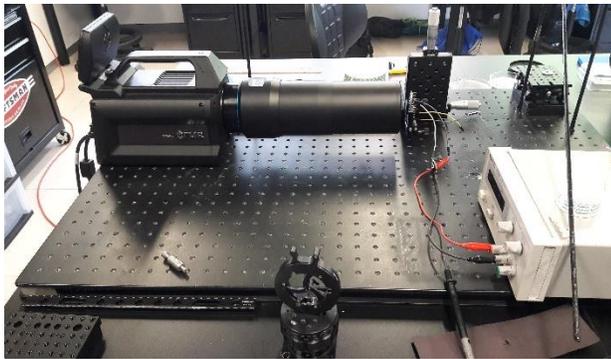


Figura 5.28 Arreglo experimental montado en el “laboratorio de fotónica” con nanoestructuras en el Instituto de Energías Renovables de la UNAM, campus Cuernavaca.

5.4.1 Fabricación

En la figura 5.29 se puede observar el chip con las conexiones al sustrato con el arreglo de nanoestructuras para caracterizar.

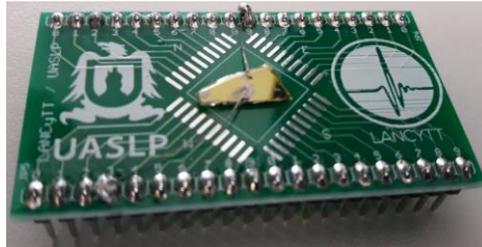


Figura 5.29 Chip con el arreglo de nanoestructuras (diodo térmico).

5.4.2 Simulación

Se realizó un estudio teórico utilizando el método de elemento finito mediante el uso del software COMSOL Multiphysics. Para esta simulación se utilizó el módulo de transferencia de calor y el módulo de corriente eléctrica. Se aplica un voltaje para generar el calentamiento por efecto joule.

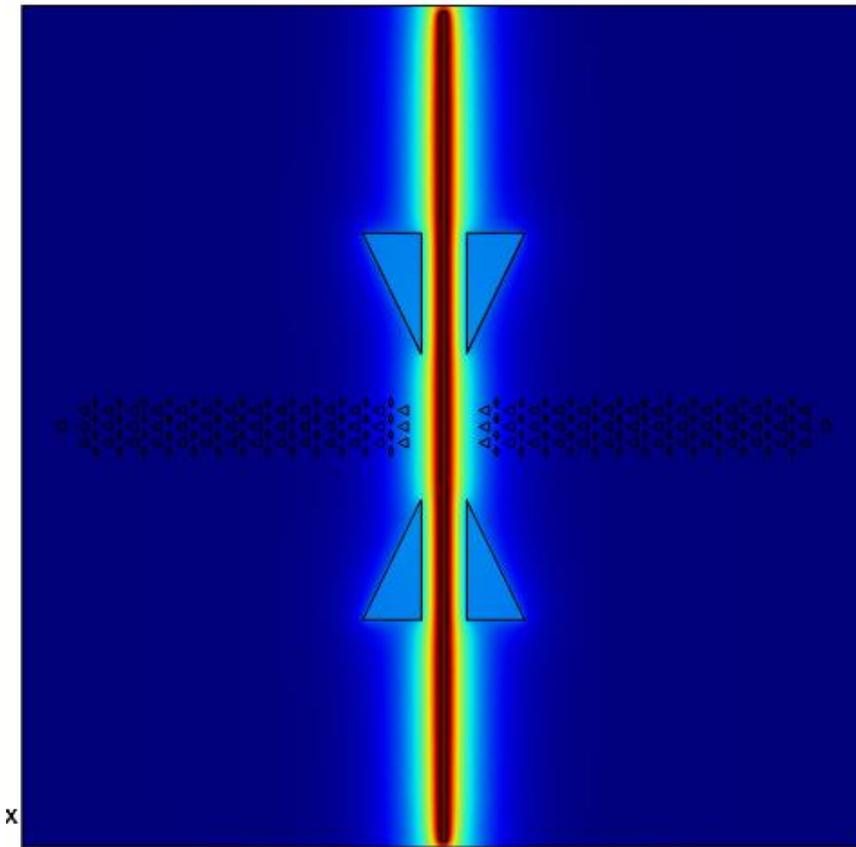


Figura 5.30 Distribución térmica de acuerdo con simulación numérica, la línea del centro es el elemento que se calienta por efecto Joule ya que en los extremos se le conecta una fuente de voltaje de corriente directa. El circuito se alimenta con un voltaje de 3 volts.

5.4.3 Análisis térmico - experimental

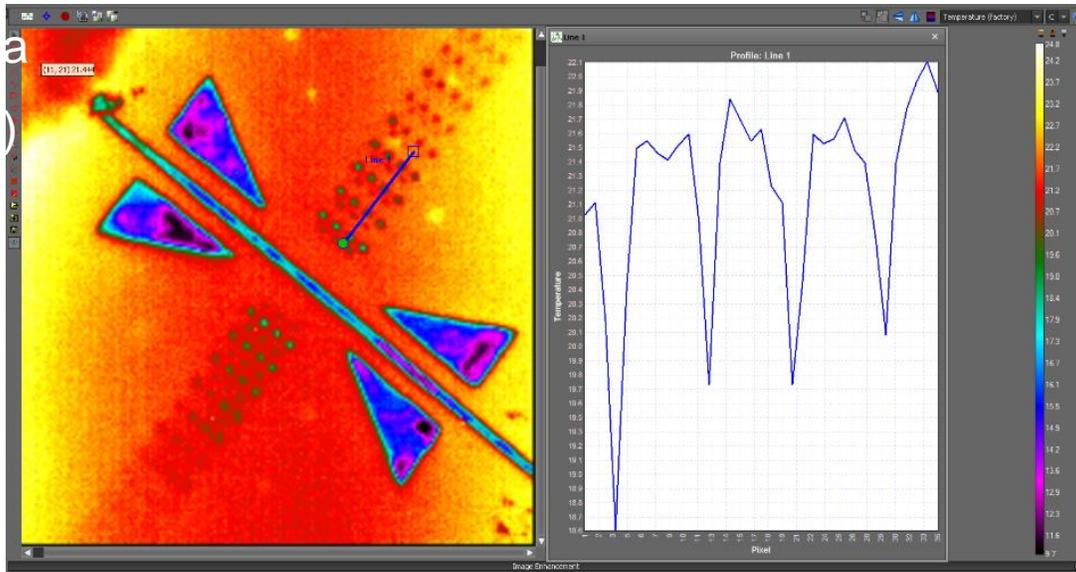


Figura 5.31 Imagen que se muestra en el software FLIR ResearchIR, en la parte izquierda se tiene enfocado el arreglo de nanoestructuras, se puede observar que el elemento central de calentamiento se encuentra más frío que el sustrato ya que aún no se le aplica un voltaje para calentarlo por efecto Joule. En la parte derecha tenemos los valores de temperatura medidos para la línea 1 azul posicionada sobre 4 nanoestructuras.

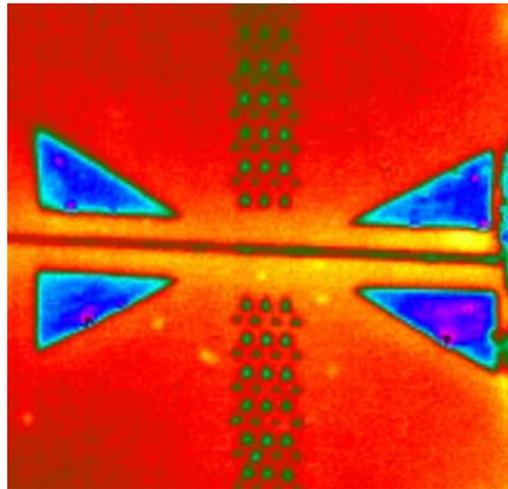


Figura 5.32 Microtermograma del dispositivo bajo análisis, alimentando el calentador con 3 volts de corriente directa.

Para obtener la gráfica de la figura 9 se tomaron en cuenta 20 cuadros cuando la fuente está en 0 volts, se calculó la temperatura promedio de los 20 cuadros y ese dato es el que se grafica de color azul, la gráfica de color verde representa los valores de temperatura promedio de 20 cuadros cuando la fuente de voltaje está en 3 volts. Los datos se obtuvieron con un muestreo de 100 cuadros por segundo en la cámara. (video 46 de 5 segundos).

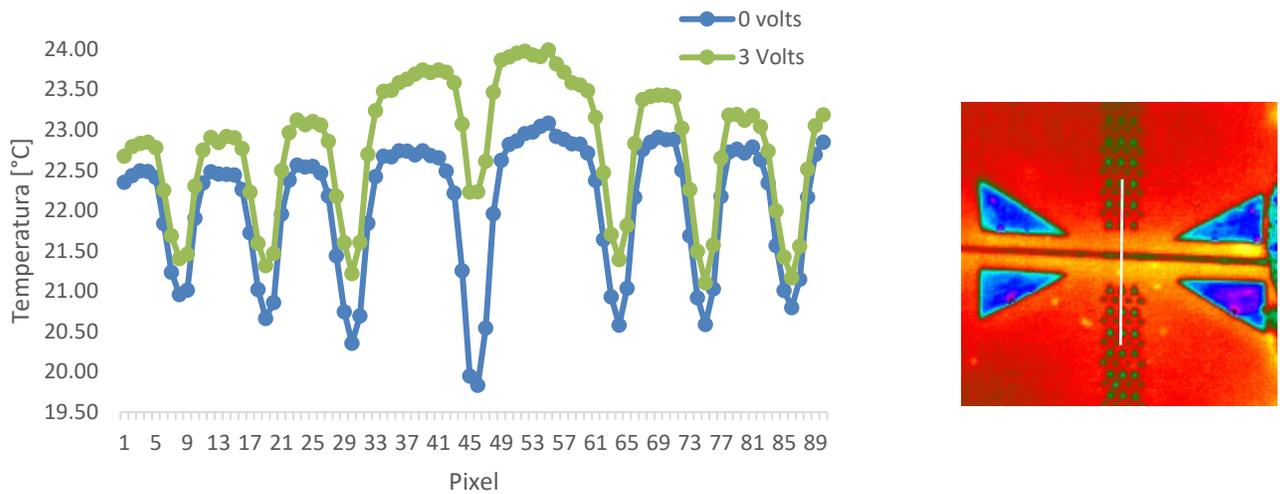


Figura 5.33 Grafica de las temperaturas medidas en la línea de análisis, ver línea blanca en la imagen de la derecha.

En la figura 5.33 se puede observar el comportamiento térmico de las estructuras fabricadas y del sustrato cuando se tiene en la fuente de voltaje 0 volts y cuando se tiene 3 volts.

Se analizaron las variaciones de temperatura para encontrar el aumento de temperatura debido a las nanoestructuras y al sustrato, con las figuras 5.34 y 5.35 se puede deducir que el sustrato predomina en el aumento de temperatura de las nanoestructuras y que no es posible detectar las variaciones de temperatura en los arreglos de nanoestructuras ya

que el cambio de temperatura se da muy rápido y la cámara térmica no cuenta con esas velocidades de muestreo.

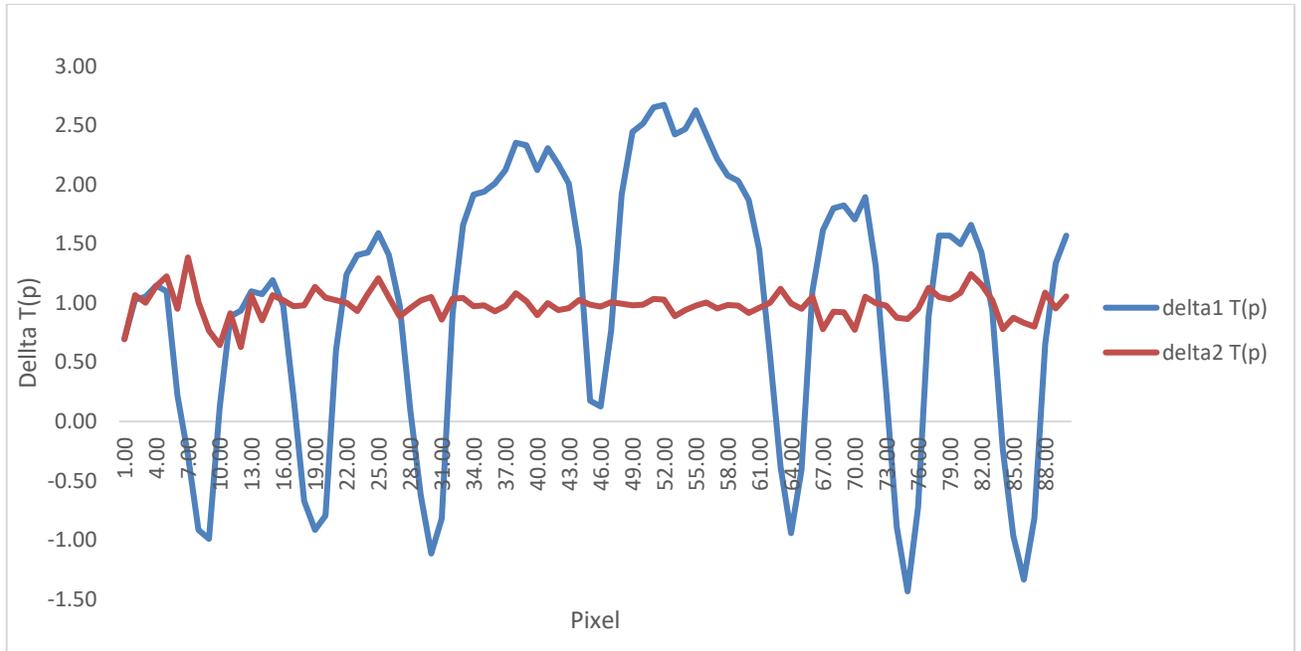


Figura 5.34 Grafica para analizar los cambios de temperatura en las nanoestructuras

Se analizaron las variaciones de temperatura para encontrar el $\Delta T(p)$, se alimentó el filamento con 4 volts, (vídeo de 5 segundos, a los 2 segundos se enciende la fuente)

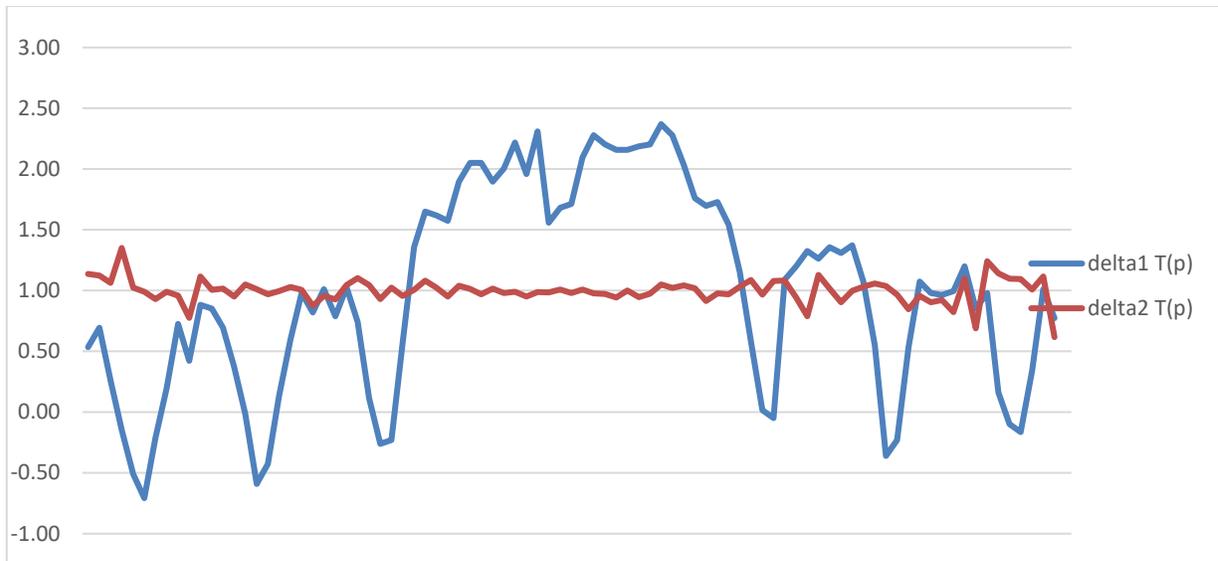


Figura 5.35 Grafica para analizar los cambios de temperatura en las nanoestructuras, datos medidos con 729 cuadros por segundo

También se analizaron los tiempos en que el filamento llega a estabilizarse en el aumento de temperatura, en este caso se encendió la fuente de voltaje con 3 volts y se tomaron las lecturas por un tiempo de 8 minutos con 30 segundos, considerando un muestreo de 10 cuadros por segundo. En la figura 5.36 se puede observar que aproximadamente en 180 segundos o 3 minutos el filamento comienza a estabilizar su aumento de temperatura. El tiempo que necesita para enfriarse a su estado inicial es aproximadamente 1.5 minutos.

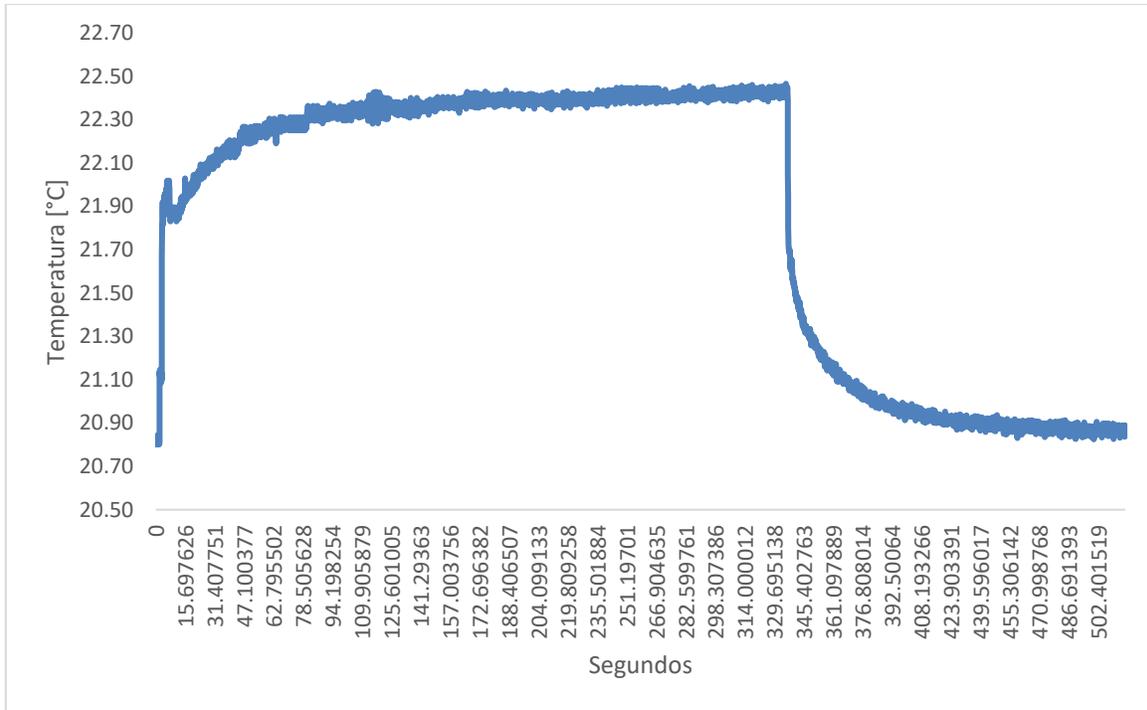


Figura 5.36 Grafica de las temperaturas medidas en el filamento por un tiempo de 8.5 minutos, en este lapso de tiempo se activó y desactivo la fuente de voltaje con la intención de analizar el tiempo en que tarda en estabilizarse el aumento de temperatura y el enfriamiento.

Se utilizó otro método para analizar el cambio de temperatura en las nanoestructuras, se colocaron cursores en los triángulos y otros cursores en el substrato, ver la figura 5.37.

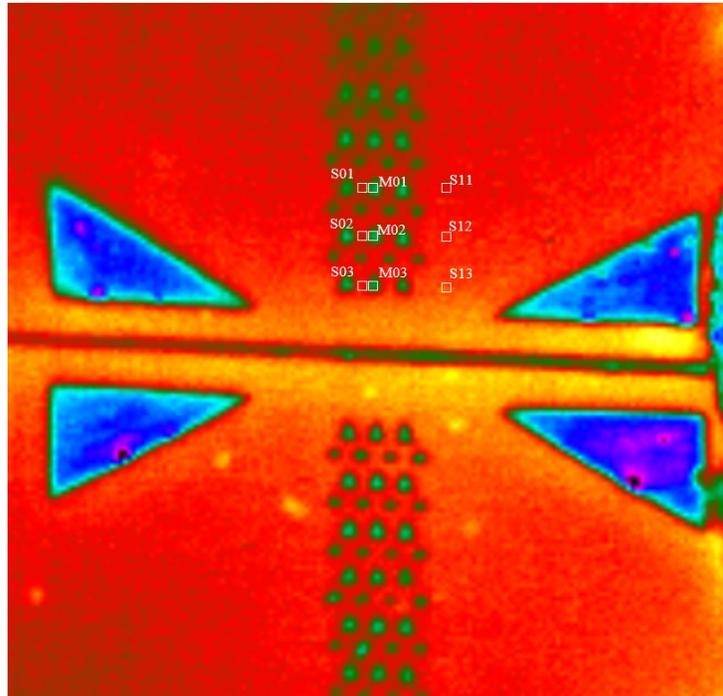


Figura 5.37. Puntos bajo análisis térmico.

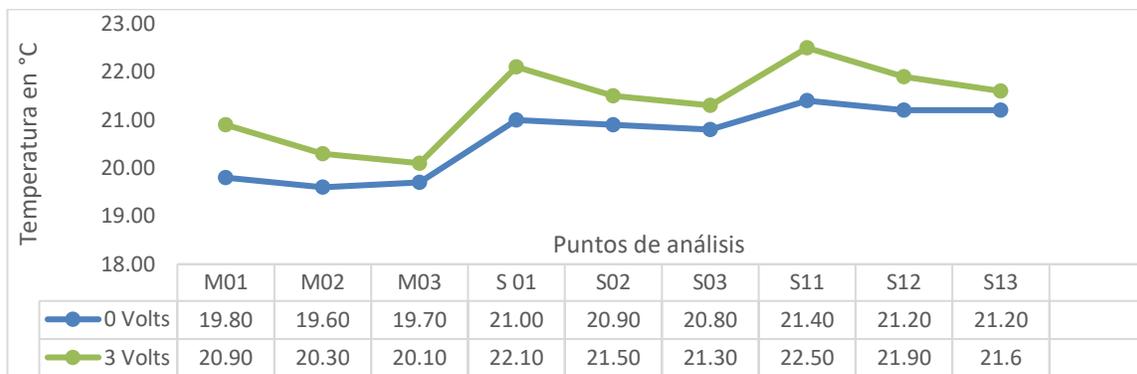


Figura 5.38 Grafica de las temperaturas promedio para los puntos bajo análisis mostrados en la figura 13.

Cabe mencionar que los datos mostrados en el gráfico de la figura 5.38, son los datos promedio para cursores de 3 x 3 μm .

Se analizaron los cambios de temperatura en los puntos bajo análisis mostrados en la figura 5.37, se tomaron mediciones cuando se está alimentando con 3 volts el calentador y cuando está en 0 volts. En las siguientes tablas se muestran los resultados obtenidos.

		M01	M02	M03	S01	S02	S03	S11	S12	S13
0 volts	[°C]	19.80	19.60	19.70	21.00	20.90	20.80	21.40	21.20	21.20
3 volts		20.90	20.30	20.10	22.10	21.50	21.30	22.50	21.90	21.60
Delta T		1.10	0.70	0.40	1.10	0.60	0.50	1.10	0.70	0.40

Tabla 5-2 Temperaturas [°C] para los diferentes puntos de muestreo, cuando la fuente de voltaje está en 0 y en 3 volts.

		M01	M02	M03	S01	S02	S03	S11	S12	S13
Delta T	[°C]	1.10	0.70	0.40	1.10	0.60	0.50	1.10	0.70	0.40

Tabla 5-3 Diferencia de temperatura para cada punto de muestreo cuando la fuente de voltaje está en 3 menos la temperatura cuando la fuente está en 0 volts.

		Muestreo 1	Muestreo 2	Muestreo 3
M01-M03	[°C]	0.70	0.8	0.7
S01-S03		0.60	0.7	0.8
S11-S13		0.70	0.7	0.8

Tabla 5-4 Diferencia de temperatura entre el punto más cercano a la fuente y el más lejano, tanto para puntos de muestreo en el triángulo y en el substrato. Se realizaron tres muestreos

Con los valores de la tabla 5.2 se puede observar que el arreglo de nanoestructuras de oro tiene la misma diferencia de temperatura que el substrato, por lo tanto se vuelve a deducir

que al momento de inducir el voltaje la temperatura en el arreglo cambia demasiado rápido y no se logra detectar el efecto del material, es como si no existiera el arreglo, el sustrato predomina en el cambio de temperatura y calienta demasiado rápido el arreglo, a pesar de que en este muestreo se utilizó el máximo de velocidad de la cámara, siendo 729 cuadros por segundo.

5.4.4 Discusión y conclusiones

Se logró analizar térmicamente los arreglos fabricados por litografía de haz de electrones, los arreglos se fabricaron sobre un sustrato flexible de poliamida. Se utilizó una fuente de corriente directa para alimentar el elemento calentador, utilizando la cámara infrarroja se pudo medir los cambios de temperatura en el arreglo y el sustrato cuando se le aplicó voltaje al calentador y disipó calor por efecto Joule. Se analizó el cambio de temperatura en las nanoestructuras (triángulos), sin embargo, se llegó a la conclusión que se calientan muy rápido, a una velocidad que la cámara infrarroja no es capaz de detectar, a pesar de que se utilizó la mayor cantidad de cuadros por segundo que la cámara puede capturar.

Se esperaba que debido a las propiedades reportadas del sustrato se tuviera una transferencia de calor por radiación y no por conducción, los resultados muestran que el sustrato sí conduce el calor y predomina la temperatura en el sustrato sobre los arreglos, esto debido a que la masa del sustrato es mucho mayor que la de las nanoestructuras, por lo tanto, el sustrato calienta a los arreglos a velocidades muy rápidas.

Estos resultados nos muestran que debemos buscar otra alternativa para preparar la muestra o arreglo de nanoestructuras, ya sea utilizando un sustrato con una masa muy cercana al de nuestros arreglos o encontrar instrumentación que sea capaz de medir a altas velocidades.

Hemos identificado los tiempos en que se estabiliza el calentamiento de nuestras estructuras debido al efecto Joule para un voltaje de 3 volts y también los tiempos de enfriamiento.

Capítulo 6

6. Nano y microestructuras con propiedades capacitivas

Introducción

La industria de dispositivos y sistemas electrónicos se ha visto beneficiada por los avances tecnológicos en las últimas décadas. Este hecho ha propiciado cambios en el desarrollo de sensores, donde el transductor simple se ha convertido en un microsistema multifuncional miniaturizado inteligente. Por lo tanto, el crecimiento exponencial de la investigación en esta área se ve impulsado por la necesidad de sensores económicos, de baja potencia y miniaturizados que puedan integrarse completamente en microsistemas y ser compatibles con aplicaciones de Lab-on-a-chip (LOC).

Un transductor es un elemento que convierte una forma de energía en otra distinta. La energía puede ser convertida con el propósito de transmitir potencia (convertidor de energía) o transmitir información.

Un sensor es un dispositivo electrónico que transforma una cantidad física no eléctrica en una señal eléctrica. La entrada puede ser luz, calor, movimiento, humedad, presión u otros fenómenos ambientales. Las características que debe abarcar un sensor para ser considerado funcional y ser aplicable para la comercialización son: alta sensibilidad, alta selectividad, estabilidad, alto tiempo de respuesta (velocidad), simplicidad de la estructura, alta relación señal / ruido, reversibilidad (recuperación del estado original), bajo consumo de energía y bajo costo de fabricación.

Hoy en día, ya existen sensores capacitivos para varias aplicaciones, sin embargo, estos dispositivos son en su mayoría voluminosos, caros, requieren mucha energía y tienen una instrumentación complicada. Estas características evitan el uso masivo. Por lo tanto, existe la necesidad de micro y nano sensores, de bajo costo y que puedan integrarse completamente en microsistemas y ser compatibles con las aplicaciones de LOC. Los avances actuales en tecnología han permitido que un transductor simple logre la miniaturización y se transforme en un microsistema completo que incluye procesamiento de señales, conversión de analógico a digital y conexión inalámbrica. Es importante mencionar, que el área de biosensores se considera un campo en expansión. Un sensor biológico o biosensor, es un dispositivo analítico que convierte una respuesta biológica en una señal eléctrica mediante la combinación de componentes biológicos con un detector fisicoquímico. Se utiliza para determinar la concentración de sustancias y otros parámetros de interés biológico. Existe una variedad de sustancias utilizadas como componentes biológicos, que incluyen; ácidos nucleicos, proteínas que incluyen enzimas y anticuerpos (los biosensores basados en anticuerpos también se llaman sensores inmunes), proteínas vegetales o lectinas y materiales complejos como cortes de tejidos, microorganismos y orgánulos. A pesar de que hay una gran cantidad de instrumentos utilizados como biosensores, se pueden encontrar principalmente en laboratorios. Existen pocos dispositivos portátiles de bajo costo, un ejemplo es el sensor de glucosa [63]. Por lo tanto, el área de investigación se ve impulsada por la necesidad de portabilidad, miniaturización y biosensores de bajo costo para evitar el uso de equipos caros.

6.1 Concepto de capacitancia y capacitores interdigitados

La capacitancia puede ser definida como la habilidad de un objeto para almacenar carga eléctrica. El capacitor de placas paralelas, el cual es ilustrado en la figura 6.1, es el capacitor más común y el cálculo de su capacitancia está basado en la siguiente formula:

$$C = \epsilon_0 \epsilon_r \frac{A}{d} \quad (6.1)$$

Siendo A el área de los electrodos y d es la distancia entre ellos, ϵ_r es la permitividad relativa de la película dieléctrica, ϵ_0 es la constante de permitividad relativa del vacío entre los electrodos.

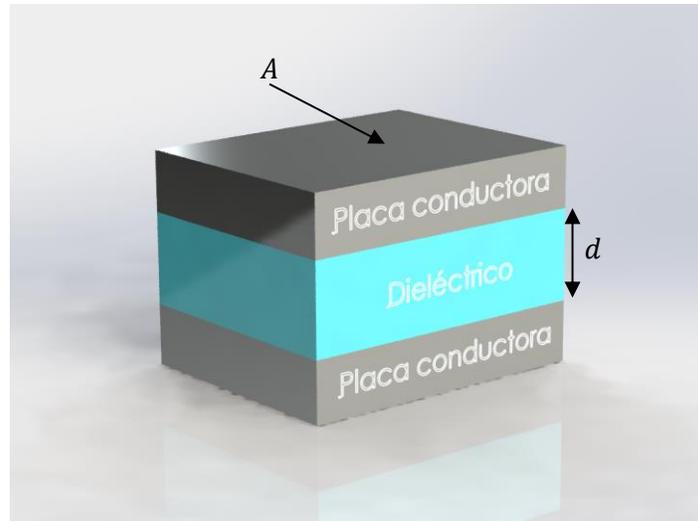


Figura 6.1 Capacitor de placas paralelas.

Para lograr un menor tamaño en los dispositivos manteniendo la capacitancia en niveles altos, el desafío principal es lograr una alta densidad de capacitancia.

El modelo de capacitor de placas paralelas puede usarse para calcular la capacitancia a escala de micrómetros. La arquitectura que frecuentemente se utiliza para micro capacitores, son los llamados electrodos interdigitados (EID) o capacitores interdigitados (CID), el cual se muestra en la figura 6.2. Esta estructura logra una alta capacitancia a tamaños micrométricos, ya que sus barras se pueden modelar como condensadores de placas paralelas en paralelo, que están separadas por una distancia G y el área de las placas es la multiplicación de los dedos, longitud L y el grosor del metal t . Excepto la capacitancia de la pared lateral entre los haces (dedos) que se mencionó anteriormente, también hay capacitancia marginal (C_f), que aparece en los bordes de los dedos y es altamente no lineal. La suma de ambos tipos proporciona la capacitancia general.

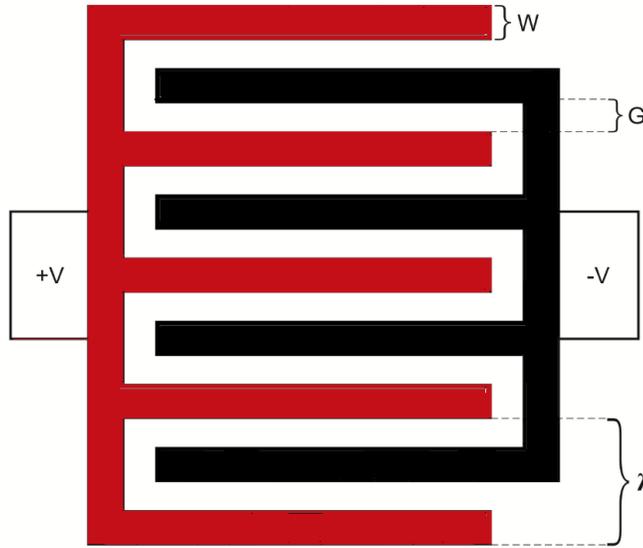


Figura 6.2 Capacitor interdigitado (CID) [64].

Varios modelos teóricos han sido desarrollados para CID, basados en técnicas llamadas: “conformal mapping” y capacitancia parcial [65].

La técnica de mapeo conforme nos permite analizar la distribución del potencial eléctrico dentro del IDC de la misma manera que en un condensador de placa paralela, pero en un nuevo sistema de coordenadas.

La solución de la capacitancia total entre los electrodos negativo y positivo del CID es igual a [64]:

$$C_{total} = (N - 3) \frac{C_I}{2} + 2 \frac{C_I C_E}{C_I + C_E}, \quad \text{for } N > 3 \quad (6.2)$$

Donde N representa el número de electrodos, donde C_I y C_E están dados por:

$$C_I = \epsilon_0 L \left(\frac{K(k_{I\infty})}{K(k'_{I\infty})} + (\epsilon_1 - 1) \frac{K(k_{I,1})}{K(k'_{I,1})} + \epsilon_S \frac{K(k_{I\infty})}{K(k'_{I\infty})} \right) \quad (6.3)$$

$$C_E = \epsilon_0 L \left(\frac{K(k_{E\infty})}{K(k'_{E\infty})} + (\epsilon_1 - 1) \frac{K(k_{E,1})}{K(k'_{E,1})} + \epsilon_S \frac{K(k_{E\infty})}{K(k'_{E\infty})} \right) \quad (6.4)$$

Donde $K(k)$ es la integral elíptica completa de primer tipo con módulo k y módulo complementario $k' = \sqrt{1 - k^2}$, $k_{I\infty} = \sin\left(\frac{\pi\sqrt{\eta}}{2}\right)$, $k_{E\infty} = \frac{2\sqrt{\eta}}{1+\eta}$, $\eta = \frac{2W}{\lambda}$, $\lambda = 2(W + G)$, ϵ_0 es la permitividad eléctrica del espacio del vacío, ϵ_1 es la permitividad eléctrica relativa de la capa superior y ϵ_S es la permitividad eléctrica relativa de el sustrato.

En la figura 6.3, se muestra la dependencia de la capacitancia en función de η , para el caso de la IDCs en un sustrato de silicio.

La figura 6.3 muestra claramente que el incremento de capacitancia depende del incremento de electrodos.

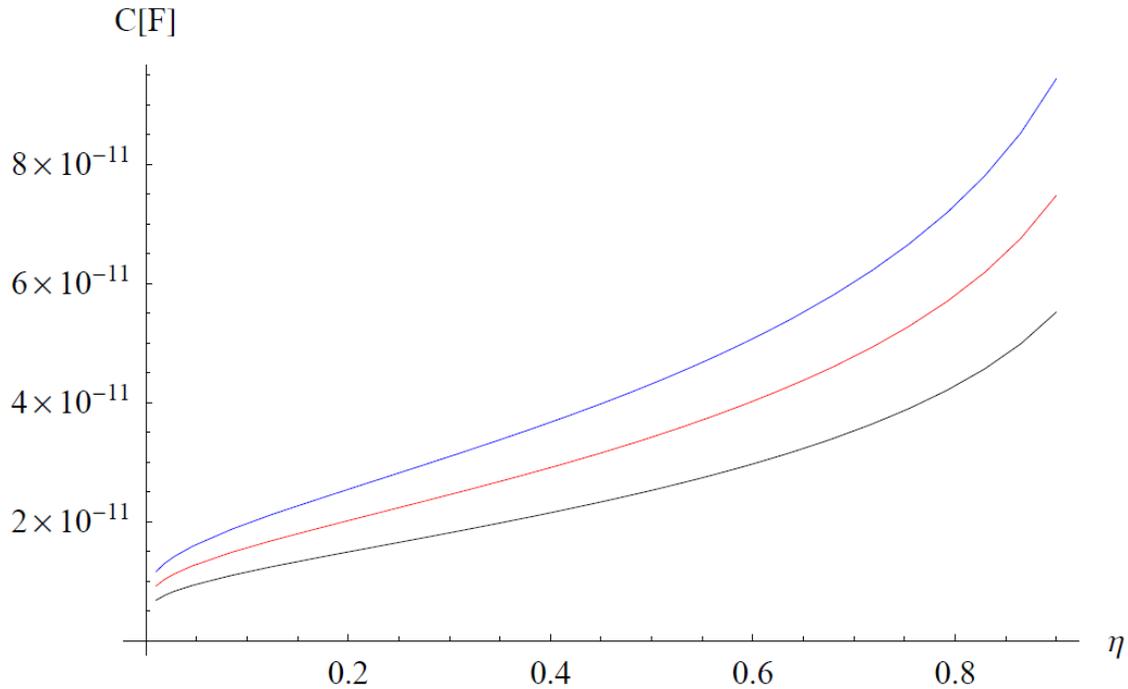


Figura 6.3 Capacitancia en función de η para $N = 32$ (*negro*), $N = 40$ (*rojo*) y $N = 50$ (*azul*). Se usaron $\epsilon_0 = 8.8 \times 10^{-12} \frac{\text{F}}{\text{m}}$, $L = 8 \times 10^{-3} \text{ m}$, $\epsilon_S = 11.7 \frac{\text{F}}{\text{m}}$, $\epsilon_1 = 1$ y $\lambda = 8 \times 10^{-6} \text{ m}$ [64].

El principal objetivo de este capítulo de la tesis fue desarrollar estructuras capacitivas para aplicaciones de biosensores y almacenamiento de energía generada por nanoantenas Seebeck. La contribución de este capítulo puede resumirse en los siguientes puntos:

7.2 Capacitor interdigitado evolutivo

7.2.1 Simulación numérica

7.2.2 Fabricación

7.2.3 Caracterización eléctrica

7.3 Capacitor espiral fractal

Simulación numérica

Fabricación

Caracterización eléctrica

6.2 Capacitor interdigitado evolutivo

Tomando en cuenta que se requieren condensadores con grandes valores de capacitancia y una de las alternativas para incrementar la capacitancia es reducir la distancia entre los electrodos, de acuerdo con la ecuación (6.1), por lo tanto, hemos realizado un estudio mediante el uso de las curvas de Bézier como método para establecer una geometría que puede ser moldeado, así como la aplicación de un algoritmo genético evolutivo como método para evolucionar la geometría hasta alcanzar la condición óptima de máxima capacitancia.

En la figura 6.4 a) se muestra el diseño de un capacitor interdigitado rectangular, en el cual se aplicó el algoritmo genético evolutivo, como resultado se obtuvo la geometría que se muestra en la figura 6.4 b) capacitor interdigitado evolutivo.

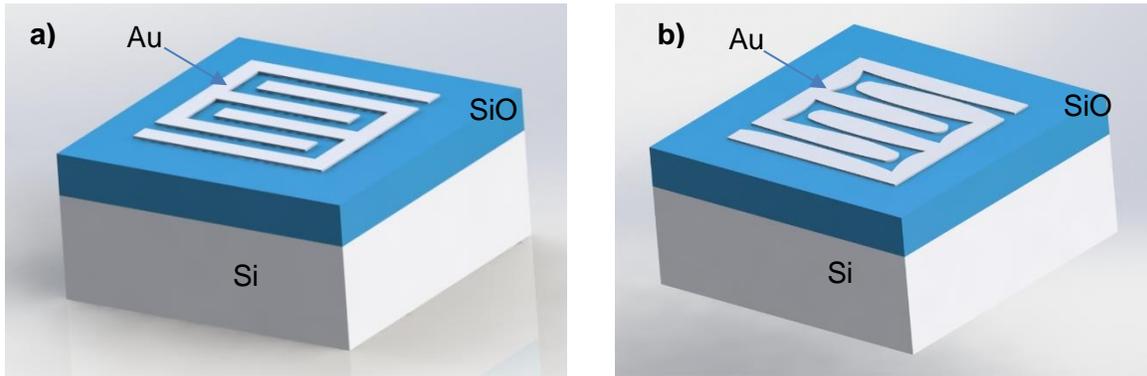


Figura 6.4 Diseño de capacitor interdigitado rectangular y b) diseño de capacitor interdigitado evolutivo. Los materiales utilizados son: oro (Au), dióxido de silicio (SiO_2) y silicio (Si).

6.2.1 Simulación numérica

Se realizaron simulaciones utilizando el método de elemento finito con el software COMSOL Multiphysics, para el cálculo de la capacitancia, se utilizó el módulo de corriente alterna/corriente directa (AC/DC), específicamente el estudio de la física de electrostática. El modelo está definido por las ecuaciones que gobiernan los dominios y las condiciones de frontera.

- Ecuaciones de dominio

$$-\nabla \cdot (\epsilon_0 \epsilon_r \nabla V) = \rho \quad (6.5)$$

Donde la densidad de carga (ρ) y el potencial eléctrico (V), son conectados vía la ecuación de Poisson (6.5). ϵ_0 es la permitividad del vacío, ϵ_r es la permitividad relativa. El campo eléctrico y el desplazamiento eléctrico puede obtenerse del gradiente de V :

$$E = -\nabla V \quad (6.6)$$

$$D = \varepsilon_0 \varepsilon_r E \quad (6.7)$$

- Condiciones de frontera

Las condiciones de frontera que son aplicadas a los condensadores propuestos son referentes al potencial eléctrico, el ΔV entre los dos electrodos es de 1 volt. Un electrodo se configuró con un potencial de 1 V y el otro es tierra. Para el dominio en el cual se encuentra inmersa la estructura se aplica una superficie de carga igual a cero:

$$n \cdot D = 0 \quad (6.8)$$

- Cálculo de la capacitancia

La capacitancia fue calculada utilizando

$$C = Q/V \quad (6.9)$$

Para más información sobre el proceso de simulación numérica, se recomienda revisar el capítulo 2 de este documento.

En la figura 6.5 tenemos el potencial eléctrico aplicado en la simulación numérica en 3D de los capacitores interdigitados, le hemos aplicado 1 V en las terminales.

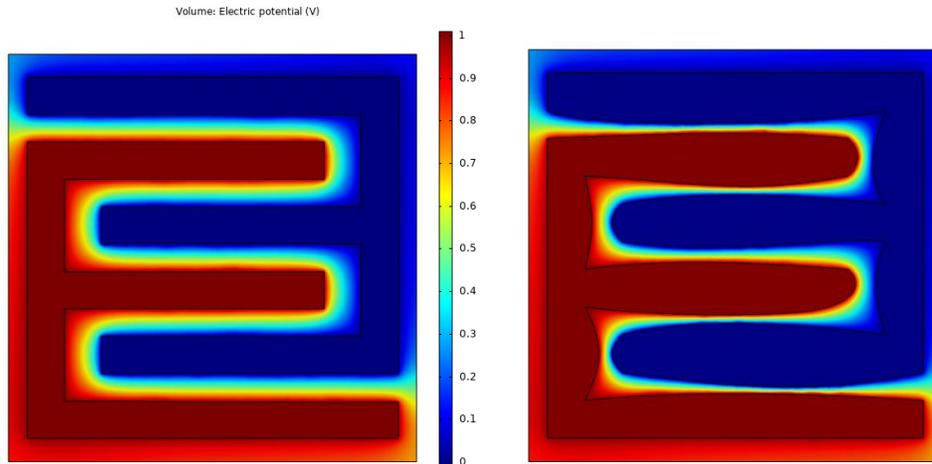


Figura 6.5 simulación del potencial eléctrico a) capacitor interdigitado rectangular y b) capacitor interdigitado evolutivo.

Utilizando simulación numérica se obtuvo el valor y la distribución de campo eléctrico generada por las estructuras capacitivas, en la figura 6.6 podemos observar el efecto de la geometría en el campo eléctrico.

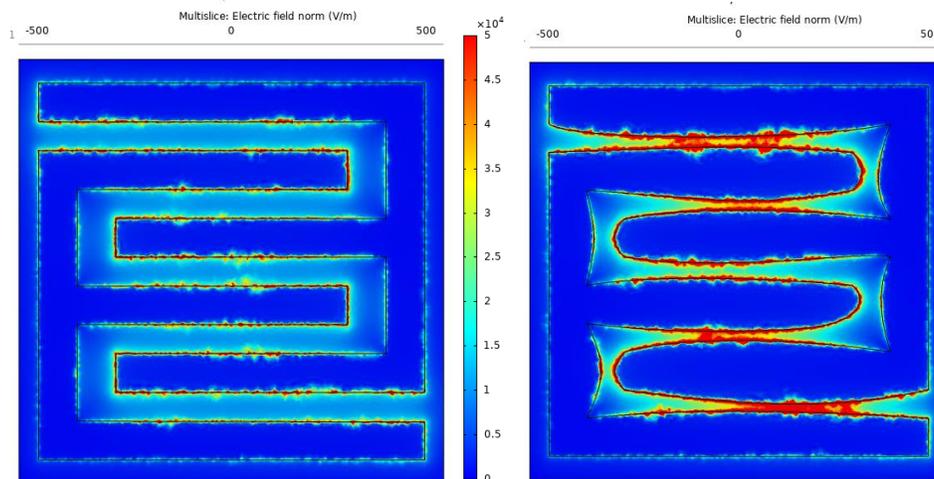


Figura 6.6 Distribución de la norma de campo eléctrico, a) capacitor interdigitado rectangular y b) capacitor interdigitado evolutivo.

En la tabla 6.1 se puede observar las capacitancias obtenidas para los capacitores en la simulación, es importante mencionar, que para este caso se aplicó un potencial eléctrico de 1 V de corriente directa, la capacitancia para la estructura con algoritmo genético evolutivo fue de 24 % mayor que el capacitor interdigitado rectangular.

Tipo de capacitor	Capacitancia por unidad de área
Capacitor interdigitado rectangular	6.13 <i>pF</i> / 975000 μm^2
Capacitor interdigitado evolutivo	8.06 <i>pF</i> / 975000 μm^2

Tabla 6-1 Capacitancias por unidad de área para un potencial eléctrico aplicado de 1V de corriente directa.

6.2.2 Fabricación

Para la fabricación de los sistemas capacitivos se utilizó la técnica de litografía de haz de electrones mediante el uso del equipo Inspect F50. Los principales pasos que se siguieron para realizar la litografía son los siguientes:

- Diseño de geometría (Autocad)
- Limpieza de sustrato
- Depósito de resina
- Uso del software Elphy Quantum
- Revelado de muestra
- Metalización mediante evaporación térmica
- Visualización de resultados (Microscopio óptico y SEM)

El diseño del capacitor se realizó utilizando el software AutoCAD, en la figura 6.7, se muestran los diseños y las dimensiones de los dispositivos que se fabricaron.

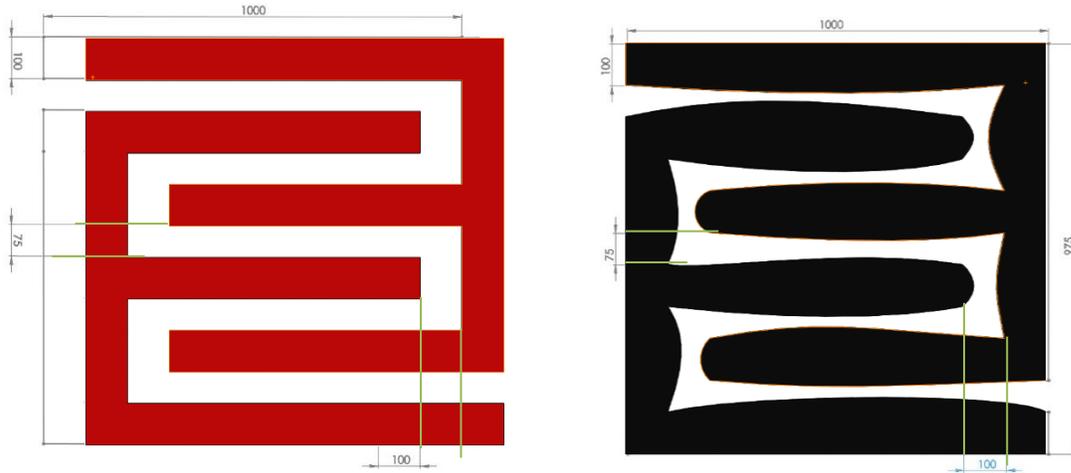


Figura 6.7 a) Dimensiones del capacitor interdigitado rectangular y b) Dimensiones del capacitor interdigitado evolutivo. Unidades en micrómetros.

El material que se utilizó para fabricar las estructuras capacitivas es oro (Au), con un espesor de 50 nanómetros, en el capítulo 3 se explica con más detalle el proceso de fabricación y depósito de material.

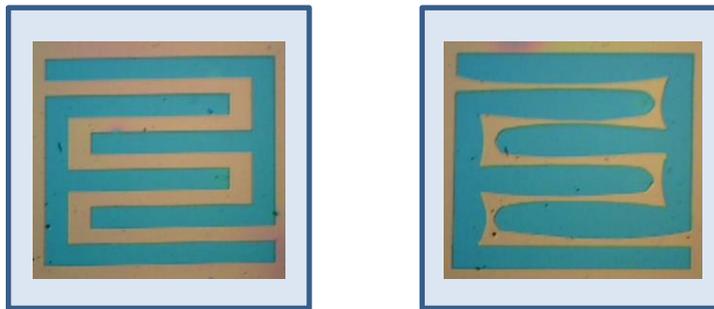


Figura 6.8 Imágenes obtenidas con el microscopio óptico de las litografías de los capacitores.

6.2.3 Caracterización eléctrica

Para realizar las mediciones de capacitancia se utilizó el equipo de la marca Keithley, modelo 4200 SCS, con este instrumento es posible obtener las curvas capacitancia-frecuencia (C-F) y capacitancia-voltaje (C-V).

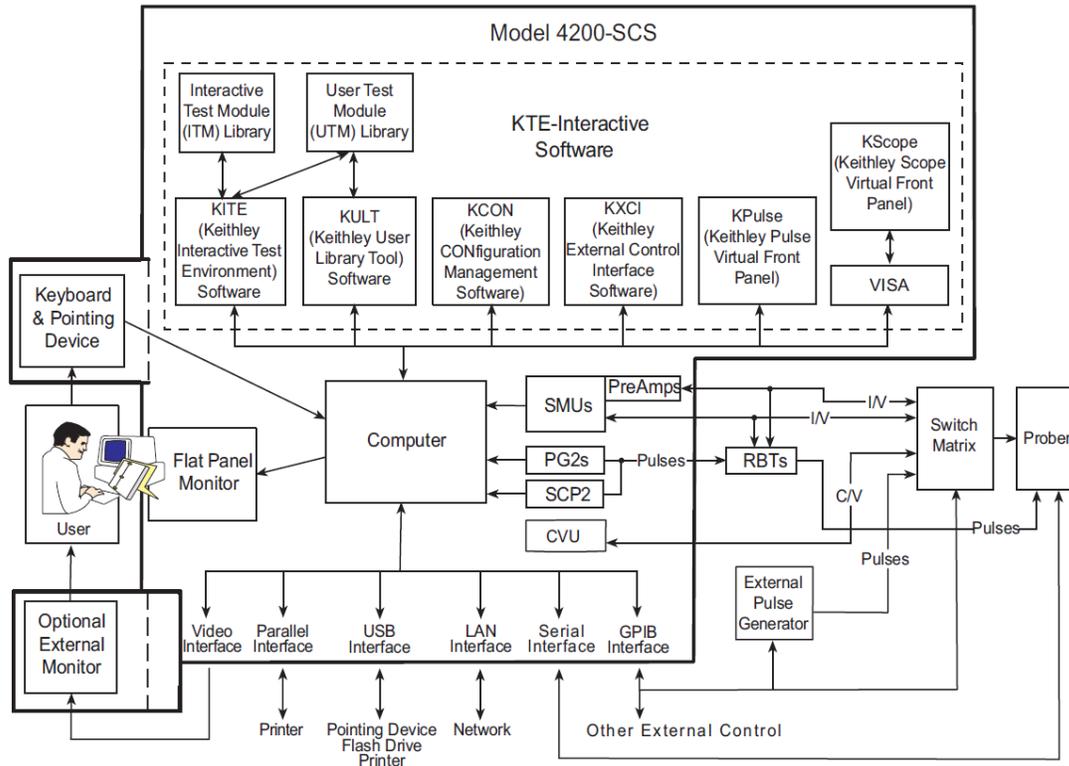


Figura 6.9 Esquema de los componentes que conforman al instrumento de medición keithley 4200 SCS [66].

Las mediciones fueron realizadas utilizando un sistema de puntas micrométricas, la configuración de fue de 4 cables con la finalidad de eliminar el ruido que puede ser causado por las puntas de prueba.

En la figura 6.10 se muestra el esquema de las mediciones de capacitancia.

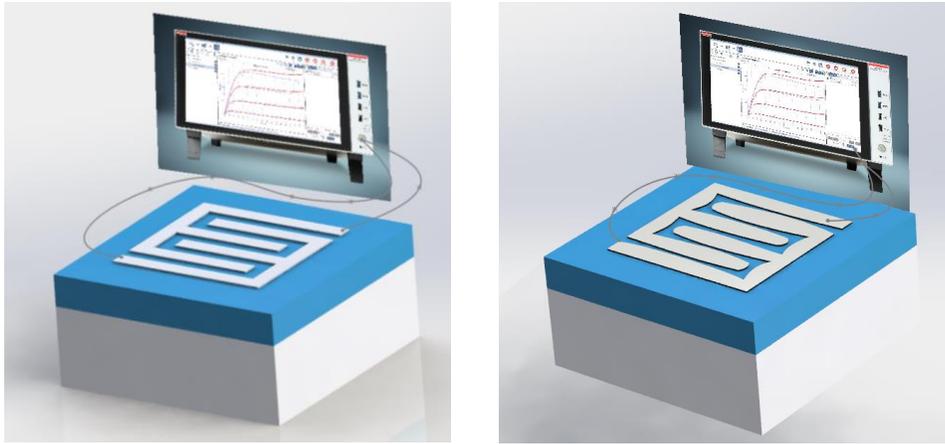


Figura 6.10 Esquema del arreglo utilizado para realizar las mediciones con el equipo keithley 4200 SCS.

El parámetro de nuestro interés es la capacitancia, en la figura 6.11 podemos observar que el capacitor interdigitado evolutivo tiene mayor capacitancia que el capacitor interdigitado rectangular, es importante mencionar que el área total efectiva es la misma para los dos casos.

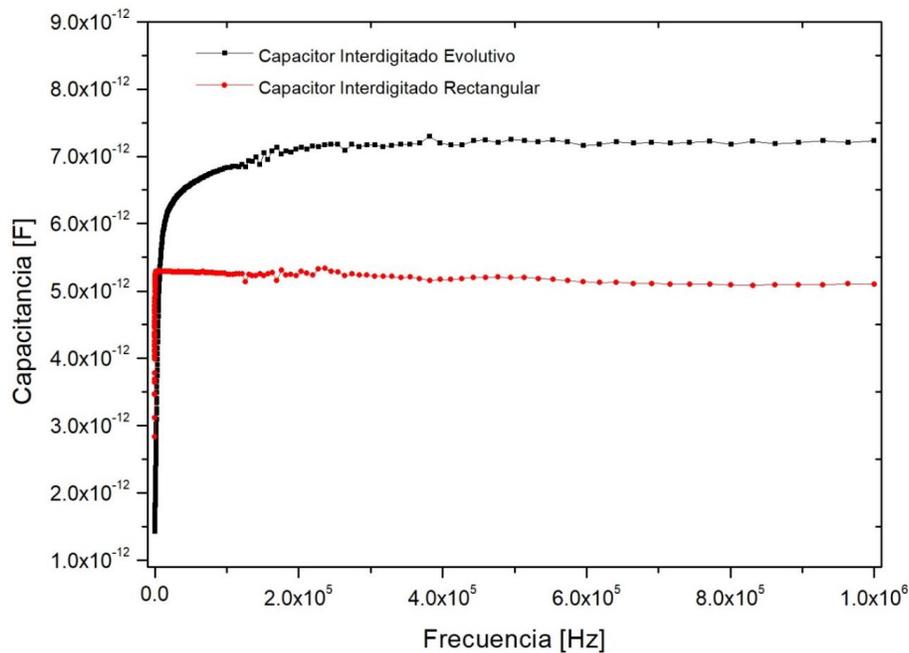


Figura 6.11 Mediciones de capacitancia en función de la frecuencia.

El rango de frecuencias en el que se midió fue de 100 Hz hasta 1MHz, se puede observar que la respuesta de capacitancia corresponde a los resultados de la simulación y de acuerdo con la teoría reduciendo la distancia entre los electrodos es posible aumentar la capacitancia, con el diseño del capacitor interdigitado evolutivo, hemos aumentado 29% el valor de la capacitancia.

Otro de los parámetros de interés, es la capacitancia por unidad de área, en ambos casos tenemos un área efectiva de $975\ 000\ \mu m^2$. En la tabla 6.2 se muestran los valores de capacitancia por área para un valor de frecuencia de 500 kHz.

Tipo de capacitor	Capacitancia por unidad de área
Capacitor interdigitado rectangular	$5.2\ pF / 975000\ \mu m^2$
Capacitor interdigitado evolutivo	$7.25\ pF / 975000\ \mu m^2$

Tabla 6-2 Capacitancias por unidad de área para una frecuencia de 500 kHz

Es importante mencionar que al aplicar el algoritmo evolutivo hemos modificado la geometría, para ser más específicos, la distancia entre los electrodos es menor, sin embargo, dicha distancia es obtenida utilizando simulación numérica lo cual nos ayuda a optimizar nuestras geometrías y de esta manera fabricar nuestros capacitores asegurando la mejor respuesta en capacitancia.

6.3 Capacitor espiral fractal

Con la finalidad de mejorar la respuesta en capacitancia, hemos propuesto otras geometrías, tomando en cuenta trabajos previamente publicados [67–69], investigadores utilizan geometrías fractales para aumentar la respuesta de capacitancia y otros trabajos han propuesto el uso de nanopartículas para mejorar la sensibilidad de los dispositivos [70].

Los objetos fractales se describen mediante una formulación matemática específica que sufre una iteración recursiva que genera el fractal que es invariante a escala y autosimilar. Se han presentado varios diseños de geometría fractal para mejorar la capacitancia por unidad de área [71]. Los condensadores basados en geometría fractal como Hilbert [72],

Peano, Kosh, Sierpinsky, etc., son eficientes en el área, pero desafortunadamente tienen baja capacitancia. Por ejemplo, la figura 6.12 muestra los generadores de la geometría fractal de Hilbert, los cuales hemos utilizado para generar nuestra geometría espiral fractal.



Figura 6.12 Generadores de la geometría fractal del capacitor espiral fractal.

Simultáneamente, para la determinación y caracterización de los sistemas capacitivos nanoestructurados, se han desarrollado técnicas de nano-fabricación (litografía de haz de electrones) en diferentes trabajos que permiten el control nanométrico de los nanocapacitores. Por esta razón, en este trabajo presentamos la nano-fabricación y caracterización de un capacitor espiral fractal con nanopartículas de oro. Los resultados muestran que los capacitores fractales presentan un aumento en la capacitancia cuando se depositan en él nanopartículas de oro. Es de interés señalar, que los resultados se han verificado a través de simulaciones numéricas con el software COMSOL, demostrándose que la eficiencia de capacitancia puede incrementarse mediante la combinación de geometría fractal y la distribución de nanopartículas. Las simulaciones numéricas usan como referencia la ecuación que se presenta a continuación:

$$C = \frac{2W_e}{\Delta V^2} \quad (6.10)$$

siendo W_e , la energía electrostática almacenada y V el potencial eléctrico entre las placas [4]. similarmente, el software calcula W_e usando la siguiente formula:

$$W_e = \int_{\Omega} (D \cdot E) d\Omega \quad (6.11)$$

Donde D es el desplazamiento eléctrico, E es el campo electrostático y Ω es el dominio de integración.

De acuerdo con las ecuaciones (6.10) y (6.11), donde la capacitancia es directamente proporcional al campo electrostático, utilizando nanopartículas es posible aumentar el campo electrostático y por lo tanto aumentamos la capacitancia.

En la figura 6.13 se muestra la geometría final del capacitor espiral fractal y sus dimensiones.

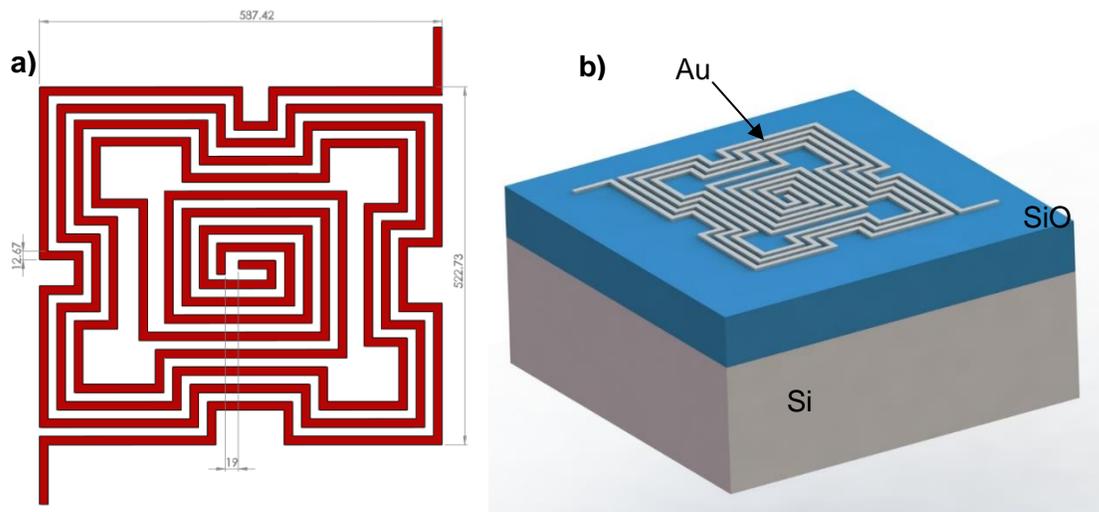


Figura 6.13 a) Dimensiones del capacitor espiral fractal, b) diseño de capacitor espiral fractal. Los materiales utilizados son: oro (Au), dióxido de silicio (SiO_2) y silicio (Si). El material que se utilizó para fabricar las estructuras capacitivas es oro (Au), con un espesor de 50 nanómetros.

6.3.1 Simulación numérica

Al igual que en el apartado anterior se realizaron simulaciones utilizando el método de elemento finito con el software COMSOL Multiphysics, el modelo está definido por las ecuaciones que gobiernan los dominios y las condiciones de frontera. Sin embargo, debido

a que en estas simulaciones utilizamos nanopartículas metálicas, fue necesario implementar condiciones de frontera que modelen dichas nanopartículas.

Para modelar las nanopartículas se utilizó la condición de frontera de potencial flotante:

$$V = V_0 \quad (6.12)$$

$$\int_{\partial\Omega} (\mathbf{D} \cdot \mathbf{n}) dS = Q_0, \quad (6.13)$$

donde Ω representa los límites y \mathbf{n} se refiere a la normal a la superficie.

Resultados de simulación numérica

En el proceso de simulación numérica es importante considerar el tiempo de cómputo y los recursos con que se cuenta, debido a que nuestra geometría requiere demasiados recursos de cómputo, hemos optado por simplificar el estudio de las estructuras capacitivas, para esto se ha propuesto un capacitor de placas planas paralelas, tal como se muestra en la figura 6.14.

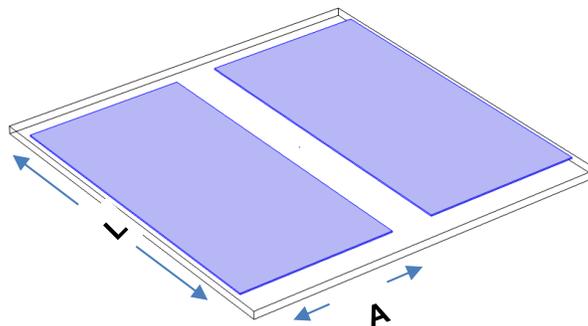


Figura 6.14 Capacitor de dos placas plana paralelas, espesor = 50 nm, L = 12um, A = 6um.

Durante la caracterización eléctrica se realizó un estudio eléctrico utilizando el módulo de electrostática del software COMSOL Multiphysics para la determinación de la constante capacitiva en función de los parámetros geométricos.

6.3.2 Estudio de la capacitancia variando la distancia entre las placas

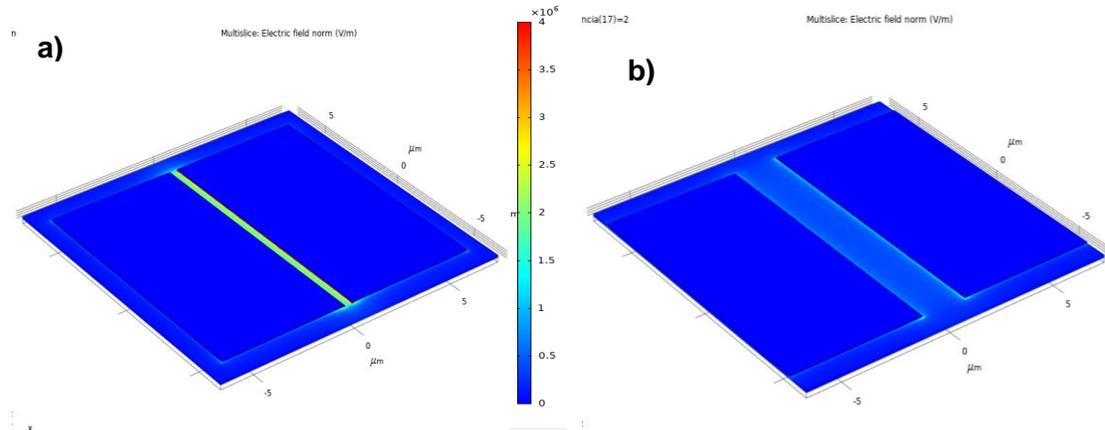


Figura 6.15 Norma del campo eléctrico. a) Capacitor con una distancia entre placas de $0.4 \mu\text{m}$, b) Capacitor con una distancia entre placas de $2 \mu\text{m}$.

De los resultados obtenidos se infiere que la capacitancia del sistema varia como función de la distancia entre las placas paralelas, tal como se describe en la ecuación 7.14.

$$C = \epsilon_0 \epsilon_r \frac{A}{d} \quad (6.14)$$

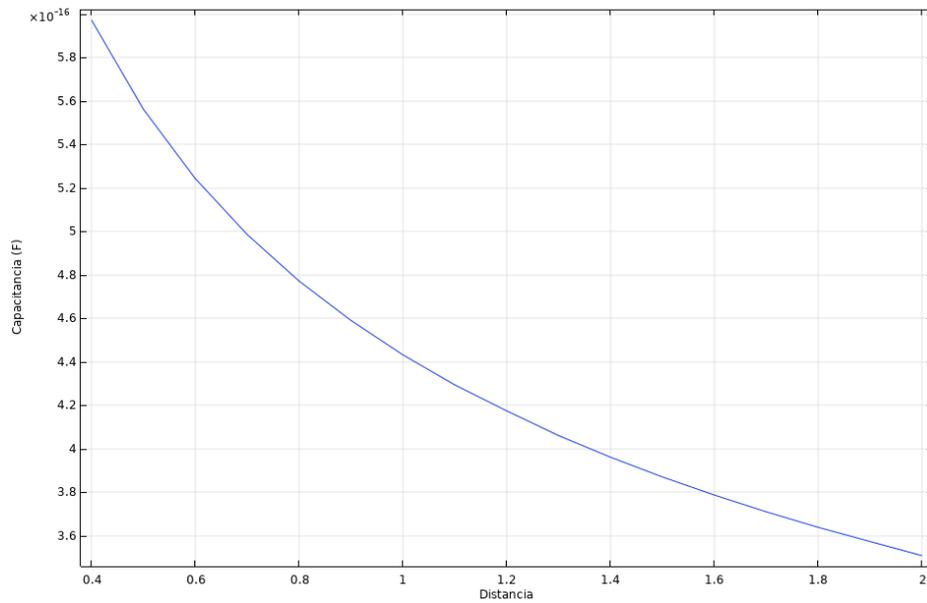


Figura 6.16 Gráfica del capacitor de dos placas, con diferentes distancias entre las placas, desde 0.4 μm hasta 2 μm .

6.3.3 Estudio de la capacitancia variando el espesor de las placas

El espesor del material depositado es muy importante ya que el área transversal de las placas, en este caso, es proporcional a la variable A que aparece en la ecuación 3.

a)

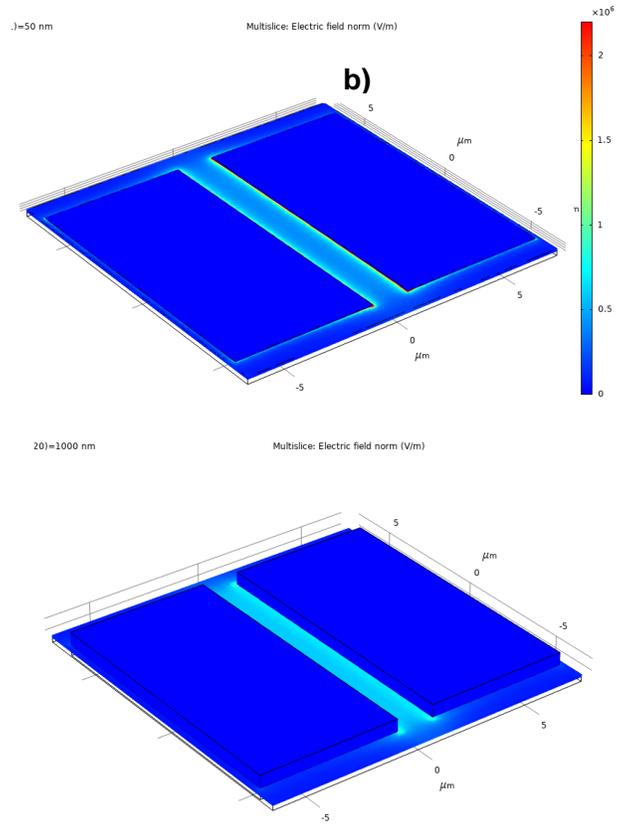


Figura 6.17 Norma del campo eléctrico. a) Capacitor con un espesor de 50 nm, b) Capacitor con un espesor de 1 μm.

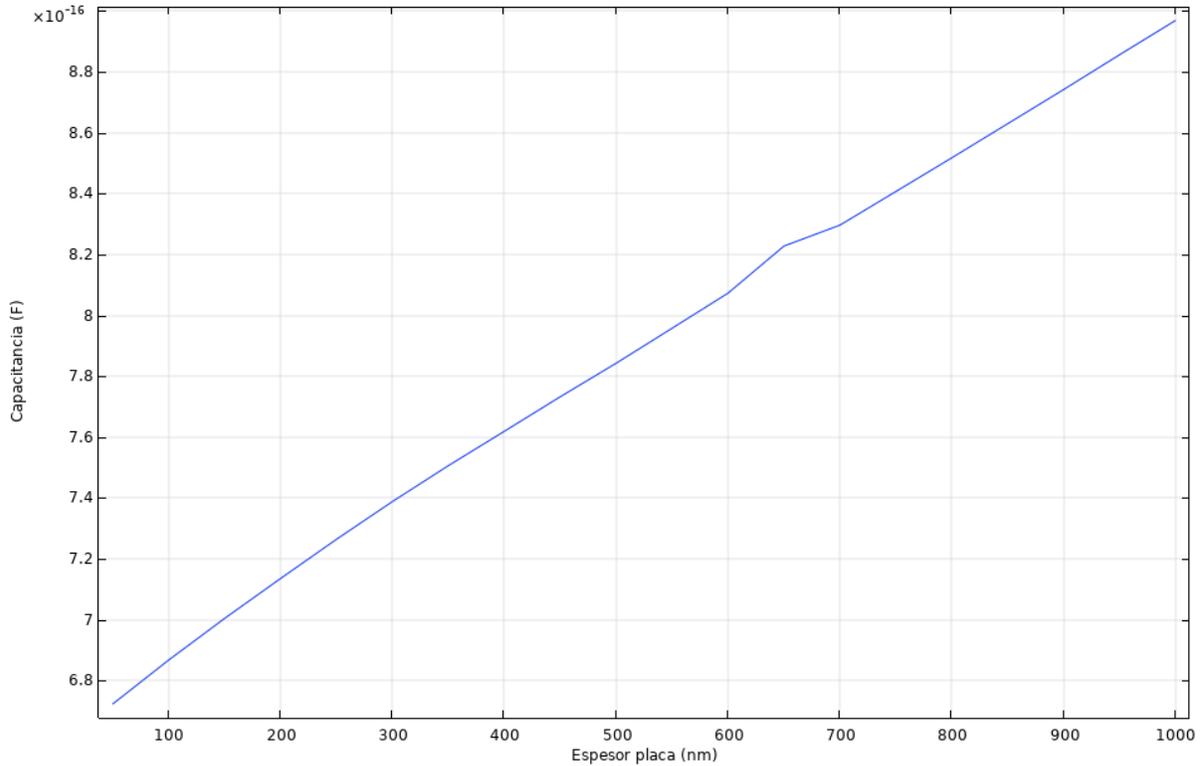


Figura 6.18 Gráfica del capacitor de dos placas, con diferentes espesores de material depositado.

Podemos inferir de la figura 6.18 y tal como se esperaba, la respuesta en capacitancia en capacitancia es casi lineal respecto a al aumento de espesor en las placas del capacitor.

6.3.4 Estudio de la capacitancia de placas planas paralelas con nanopartícula de oro y variando el tamaño

En esta etapa se analizó el efecto de la nanopartícula al colocarla entre las placas planas metálicas, la respuesta en campo eléctrico se puede observar en la figura 6.19 y para diferentes tamaños de nanopartícula es posible ver su comportamiento en la figura 6.20, cabe mencionar que se considera nanopartícula a estructuras con dimensiones menores a 100 nm, sin embargo para fines de demostración del comportamiento de la capacitancia vs el tamaño de la nanopartícula, utilizamos tamaños de 1nm hasta 800 nm.

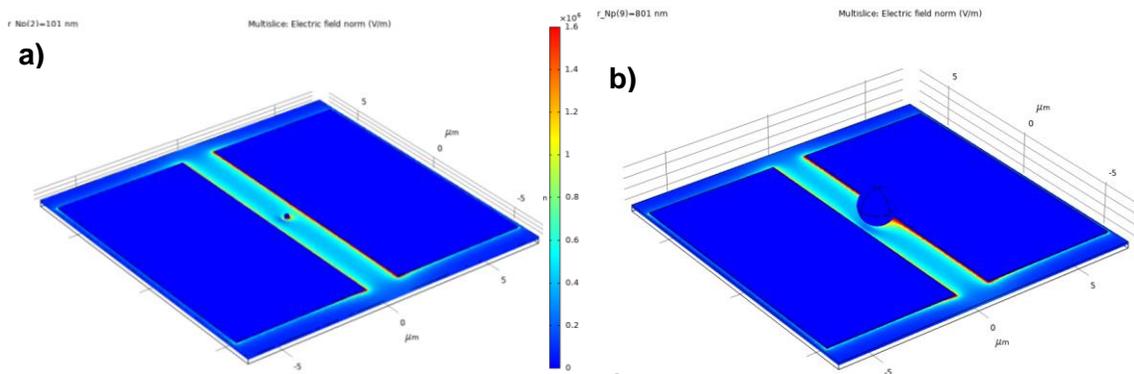


Figura 6.19 Norma del campo eléctrico. a) Capacitor con una nanopartícula en el centro de las placas, radio de la Np =100 nm, b) Capacitor con una nanopartícula de radio = 800 nm.

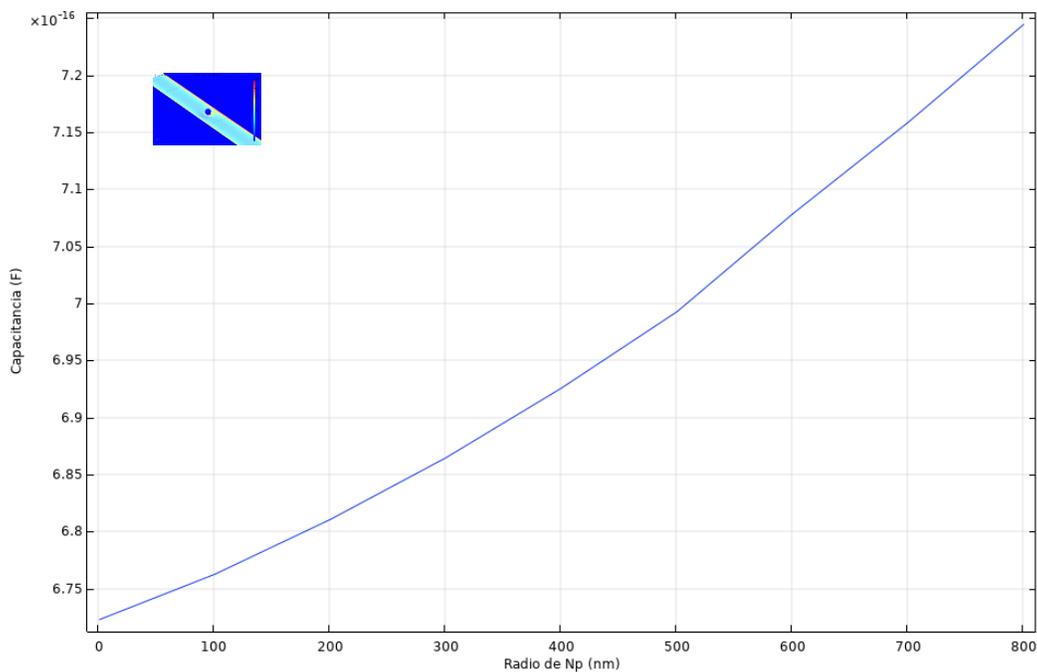


Figura 6.20 Gráfica de la capacitancia para diferentes tamaños de nanopartícula.

Aumentando el tamaño de nanopartícula podemos aumentar el campo eléctrico en dichas nanoestructuras, de acuerdo con la ecuación 2 y 3, si aumentamos el campo eléctrico es posible aumentar la capacitancia.

En la imagen 6.21 se muestra la distribución de la norma de campo eléctrico para nanopartícula de oro con un radio de 15 nm. Podemos observar que las líneas de campo eléctrico entre las placas paralelas interactúan con la nanopartícula generando un campo eléctrico en la misma nanopartícula y recordando la ecuación 6.10 y 6.11 podemos concluir que si aumentamos el campo eléctrico es posible aumentar la capacitancia.

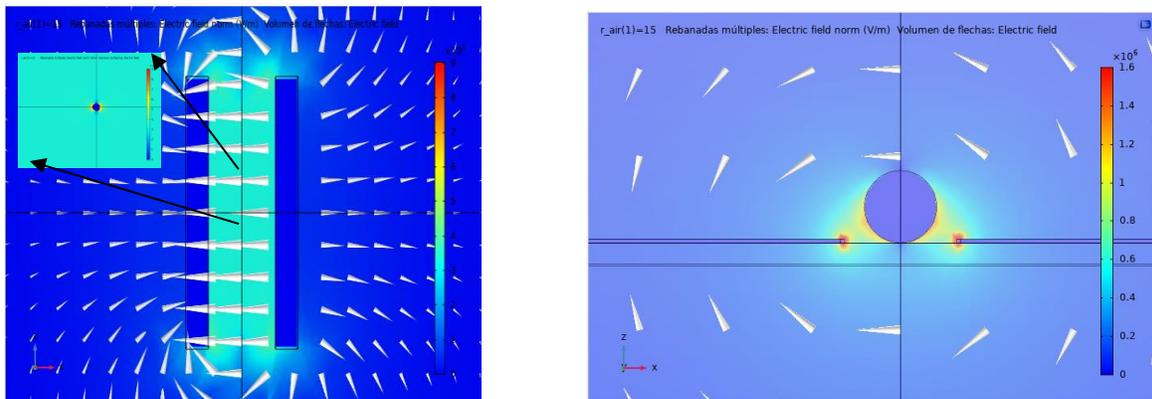


Figura 6.21 Distribución de la norma de campo eléctrico para nanopartícula de oro entre placas metálicas sometidas a un potencial eléctrico.

6.3.5 Estudio de la capacitancia de placas con diferente cantidad de nanopartículas de oro

Otro análisis que se realizó fue el efecto de aumentar la cantidad de nanopartículas, en la figura 6.22 se muestra el comportamiento de la capacitancia en función del número de nanopartículas metálicas, podemos ver que el resultado tiene tendencia lineal respecto a la cantidad de nanopartículas utilizadas.

2)=11

Rebanadas múltiples: Electric field norm (V/m)

(7)=61

Rebanadas múltiples: Electric field norm (V/m)

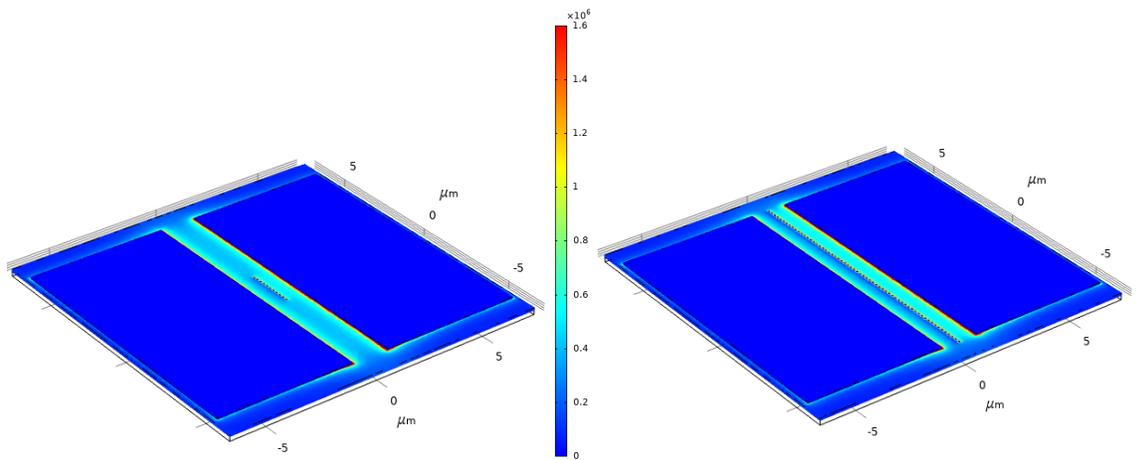


Figura 6.22 Norma del campo eléctrico. a) Capacitor con 11 nanopartículas en el centro de las placas, radio de la Np =100 nm, b) Capacitor con 61 nanopartículas de radio = 100 nm.

En la simulación numérica se realizó un estudio desde una nanopartícula hasta 60 nps. Dando como resultado la gráfica mostrada en la figura 6.23.

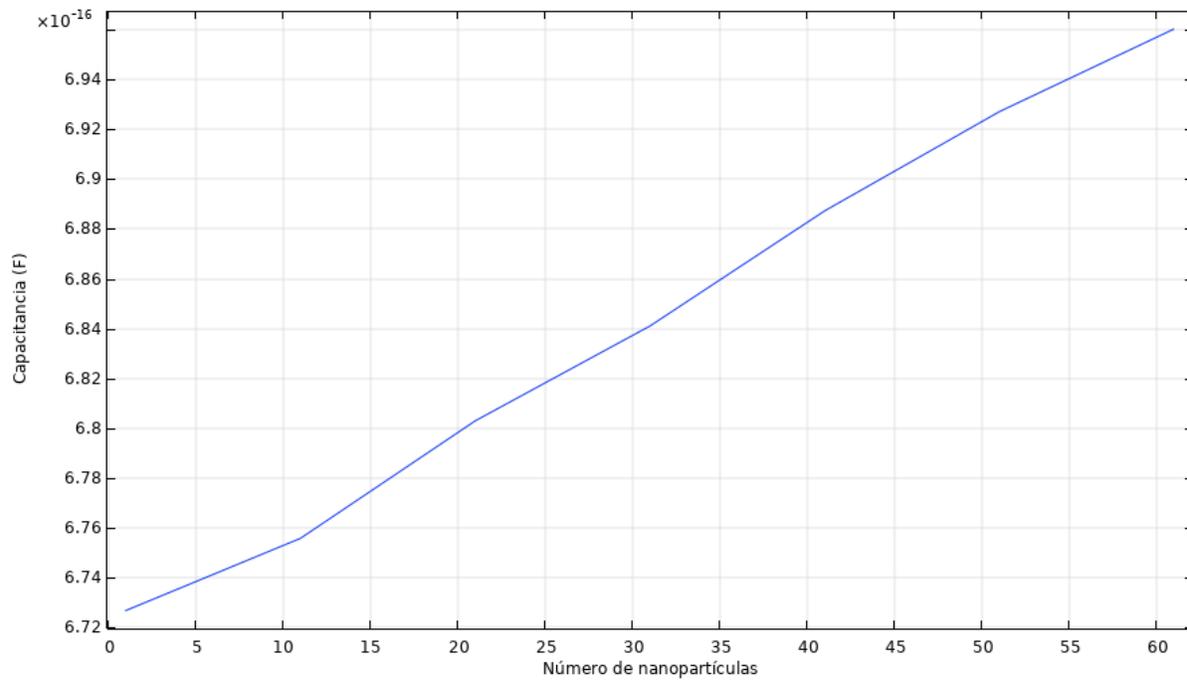


Figura 6.23 Gráfica de la capacitancia para diferentes cantidades de nanopartículas.

La capacitancia aumenta en función de la cantidad de nanopartículas, sin embargo, es importante mencionar que en la parte experimental es difícil controlar la distribución y cantidad de las nanopartículas, por lo tanto, los cálculos nos sirven para tener una aproximación de la respuesta que se tendrá en la aplicación real.

Ahora que se tiene un estudio de diferentes parámetros en los capacitores, se continuó con las simulaciones numéricas para el capacitor espiral fractal de nuestro interés.

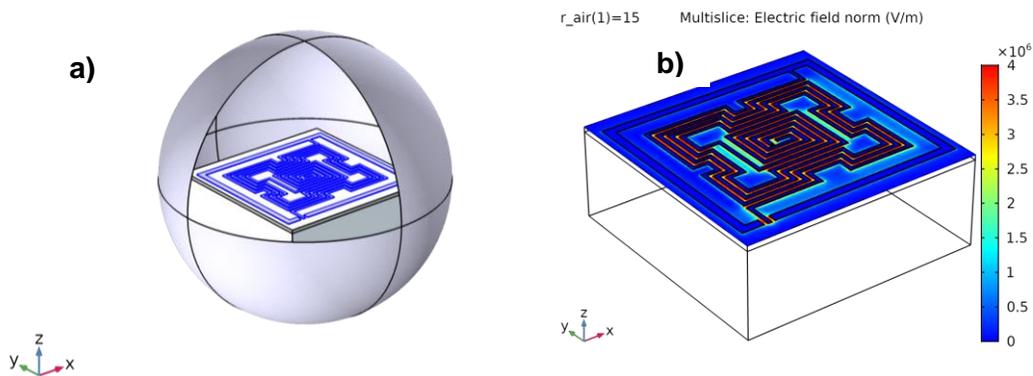


Figura 6.24 a) Diseño del modelo geométrico para realizar la simulación numérica en COMSOL Multiphysics, b) Norma del campo eléctrico, geometría sobre un sustrato de Si con espesor de $500 \mu\text{m}$ y con una capa de SiO_2 con espesor de 300nm .

6.3.6 Fabricación

Al igual que el capacitor descrito el apartado 7.2 de esta tesis, en la fabricación se utilizó la técnica de litografía de haz de electrones mediante el uso del equipo Inspect F50.

En la figura 6.25 se observa el capacitor espiral fractal fabricado, en los extremos de los electrodos se aumentó el tamaño de la pista para facilitar las mediciones experimentales.

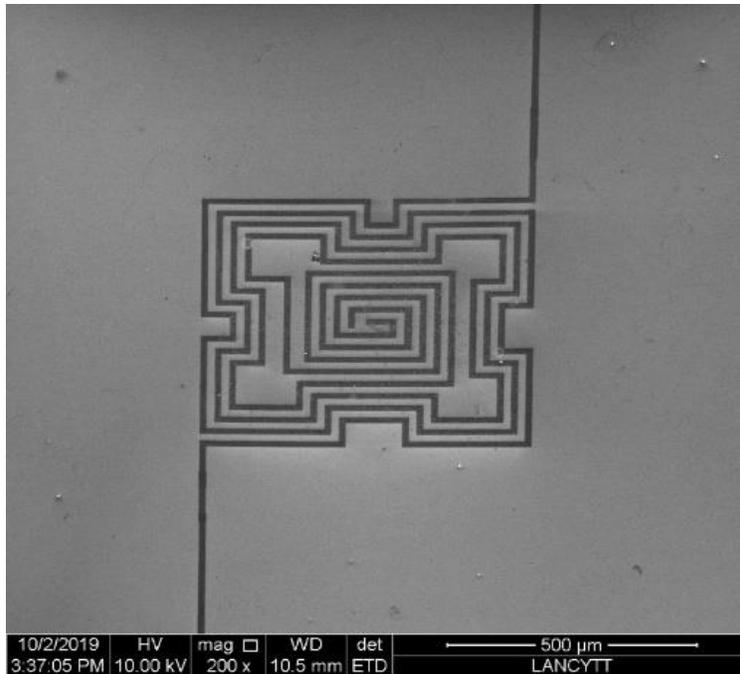


Figura 6.25 Imagen SEM del capacitor fabricado por litografía de haz de electrones, material oro (Au), sin nanopartículas.

Las dimensiones de los electrodos del capacitor espiral fractal son: 12.6 μm de ancho y 50 nm de espesor, tienen una separación de 13 μm . Para más detalles de las dimensiones se puede revisar la figura 6.13.

De acuerdo con lo que se propuso, fue utilizar nanopartículas para aumentar la respuesta de nuestro capacitor, por lo tanto, en la siguiente imagen se muestran las nanopartículas de oro que fueron depositadas en la microestructura capacitiva. Los tamaños de las nanopartículas son aproximadamente de 100 nanómetros. Dichas nanopartículas son comerciales, en este trabajo no está involucrado el proceso de síntesis. Las nanopartículas se caracterizaron morfológicamente con un microscopio electrónico de barrido (FEI modelo Inspect F50).

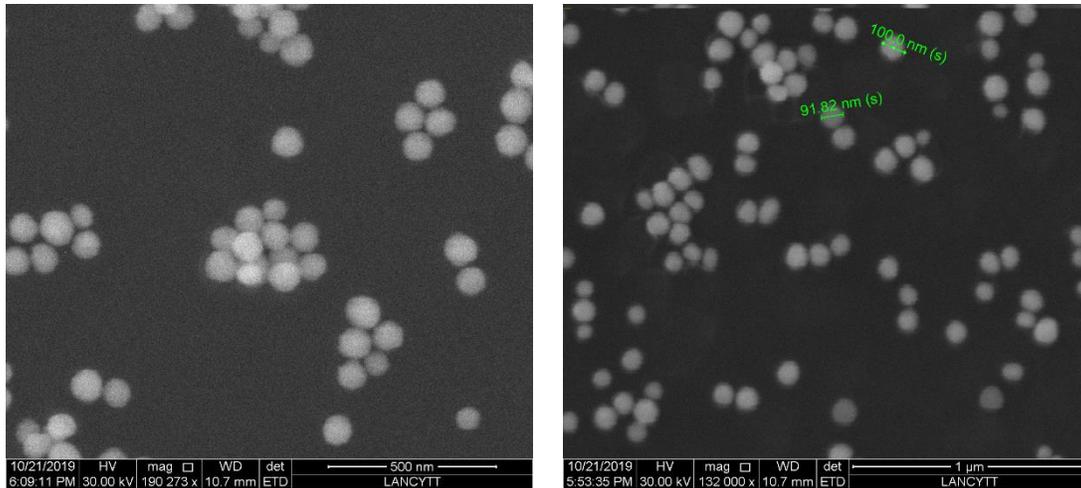
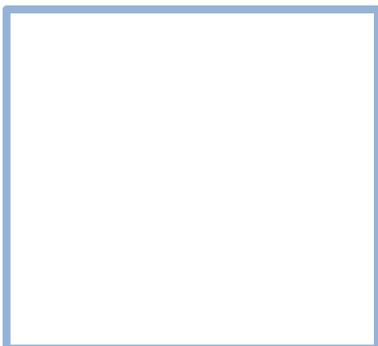


Figura 6.26 Imagen SEM de las nanopartículas de oro (Au)

El depósito de las nanopartículas en el capacitor se realizó utilizando una micropipeta, primero se depositó una gota y se dejó secar por tres horas, de esta manera aseguramos que las nanopartículas queden en el área de nuestro interés, sin embargo, este método nos genera dudas, ya que la solución en la que se encuentra disueltas las nps, también deja residuos en la superficie del dispositivo. Se prepararon varias muestras con la finalidad de tener varias mediciones, pruebas de repetibilidad y reproducibilidad.

En la siguiente figura se puede observar los resultados del depósito de nanopartículas.



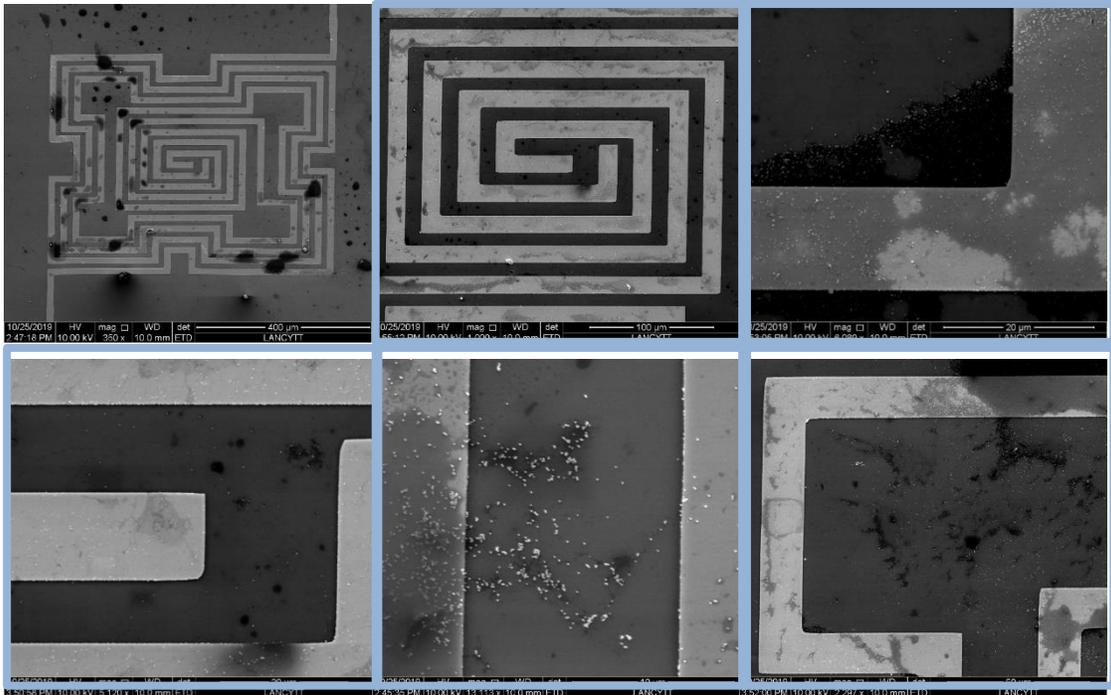


Figura 6.27 Imágenes SEM del capacitor con NPs de Au.

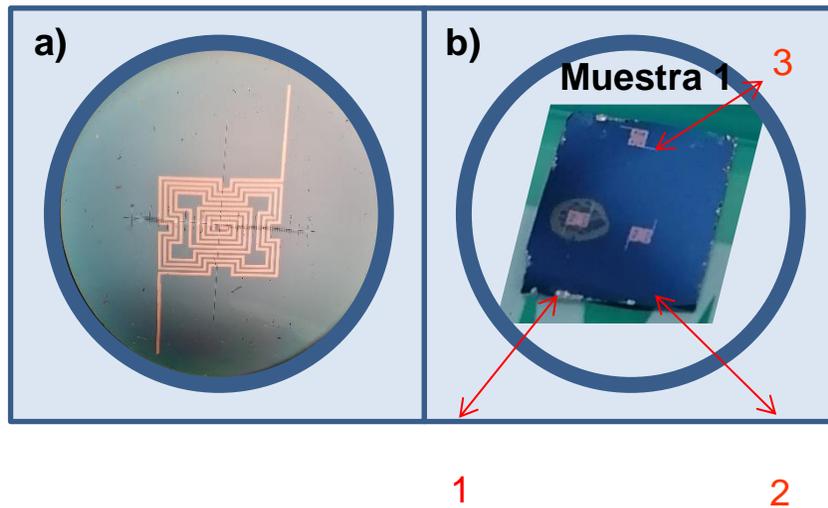


Figura 6.28 a) Imagen obtenida con el microscopio óptico del micro capacitor. b) Muestra 1 con 3 capacitores, capacitor 1 con nps de Au y capacitor 2 y 3 sin nps.

En la figura 6.28, 6.29 y 6.30 se muestran los capacitores fabricados, posteriormente se mandaron a caracterizar a la universidad de Texas, ya que ellos cuentan con un instrumento para obtener las curvas de capacitancia respecto a la frecuencia y voltaje.

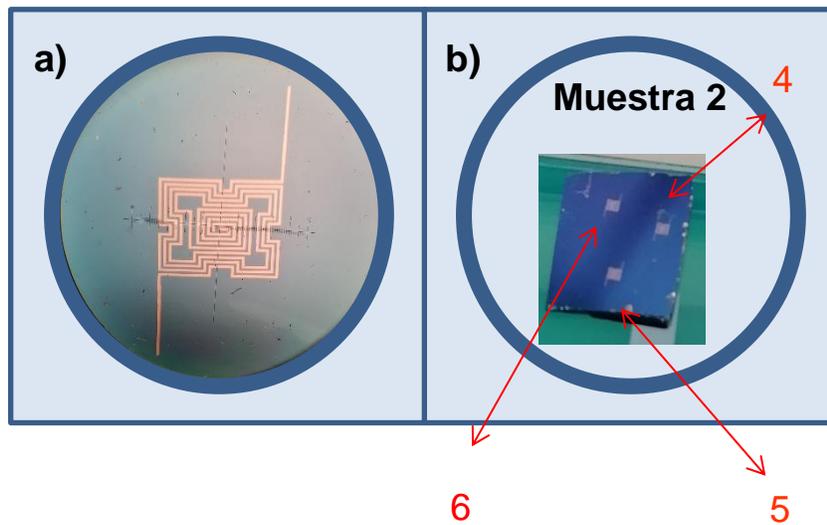


Figura 6.29 a) Imagen obtenida con el microscopio óptico del micro capacitor. b) Muestra 2 con 3 capacitores, capacitor 4 con nps de Au y capacitor 5 y 6 sin nps.

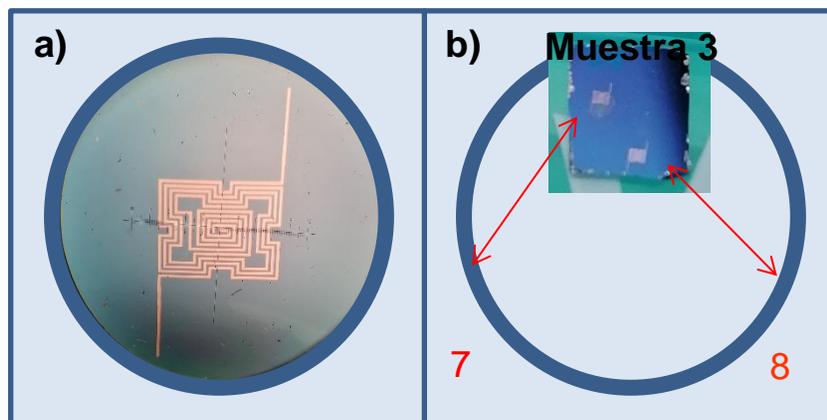


Figura 6.30 a) Imagen obtenida con el microscopio óptico del micro capacitor. b) Muestra 3 con 2 capacitores, capacitor 7 con nps de Au y capacitor 8 sin nps.

6.3.7 Caracterización

Al igual que en el capacitor evolutivo, para realizar las mediciones de capacitancia del capacitor espiral fractal se utilizó el equipo de la marca Keithley, modelo 4200 SCS, con

este instrumento es posible obtener las curvas capacitancia-frecuencia (C-F) y capacitancia-voltaje (C-V). Para más detalles de sobre el equipo de caracterización ver la figura 6.9.

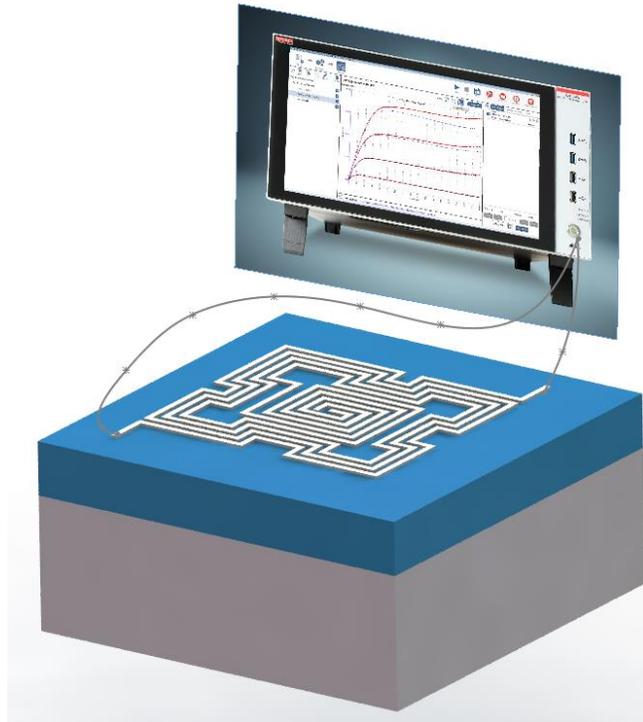


Figura 6.31 Esquema del arreglo utilizado para realizar las mediciones con el equipo Keithley 4200 SCS.

6.4 Discusión y conclusiones

Las simulaciones numéricas y la caracterización eléctrica del capacitor interdigitado evolutivo muestran resultados prometedores. Al modificar los dedos del capacitor interdigitado con el algoritmo evolutivo hemos logrado aumentar 29% el valor de la capacitancia de acuerdo con los resultados obtenidos en las mediciones con el equipo Keithley, tomando en cuenta los resultados, actualmente estamos trabajando en la redacción de un artículo.

Otra geometría que nos interesa es el espiral fractal, además nuestro proyecto involucra el uso de nanopartículas metálicas para aumentar la capacitancia de nuestros dispositivos, hemos realizado estudios mediante simulación numérica, en la cual se obtuvo buenos resultados, se realizaron varios estudios para analizar la dependencia de la capacitancia de los siguientes factores: distancia y espesor de los electrodos, con y sin nanopartículas, diferentes tamaños y cantidades de nanopartículas. El mejor resultado sería utilizando mayor cantidad de nanopartículas, teniendo cuidado de no generar un corto circuito entre los electrodos del capacitor.

Para estos capacitores se dificultó la caracterización eléctrica, ya que, al parecer con la deposición de las nanopartículas en el arreglo, se genera un corto circuito, debido a la solución en la que se encuentran diluidas las nanopartículas. Por lo tanto, el proyecto se sigue trabajando y buscando la alternativa para poder caracterizar.

Capítulo 7

7 Conclusiones

En este trabajo se ha presentado el análisis numérico y fabricación de dispositivos para tecnología de terahertz, para llegar a los resultados de simulación numérica se utilizó la técnica del Método de Elemento Finito (MEF) y la fabricación se realizó mediante litografía por haz de electrones (EBL). También se realizaron caracterizaciones experimentales utilizando equipo de laboratorio especializado. Tomando en cuenta lo antes mencionado, el trabajo de investigación desarrollado en el periodo del doctorado se puede concluir que hemos logrado la mayoría de los objetivos planteados en el protocolo del proyecto. Sin embargo, en el proceso de desarrollo de la investigación me he dado cuenta de que se puede aportar mucho más, por lo que me gustaría continuar investigando y profundizar en estos proyectos.

Una de las aportaciones fue el estudio de la respuesta térmica de un nanoarreglo de dipolos fabricado en dos diferentes sustratos para aplicaciones de aprovechamiento de radiación térmica, el estudio fue tanto teórico como experimental. *(Cabe mencionar que este trabajo se publicó en la revista: Infrared Physics and Technology con un factor de impacto de 2.3).* Parte de los resultados de la investigación fue la medición de la impedancia térmica en estado estacionario para los nanoarreglos de dipolos fabricados en sustrato de poliimida y de dióxido de silicio. Las mediciones de la impedancia térmica fueron obtenidas usando una cámara infrarroja, las mediciones indican una alta impedancia para el sustrato de poliimida $Z_{th} = 292.2$ (K/W), en contraparte con los valores obtenidos para el sustrato de dióxido de silicio $Z_{th} = 13.5$ (K/W). Similarmente, las simulaciones numéricas nos permiten corroborar la alta impedancia térmica para el sustrato de poliimida y bajos valores para el sustrato de dióxido de silicio. Adicionalmente, se observó el incremento en la impedancia térmica en función de variar el espesor del sustrato. En conclusión, los resultados experimentales y teóricos muestran que el desempeño térmico de dispositivos termoeléctricos nanoestructurados puede incrementarse usando sustratos de poliimida. Cabe mencionar que

Otra de las aportaciones fue el estudio de transferencia de calor en micro arreglos, dicho trabajo titulado: diodos térmicos, se logró analizar térmicamente los arreglos fabricados por litografía de haz de electrones, los arreglos se fabricaron sobre un sustrato flexible de poliamida. Se utilizó una fuente de corriente directa para inducir una corriente eléctrica en el elemento calentador, utilizando la cámara infrarroja se pudo medir los cambios de temperatura en el arreglo y el sustrato cuando se le aplicó voltaje al calentador y disipó calor por efecto Joule. Se analizó el cambio de temperatura en las nanoestructuras (triángulos), sin embargo, se llegó a la conclusión que se calientan muy rápido, a una velocidad que la cámara infrarroja no es capaz de detectar, a pesar de que se utilizó la mayor cantidad de cuadros por segundo que la cámara puede capturar.

Se esperaba que debido a las propiedades reportadas del sustrato se tuviera una transferencia de calor por radiación y no por conducción, los resultados muestran que el sustrato sí conduce el calor y predomina la temperatura en el sustrato sobre los arreglos, esto debido a que la masa del sustrato es mucho mayor que la de las nanoestructuras, por lo tanto, el sustrato calienta a los arreglos a velocidades muy rápidas.

Estos resultados nos muestran que debemos buscar otra alternativa para preparar la muestra o arreglo de nanoestructuras, ya sea utilizando un sustrato con una masa muy cercana a la de nuestros arreglos o encontrar instrumentación que sea capaz de medir a altas velocidades.

Respecto a las nano y microestructuras con propiedades capacitivas, se realizaron las simulaciones numéricas y la caracterización eléctrica, en el caso del capacitor interdigitado evolutivo se muestran resultados prometedores. Al modificar los dedos del capacitor interdigitado con el algoritmo evolutivo hemos logrado aumentar 29% el valor de la capacitancia de acuerdo con los resultados obtenidos en las mediciones con el equipo Keithley, tomando en cuenta los resultados, actualmente estamos trabajando en la redacción de un artículo.

Otra geometría que nos interesa es el espiral fractal, además nuestro proyecto involucra el uso de nanopartículas metálicas para aumentar la capacitancia de nuestros dispositivos, hemos realizado estudios mediante simulación numérica, en la cual se obtuvo buenos

resultados, se realizaron varios estudios para analizar la dependencia de la capacitancia de los siguientes factores: distancia y espesor de los electrodos, con y sin nanopartículas, diferentes tamaños y cantidades de nanopartículas. El mejor resultado sería utilizando mayor cantidad de nanopartículas, teniendo cuidado de no generar un corto circuito entre los electrodos del capacitor.

Para estos capacitores se dificultó la caracterización eléctrica, ya que, al parecer con la deposición de las nanopartículas en el arreglo, se genera un corto circuito, debido a la solución en la que se encuentran diluidas las nanopartículas. Por lo tanto, el proyecto se sigue trabajando y buscando la alternativa para poder caracterizar.

Los resultados obtenidos a lo largo de esta investigación son de utilidad para el grupo de investigación de la universidad autónoma de San Luis Potosí al que pertenezco, además se logró realizar divulgación del trabajo realizado tanto en la nación como internacionalmente, se realizó la publicación de tres trabajos en “proceedings” de congresos internacionales y nacionales, una publicación en revista indizada y varias ponencias en congresos, logrando destacar entre los trabajos participantes.

Por último, es importante recordar que la investigación nunca termina, siempre existe algo que podemos mejorar, por lo tanto, me encuentro motivado a continuar con la investigación y seguir aportando en el desarrollo de tecnología de terahertz.

Bibliografía

- [1] B.B. Hu, M.C. Nuss, Imaging with terahertz waves, *Opt. Lett.* 20 (1995) 1716–1718. <https://doi.org/10.1364/OL.20.001716>.
- [2] D.M. Mittleman, M. Gupta, R. Neelamani, R.G. Baraniuk, J. V Rudd, M. Koch, Recent advances in terahertz imaging, *Appl. Phys. B.* 68 (1999) 1085–1094. <https://doi.org/10.1007/s003400050750>.
- [3] D.D. Arnone, C.M. Ciesla, A. Corchia, S. Egusa, M. Pepper, J.M. Chamberlain, C. Bezant, E.H. Linfield, R. Clothier, N. Khammo, Applications of terahertz (THz) technology to medical imaging, in: J.M. Chamberlain (Ed.), *Terahertz Spectrosc. Appl. II*, SPIE, 1999: pp. 209–219. <https://doi.org/10.1117/12.361037>.
- [4] S.S. Dhillon, M.S. Vitiello, E.H. Linfield, A.G. Davies, M.C. Hoffmann, J. Booske, C. Paoloni, M. Gensch, P. Weightman, G.P. Williams, E. Castro-Camus, D.R.S. Cumming, F. Simoens, I. Escorcia-Carranza, J. Grant, S. Lucyszyn, M. Kuwata-Gonokami, K. Konishi, M. Koch, C.A. Schmuttenmaer, T.L. Cocker, R. Huber, A.G. Markelz, Z.D. Taylor, V.P. Wallace, J. Axel Zeitler, J. Sibik, T.M. Korter, B. Ellison, S. Rea, P. Goldsmith, K.B. Cooper, R. Appleby, D. Pardo, P.G. Huggard, V. Krozer, H. Shams, M. Fice, C. Renaud, A. Seeds, A. Stöhr, M. Naftaly, N. Ridler, R. Clarke, J.E. Cunningham, M.B. Johnston, The 2017 terahertz science and technology roadmap, *J. Phys. D. Appl. Phys.* 50 (2017). <https://doi.org/10.1088/1361-6463/50/4/043001>.
- [5] C.D. Nordquist, M.C. Wanke, A.M. Rowen, C.L. Arrington, A.D. Grine, C.T. Fuller, Properties of Surface Metal Micromachined Rectangular Waveguide Operating Near 3 THz, *IEEE J. Sel. Top. Quantum Electron.* 17 (2011) 130–

137. <https://doi.org/10.1109/JSTQE.2010.2049095>.

- [6] S. Lucyszyn, Yun Zhou, REconfigurable Terahertz INtegrated Architecture (RETINA), in: 2008 33rd Int. Conf. Infrared, Millim. Terahertz Waves, 2008: pp. 1–2. <https://doi.org/10.1109/ICIMW.2008.4665551>.
- [7] M.R. Abdel-Rahman, F.J. Gonzalez, G.D. Boreman, Antenna-coupled metal-oxide-metal diodes for dual-band detection at 92.5 GHz and 28 THz, *Electron. Lett.* 40 (2004) 116–118. <https://doi.org/10.1049/el:20040105>.
- [8] T. Kiwa, M. Tonouchi, M. Yamashita, K. Kawase, Laser terahertz-emission microscope for inspecting electrical faults in integrated circuits, *Opt. Lett.* 28 (2003) 2058–2060. <https://doi.org/10.1364/OL.28.002058>.
- [9] F. Blanchard, A. Doi, T. Tanaka, H. Hirori, H. Tanaka, Y. Kadoya, K. Tanaka, Real-time terahertz near-field microscope, *Opt. Express.* 19 (2011) 8277–8284. <https://doi.org/10.1364/OE.19.008277>.
- [10] H.-T. Chen, R. Kersting, G.C. Cho, Terahertz imaging with nanometer resolution, *Appl. Phys. Lett.* 83 (2003) 3009–3011. <https://doi.org/10.1063/1.1616668>.
- [11] K. Moon, Y. Do, M. Lim, G. Lee, H. Kang, K.-S. Park, H. Han, Quantitative coherent scattering spectra in apertureless terahertz pulse near-field microscopes, *Appl. Phys. Lett.* 101 (2012) 11109. <https://doi.org/10.1063/1.4733475>.
- [12] G. Moddel, S. Grover, *Rectenna solar cells*, Springer, 2013.
- [13] D.K. Kotter, S.D. Novack, W.D. Slafer, P.J. Pinhero, Theory and manufacturing processes of solar nanoantenna electromagnetic collectors, *J. Sol. Energy Eng.* 132 (2010).
- [14] E.S. Barnard, *Plasmonic optical antennas for enhanced light detection and*

emission, Stanford University, 2011.

- [15] E. Briones, J. Alda, F.J. González, Conversion efficiency of broad-band rectennas for solar energy harvesting applications, *Opt. Express*. 21 (2013) A412–A418.
- [16] C. Fumeaux, M.A. Gritz, I. Codreanu, W.L. Schaich, F.J. González, G.D. Boreman, Measurement of the resonant lengths of infrared dipole antennas, *Infrared Phys. Technol.* 41 (2000) 271–281.
- [17] C. Fumeaux, J. Alda, G.D. Boreman, Lithographic antennas at visible frequencies, *Opt. Lett.* 24 (1999) 1629–1631.
- [18] H.-J. Song, T. Nagatsuma, Present and future of terahertz communications, *IEEE Trans. Terahertz Sci. Technol.* 1 (2011) 256–263.
- [19] E. Ojefors, N. Baktash, Y. Zhao, R. Al Hadi, H. Sherry, U.R. Pfeiffer, Terahertz imaging detectors in a 65-nm CMOS SOI technology, in: 2010 Proc. ESSCIRC, IEEE, 2010: pp. 486–489.
- [20] M.A.M. Albreem, 5G wireless communication systems: Vision and challenges, in: 2015 Int. Conf. Comput. Commun. Control Technol., IEEE, 2015: pp. 493–497.
- [21] I.F. Akyildiz, J.M. Jornet, C. Han, Terahertz band: Next frontier for wireless communications, *Phys. Commun.* 12 (2014) 16–32.
- [22] K. Wu, J. Xiao, L.M. Ni, Rethinking the architecture design of data center networks, *Front. Comput. Sci.* 6 (2012) 596–603.
- [23] I.F. Akyildiz, J.M. Jornet, The internet of nano-things, *IEEE Wirel. Commun.* 17 (2010) 58–63.
- [24] J.M. Jornet, I.F. Akyildiz, Graphene-based plasmonic nano-antenna for

terahertz band communication in nanonetworks, *IEEE J. Sel. Areas Commun.* 31 (2013) 685–694.

- [25] R. Courant, *Variational methods for the solution of problems of equilibrium and vibrations*, Lect. Notes Pure Appl. Math. (1994) 1.
- [26] J. Bronson, J.A. Levine, R. Whitaker, Lattice cleaving: A multimaterial tetrahedral meshing algorithm with guarantees, *IEEE Trans. Vis. Comput. Graph.* 20 (2013) 223–237.
- [27] R. Miller, Q.F. Stout, Mesh computer algorithms for computational geometry, *IEEE Trans. Comput.* 38 (1989) 321–340.
- [28] C.S. Desai, H.J. Siriwardane, *An introduction to finite element computations*, E. Hinton and D. R. Owen, Pineridge Press, Swansea, 1979. No. of pages: 385. Price: £16, *Int. J. Numer. Methods Eng.* 15 (1980) 1281–1282. <https://doi.org/10.1002/nme.1620150815>.
- [29] C.S. Desai, J.F. Abel, *Introduction to the finite element method : a numerical method for engineering analysis*, New York (N.Y.): Van Nostrand Reinhold, 1972. <http://lib.ugent.be/catalog/rug01:001274785>.
- [30] R.W. Pryor, *Multiphysics modeling using COMSOL®: a first principles approach*, Jones & Bartlett Publishers, 2009.
- [31] K.-J. Bathe, *Finite Element Procedures* Prentice-Hall, New Jersey. 1037 (1996).
- [32] L.G. Angarita Gutiérrez, *Síntesis de películas delgadas por la técnica de magnetron Sputtering a partir de blancos de Renio y Boro*, (2017).
- [33] E. Briones, J. Briones, A. Cuadrado, J.C. Martinez-Anton, S. McMurtry, M. Hehn, F. Montaigne, J. Alda, F.J. Gonzalez, Seebeck nanoantennas for solar energy harvesting, *Appl. Phys. Lett.* 105 (2014) 93108.

- [34] G.P. Szakmany, A.O. Orlov, G.H. Bernstein, W. Porod, Nanoantenna integrated infrared thermoelectric converter, in: 14th IEEE Int. Conf. Nanotechnol., IEEE, 2014: pp. 571–573.
- [35] F.J. González, Thermal-impedance simulations of antenna-coupled microbolometers, *Infrared Phys. Technol.* 48 (2006) 223–226.
- [36] F.J. Gonzalez, C. Fumeaux, J. Alda, G.D. Boreman, Thermal impedance model of electrostatic discharge effects on microbolometers, *Microw. Opt. Technol. Lett.* 26 (2000) 291–293.
- [37] B. Vermeersch, G. De Mey, Influence of substrate thickness on thermal impedance of microelectronic structures, *Microelectron. Reliab.* 47 (2007) 437–443.
- [38] E. Briones, J. Briones, J.C. Martinez-Anton, A. Cuadrado, S. McMurtry, M. Hehn, F. Montaigne, J. Alda, J. González, Seebeck nanoantennas for infrared detection and energy harvesting applications, in: 2015 9th Eur. Conf. Antennas Propag., IEEE, 2015: pp. 1–4.
- [39] B. Mora-Ventura, R. Díaz De León, G. García-Torales, J.L. Flores, J. Alda, F.J. González, Responsivity and resonant properties of dipole, bowtie, and spiral Seebeck nanoantennas, *J. Photonics Energy.* 6 (2016). <https://doi.org/10.1117/1.JPE.6.024501>.
- [40] A. Cuadrado, J. Alda, F.J. González, Multiphysics simulation for the optimization of optical nanoantennas working as distributed bolometers in the infrared, *J. Nanophotonics.* 7 (2013) 73093.
- [41] G.P. Szakmany, A.O. Orlov, G.H. Bernstein, W. Porod, Bi-metallic and mono-metallic antenna-coupled nanoscale thermocouples for infrared detection, in: 72nd Device Res. Conf., IEEE, 2014: pp. 67–68.

- [42] G.P. Szakmany, P.M. Krenz, A.O. Orlov, G.H. Bernstein, W. Porod, Antenna-coupled nanowire thermocouples for infrared detection, *IEEE Trans. Nanotechnol.* 12 (2012) 163–167.
- [43] A. Cuadrado, M. Silva-López, F.J. González, J. Alda, Robustness of antenna-coupled distributed bolometers, *Opt. Lett.* 38 (2013) 3784–3787.
- [44] M. Silva-López, A. Cuadrado, N. Llombart, J. Alda, Antenna array connections for efficient performance of distributed microbolometers in the IR, *Opt. Express.* 21 (2013) 10867–10877.
- [45] C.M. Lee, Y. Kim, Y. Kim, I.K. Kim, C.W. Jung, A flexible and transparent antenna on a polyamide substrate for laptop computers, *Microw. Opt. Technol. Lett.* 57 (2015) 1038–1042.
- [46] M.M. Jatlaoui, D. Dragomirescu, S. Charlot, P. Pons, H. Aubert, R. Plana, 3D heterogeneous integration of wireless communicating nano-sensors on flexible substrate, in: *Adv. Top. Optoelectron. Microelectron. Nanotechnologies V*, International Society for Optics and Photonics, 2010: p. 78211E.
- [47] F. Kessler, D. Rudmann, Technological aspects of flexible CIGS solar cells and modules, *Sol. Energy.* 77 (2004) 685–695.
- [48] M.Z. Pakhuruddin, K. Ibrahim, A.A. Aziz, Properties of polyimide substrate for applications in flexible solar cells, *Optoelectron Adv Mater.* 7 (2013) 377–380.
- [49] R.F.W. Pease, Electron beam lithography, *Contemp. Phys.* 22 (1981) 265–290.
- [50] A.S. Bahman, K. Ma, F. Blaabjerg, Thermal impedance model of high power IGBT modules considering heat coupling effects, in: *2014 Int. Power Electron. Appl. Conf. Expo.*, IEEE, 2014: pp. 1382–1387.

- [51] F.J. González, C.S. Ashley, P.G. Clem, G.D. Boreman, Antenna-coupled microbolometer arrays with aerogel thermal isolation, *Infrared Phys. Technol.* 45 (2004) 47–51.
- [52] N. Yang, N. Li, L. Wang, B. Li, Thermal rectification and negative differential thermal resistance in lattices with mass gradient, *Phys. Rev. B.* 76 (2007) 20301.
- [53] M. Peyrard, The design of a thermal rectifier, *EPL (Europhysics Lett.* 76 (2006) 49.
- [54] C.W. Chang, D. Okawa, A. Majumdar, A. Zettl, Solid-state thermal rectifier, *Science* (80-.). 314 (2006) 1121–1124.
- [55] B. Li, J. Lan, L. Wang, Interface thermal resistance between dissimilar anharmonic lattices, *Phys. Rev. Lett.* 95 (2005) 104302.
- [56] L. Wang, B. Li, Thermal logic gates: computation with phonons, *Phys. Rev. Lett.* 99 (2007) 177208.
- [57] B. Li, L. Wang, G. Casati, Negative differential thermal resistance and thermal transistor, *Appl. Phys. Lett.* 88 (2006) 143501.
- [58] J.P. Holman, *Heat transfer tenth edition*, (2010).
- [59] J. Ordonez-Miranda, J.M. Hill, K. Joulain, Y. Ezzahri, J. Drevillon, Conductive thermal diode based on the thermal hysteresis of VO₂ and nitinol, *J. Appl. Phys.* 123 (2018) 85102.
- [60] S. Chen, E. Pereira, G. Casati, Ingredients for an efficient thermal diode, *EPL (Europhysics Lett.* 111 (2015) 30004.
- [61] Marco Vinicio Tovar Padilla, *Exploración Teórica y Experimental del Efecto de Rectificación Térmica en Sistemas de Multicapas*, n.d.

- [62] M. Schmotz, J. Maier, E. Scheer, P. Leiderer, A thermal diode using phonon rectification, *New J. Phys.* 13 (2011) 113027.
- [63] D. Grieshaber, R. MacKenzie, J. Vörös, E. Reimhult, Electrochemical biosensors-sensor principles and architectures, *Sensors.* 8 (2008) 1400–1458.
- [64] F. González, G., Kolosovas-Machuca, E., López-Luna, E., Hernández-Arriaga, H., & González, Design and fabrication of interdigital nanocapacitors coated with HfO₂. *Sensors*, (n.d.).
- [65] C.J. Igreja, R., & Dias, Analytical evaluation of the interdigital electrodes capacitance for a multi-layered structure, (n.d.).
- [66] K. Instruments, Model 4200-SCS Semiconductor Characterization System Reference Manual, (n.d.).
- [67] H. Samavati, A. Hajimiri, A.R. Shahani, G.N. Nasserbakht, T.H. Lee, Fractal capacitors, *IEEE J. Solid-State Circuits.* 33 (1998) 2035–2041.
- [68] V.S. Veerasamy, Rain sensor with selectively reconfigurable fractal based sensors/capacitors, (2009).
- [69] A.M. Elshurafa, P.H. Ho, A.G. Radwan, M.H. Ouda, K.N. Salama, Low-voltage puzzle-like fractal microelectromechanical system variable capacitor suppressing pull-in, *Micro Nano Lett.* 7 (2012) 965–969.
- [70] H.A. Zeinabad, H. Ghourchian, M. Falahati, M. Fathipour, M. Azizi, S.M. Boutorabi, Ultrasensitive interdigitated capacitance immunosensor using gold nanoparticles, *Nanotechnology.* 29 (2018) 265102.
- [71] H. Sagan, Hilbert's space-filling curve, in: *Space-Filling Curves*, Springer, 1994: pp. 9–30.

- [72] P.A. Kumar, N.B. Rao, Fractal spiral capacitor for wireless applications, *Electron. Lett.* 52 (2016) 481–483.

Anexos

Publicación 1 en congreso internacional

Analysis of Metallic Nanoantennas for Solar Energy Conversion

B. Mora Ventura^a, R. Díaz de León^b, G. García-Torales^a, Jorge L. Flores^a, Javier Alda^c,
and Francisco Javier González^b.

^aDepartamento de Electrónica, Universidad de Guadalajara, Av. Revolución No. 1500,
C.P. 44430, Guadalajara, Jal., México.

^bUniversidad Autónoma de San Luis Potosí, Sierra Leona, 550, Lomas 2da Sección,
Building CIACYT, 78210 San Luis Potosí, México.

^cUniversity Complutense of Madrid, Faculty of Optics and Optometry, Applied Optics
Complutense Group, Avenue, Arcos de Jalón, 118, 28037 Madrid, Spain.

Abstract

Recently thermo-electrical nanoantennas, also known as Seebeck nanoantennas, have been proposed as an alternative for solar energy harvesting applications. In this work we present the optical and thermal analysis of metallic nanoantennas operating at infrared wavelengths, this study is performed by numerical simulations using COMSOL Multiphysics. Several different nanoantenna designs were analyzed including dipoles, bowties and square spiral antennas. Results show that metallic nanoantennas can be tuned to absorb electromagnetic energy at infrared wavelengths, and

that numerical simulation can be useful in optimizing the performance of these types of nanoantennas at optical and infrared wavelengths.

Keywords: Electromagnetic radiation, thermo-electrical nanoantennas, solar energy conversion, infrared.

1. INTRODUCTION

Solar energy is the largest electromagnetic energy flow entering on earth. Approximately 80% of solar energy is absorbed by the earth's surface and atmosphere and it is re-emitted as infrared radiation in the 17-42 THz spectral range, also some other artificial thermal sources such as engines, furnaces, etc., emit within the same infrared band.

The spectrum of solar radiation can be classified into three main bands: ultraviolet (UV) radiation ($f > 750$ THz) with less 9 %; visible light (428 THz $< f < 750$ THz) where the content is approximately 39 %; and the remaining 52 % consisting of infrared (IR) radiation (300 GHz $< f < 428$ THz) ¹.

Over the years, several methods have been used to harvest energy from the sun. Photovoltaic (PV) cells are the most mature technology to collect and convert the solar energy into electricity ². Nevertheless, the IR wavelengths have been sub-utilized by current photovoltaic technology and this development still cannot cover the market demand on solar panels because of their low efficiency. Thus, the PV industry will need cheaper and higher efficiency technologies to meet these requirements of the solar power market. Furthermore, harvesting energy in the IR spectrum requires the use of novel techniques, which can complement current photovoltaic technology.

An alternative for solar energy harvesting is based on nanoantennas. These devices are resonant metallic structures that confine the optical energy into small volumes in an efficient way. The optical energy induces a high-frequency current on the structure ³. For this reason, nanoantennas have received a significant interest as an alternative for solar energy harvesting. Additionally, nanoantennas have found many applications in the visible and infrared spectral bands due their capacity to enhance the interaction of visible light or infrared waves with nanoscale matter and confine highly localized fields ⁴.

Even though nanoantennas capture infrared energy in an efficient manner⁵ they need a mechanism, such as a rectifier to get dc power, similar to what electromagnetic receiving devices do in the microwave region⁶. Nanoantennas coupled to high-speed rectifiers based on tunnel barriers, also known as “rectennas”, has been extensively explored during the last years as a way to convert the optical power into dc power^{7,8}. Rectennas have inconvenient due to its low-performance, reaching efficiencies values of 10^{-9} and 10^{-12} percent for the most explored barrier⁹. Matching between diodes and antennas, and the diode-like behavior of the tunnel barriers are self-dependent key parameters that should be improved to increase the performance of devices^{10,11}. By the other hand, the incorporation of nano-rectifiers to the antennas whose dimensions are around $60 \text{ nm} \times 80 \text{ nm}$ for rectification to THz frequencies requires the use of multi-level e-beam lithography processes what can conduce to not-reproducible results.

Another technique has been proposed based on the thermoelectric effect using optical nanoantennas. This technique permits to overcome the transfer energy constraint (or mismatch impedance) between the antennas and coupled fast rectifiers. It increases the efficiency of devices and reduces the technological problems arising from fabrication¹². These devices are also called thermo-electrical or Seebeck nanoantennas.

Thermo-electrical nanoantennas are based by the Seebeck effect, where a current is induced all along the structure by locally increasing the temperature of the bi-metallic junction¹³. The heating of the junction is optically induced when the optical radiation impinges the structure, causing a non-uniform Joule heating generated by the resonant current along the nanoantennas^{14,15}.

In this work, we present the optical and thermal analysis of metallic nanoantennas resonating at infrared wavelengths. This study is performed by numerical simulations using COMSOL Multiphysics. We analyze three common geometries and five metals.

Section 2 describes the design and method to evaluate the thermal and optical response. Optical and thermal results are presented in section 3, and finally conclusions are given in Section 4.

1.1 NUMERICAL SIMULATIONS OF NANOANTENNAS

Numerical simulations have been used to obtain approximate solutions to problems of mathematical physics. The software that we use is based on the finite element method. This method is applicable to electromagnetic and thermal analysis.

Design parameters of nanoantennas

The nanoantennas designed for solar energy harvesting applications are shown in figure 1 (a), (b) and (c). These geometries are sensitive to linear polarized radiation.

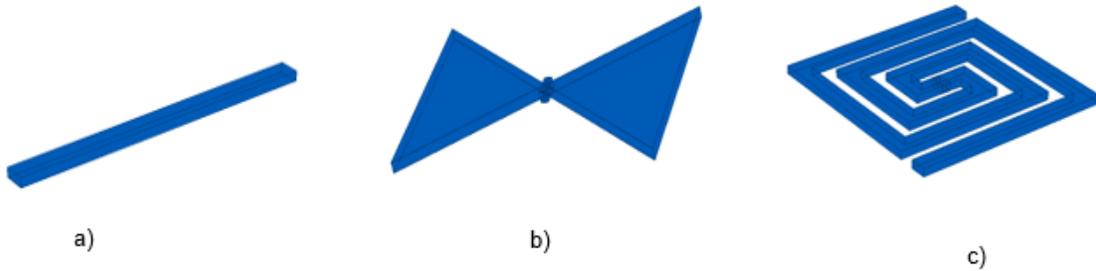


Figure 1. Geometry of the proposed nanoantennas, (a) Dipole, (b) Bowtie and (c) Square spiral.

Table 2. Parameters of the studied geometries

Geometry	Parameters
Dipole	Length=3 μ m; width=200 nm; thickness=100 nm
Bowtie	Flare angle=60°; Length=3 μ m; width=200 nm; thickness=100 nm
Square spiral	Composed by two symmetrical arms 10.2 μ m lineal long; width=200 nm; thickness=100 nm

We study the effect of these geometries; their performance is analyzed with the induced current and electric field distribution as a function of frequency.

Optical analysis

The most popular materials utilized to build antennas are gold, silver and copper. At the optical and infrared regions, metals are no longer considered to be perfect conductors and they have frequency dependent dielectric properties.

In this work, we use gold, silver, copper, titanium and nickel as the materials for designing.

The Drude model describes the optical permittivity of the metal as:

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_{\infty} - \frac{(\omega_p)^2}{\omega^2 - i\omega\omega_{\tau}} \quad (1)$$

Where ε_∞ represents the contribution of the bound electrons to the relative dielectric constant, ω_p is the plasma frequency and ω_τ is the damping frequency. The optical parameters are frequency-dependent as shown in (Eq. 1), however, it is previously approved in the research literature¹⁶ that the material parameters at a single frequency close to the resonance can be used instead of the frequency-dependent variable $\varepsilon(\omega)$. An acceptable agreement is maintained as long as the imaginary part of ε is included. For this work we obtained the optical parameters of metals at IR frequencies previously reported in the literature¹⁶⁻¹⁹.

The electromagnetic simulation was performed by propagating a linearly polarized plane wave that match with the structure. The electric-field-amplitude of the plane wave was 1 V/m and the induced current in the antenna as a function of the plane wave's frequency was measured by integrating the surface current density over the antenna.

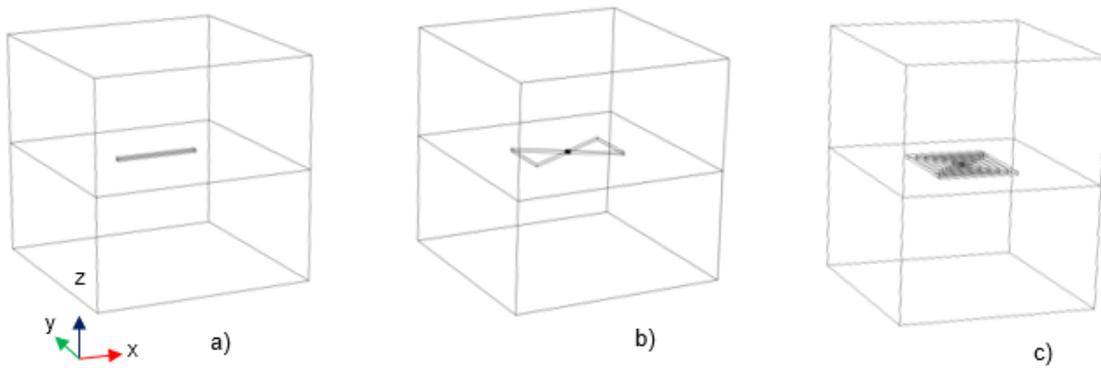


Figure 2. Geometries of nanoantennas that are immersed to the physic space with electromagnetic characteristics of air, we use relative permittivity ($\varepsilon_r = 1$), relative permeability ($\mu_r = 1$) and electric conductivity ($\sigma = 0$ S/m).

The optical study lead us to analyze the performance of the nanoantennas that is useful for calculate the parameters used in thermal analysis. In the next section, we present the relation between electromagnetics and thermal power.

Thermal analysis

In the thermal study of the nanoantennas, we have to take into account that the incoming electromagnetic radiation into the metallic structure generates heat. The heating of the nanoantenna is described by the Joule effect. The power dissipated by the device is seen as a heat source^{20, 21}.

The total heat produced after excitation is given by the following relation:

$$Q = \int_v q(x, y, z) dv = \int_v \sigma_\omega |\vec{E}_\omega(x, y, z)|^2 dv, \quad (2)$$

Where $\sigma(\omega)$ is the conductivity of the metal at the frequency of the incident wave, where $\vec{E}_\omega(x, y, z)$ is the spatial distribution of the electric field of the electromagnetic wave, and v is the antenna volume.

The electric field distribution, $\vec{E}_\omega(x, y, z)$, is obtained after solving the following wave equation:

$$\nabla \times \left(\frac{1}{\mu_r} \nabla \times \vec{E} \right) - k_0^2 (\epsilon_r + i \frac{\sigma(\omega)}{\epsilon_0 \omega}) \vec{E} = 0, \quad (3)$$

To find out the temperature change of the metal structure, we need to use the heat transfer equation:

$$dC_p \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla(\kappa \nabla T) + q, \quad (4)$$

Where d is the mass density, C_p is the heat capacity, κ is the thermal conductivity and $q = q(x, y, z)$ is the power heat density (W/m^3), which is related with the power dissipation given in Eq. (2)²².

For the thermal analysis, we simulate the total heat produced by Joule effect with a heat source implemented in the design of the nanoantennas. The numerical model was defined using all the optical, thermal and thermo-electrical properties of materials reported at $10.6\mu\text{m}$ wavelength²³.

In the thermal part of the simulation study, we used dipole nanoantennas joining their arms with two dissimilar metals. These devices are like thermocouples composed of the following materials: silver-nickel, gold-nickel, copper-nickel and titanium-nickel.

Materials with a considerable difference in their Seebeck coefficients S_a and S_b (property that determines the performance of materials to generate voltage from heat gradients) should be considered in order to increase the response of the devices, given by^{24, 25}.

$$V_{oc} = (S_a - S_b) \Delta T \quad (5)$$

Where ΔT is the temperature difference between the center (hot spot) and the open ends of the antenna (cold spots).

The effective temperature increase of the bi-metallic junction ΔT was found and the voltage response of the antenna was evaluated by using the Seebeck effect relationship²⁵.

We use proprieties of nickel as a main building material, because it has a negative Seebeck coefficient and consequently it shows a considerable difference substituting the values of the materials in (Eq. 5).

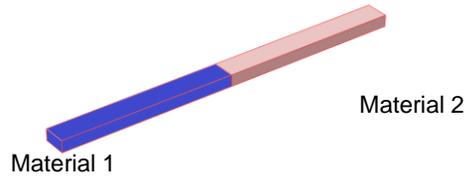


Figure 3. Schematic representation of thermoelectric dipole nanoantennas. This geometry is made of two dissimilar metals that are represented with different color, it creates a thermocouple. Each arm of the dipole nanoantenna has 200 nm width $\times 100 \text{ nm}$ thickness and $1.5 \text{ }\mu\text{m}$ length.

RESULTS

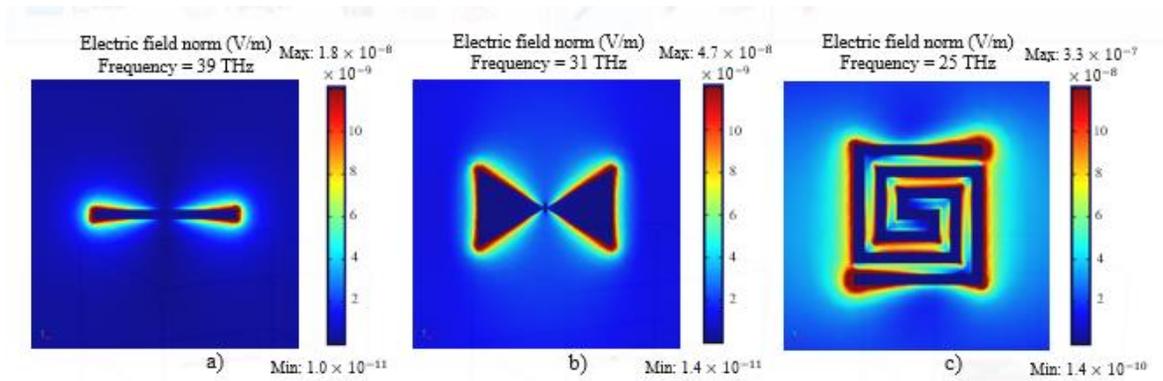


Figure 4. Electric field norm around the nanoantenna under resonant frequency condition.

Using the finite element method numerical simulation was realized, getting like result the electric field distribution for three types of nanoantennas. Addition, the induced current as a function of frequency was obtained. Figure 4 shows the electric field concentration of gold nanoantennas as a function of their resonance frequency. As expected, the highest electric field intensity is distributed along the edges of the nanostructures. The magnitude of the induced current is proportional to the electric field intensity.

It can be seen from Figure 4 that there is a resonance shift from 39 THz for dipole, 31 THz for bowtie and 25 THz for square spiral antenna. These resonance frequencies correspond at infrared spectrum. The results show in figure 5 the current induced at range of frequencies 10 THz to 150THz. The spiral square antenna has the largest value compared with the bowtie and the dipole nanoantennas. The higher response is due to the larger collection area in comparison with the dipole. Bowtie antenna resonates at a lower frequency than dipole antenna of the same length. Through

modifying geometries is possible have different broadband of energy harvested and different resonance frequency.

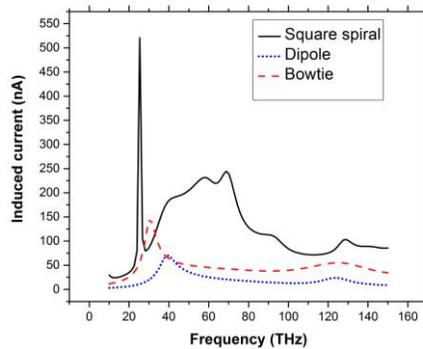


Figure 5. Induced current by a linearly polarized plane wave on gold dipole, bowtie and square spiral nanoantennas as a function of frequency.

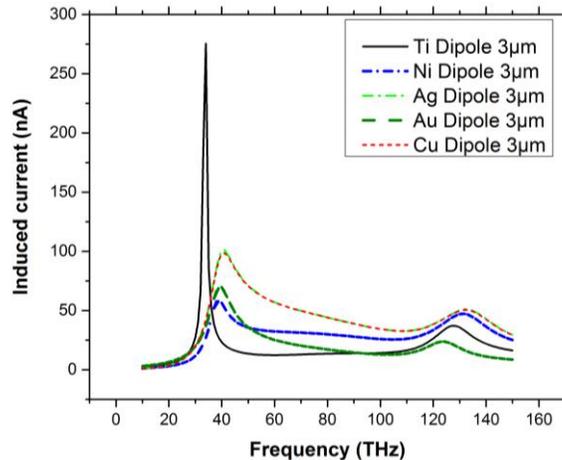


Figure 6. Induced current by a linearly polarized plane wave on gold, cooper, silver, titanium and nickel dipoles as a function of frequency.

In order to find out the influence of the material, the simulations were performed using the optical proprieties of the metal reported in the literature¹⁶⁻¹⁹. Figure 6 shows the effect of the material in the current induced on the nanostructures at infrared frequencies. The response of titanium, of dipoles nanoantennas with the same length, has the higher induced current. The resonance frequency is shifted in function of the type of material used. The results of the finite-element thermal simulations are employed to evaluate the Seebeck voltage on the dipole nanoantennas. For thermal simulations the thermal conductivities of the materials were considered to work at room temperature. We obtain the temperature distribution along the dipole nanoantenna with different materials.

Figure 7 shows the temperature distribution of the Ti-Ni nanoantenna at the steady-state.

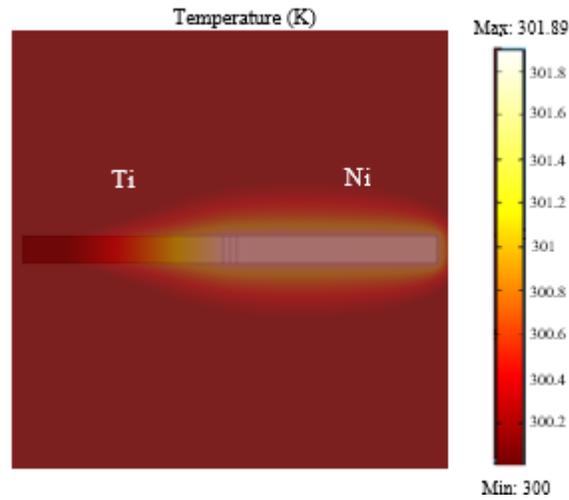


Figure 7. Thermal simulation showing the temperature distribution in dipole nanoantennas composed of a Ti-Ni bimetallic junction.

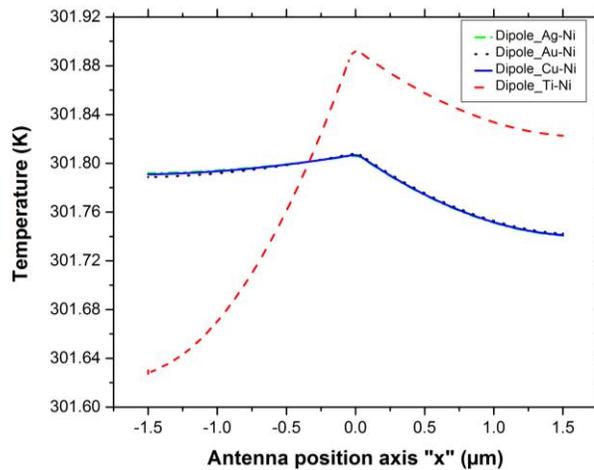


Figure 8. Temperature obtained in dipole nanoantennas of the metals analyzed in this work.

The figure 8 shows that the Ti-Ni junction has higher difference of temperature obtained of the ends of dipole nanoantenna. In figure 9, we plot the temperature for each junction. The temperature asymmetry of arms arises from the difference in thermal conductivities of used metals what causes one arm to conduct faster the heat.

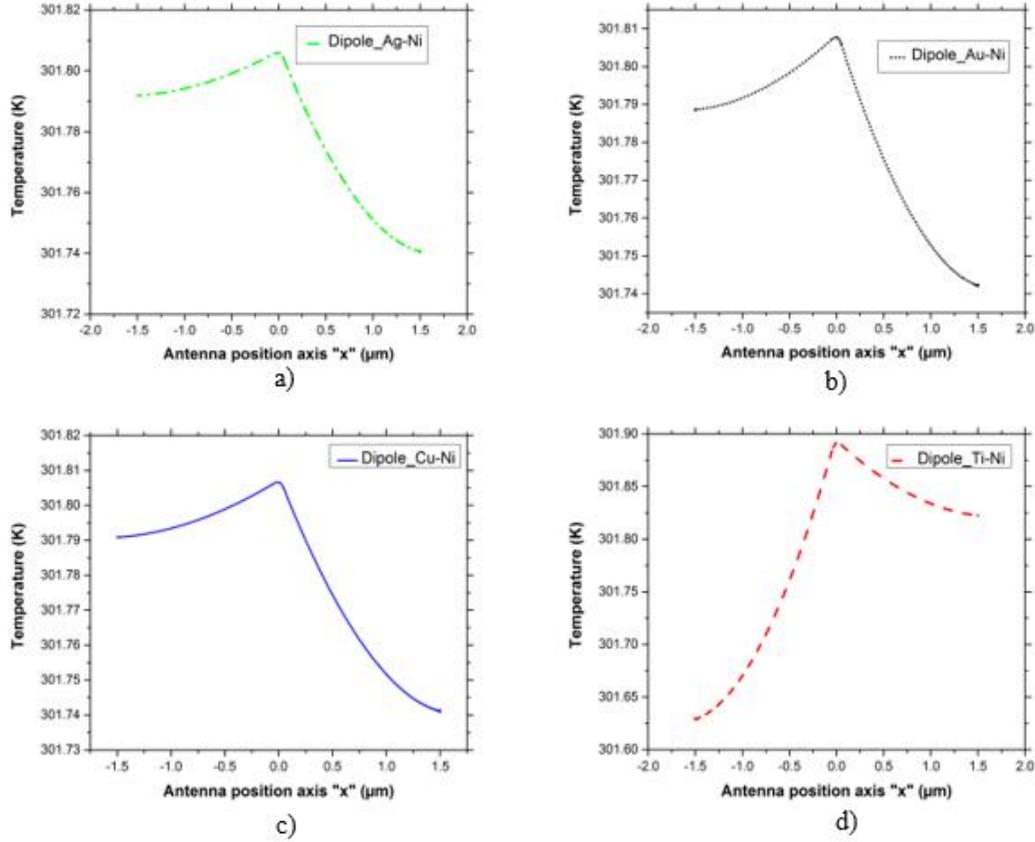


Figure 9. Temperature obtained in dipole nanoantenna, (a) Silver-Nickel, (b) Gold-Nickel, (c) Copper-Nickel and (d) Titanium-Nickel.

Table 2 shows the effective temperature increase of the bi-metallic junction, and the voltage response of the antenna was evaluated by using the Seebeck effect, described in (Eq. 5). The Seebeck coefficients were taken as bulk ($S_{Ag} = S_{Au} = S_{Cu} = 6.5 \mu\text{V/K}$, $S_{Ti} = 7.2 \mu\text{V/K}$ and $S_{Ni} = -15 \mu\text{V/K}$).

Table 2. Difference temperature obtained of the ends of nanoantennas and Seebeck voltage of dipole nanoantennas with $3\mu\text{m}$ of length.

Material junction	ΔT (K)	V_{oc} (μV)
Ag-Ni	0.051	1.096
Au-Ni	0.046	0.989
Cu-Ni	0.049	1.036
Ti-Ni	0.193	4.282

CONCLUSIONS

Metallic nanoantennas can be tuned to absorb electromagnetic energy at infrared wavelengths. Through modifying geometries is possible have different broadband of energy harvested. We analyzed optical response of different metals getting the induced current on the nanoantennas, the results show that titanium at high frequencies has the best response. In thermal analysis we obtained the difference temperature along of the nanoantenas, the higher difference was for the junction Ti-Ni and its open circuit voltage was 4.282 μV . Large arrays of nanoantennas that act as thermocouples can be implemented to increase voltage response. Thermo-electrical nanoantennas can work together with traditional solar cells to increase the harvest of spectral energy.

ACKNOWLEDGMENTS

The author B. Mora Ventura acknowledges the scholarship of the Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACYT), also the Universidad de Guadalajara and the Universidad Autónoma de San Luis Potosí for the support to accomplish this research.

FJG would like to acknowledge support by project 32 of “Centro Mexicano de Innovación en Energía Solar” from Fondo Sectorial CONACYT-Secretaría de Energía-Sustentabilidad Energética and by the National Laboratory program from CONACYT through the Terahertz Science and Technology National Lab (LANCYTT).

REFERENCES

- [1] Garret M. and Sachit G., “Rectenna Solar Cells”, New York: Springer, pp. 231-257, (2013).
- [2] Kotter D., Novack S., Slafer W., and Pinhero P., “Theory and manufacturing processes of Solar Nanoantenna Electromagnetic Collectors, ” J. Sol. Energy Eng., vol. 132(1), pp.011014(9 pages), (2010).
- [3] Novotny L. and van Hulst N., “Antennas for light”, Nat. Photonics, vol. 5, pp. 83-90, (2011).

- [4] Biagioni P, Huang JS, Hecht B., "Nanoantennas for visible and infrared radiation", Reports on Progress in Physics 75.2: 024402, (2012).
- [5] González F. J. and Boreman G., "Comparison of dipole, bowtie, spiral and log-periodic IR antennas," *Infrared Phys. Technol.* 46(5), 418–428, (2005).
- [6] Hagerty J. A., Helmbrecht F. B., McCalpin W. H., Zane R., and Popovic Z. B., "Recycling ambient microwave energy with broad-band rectenna arrays," *IEEE Trans. Microw. Theory Tech.* 52(3), 1014–1024, (2004).
- [7] Bean J.A., Tiwari B., Bernstein G.H., Fay P. and Porod W., "Thermal infrared detection using dipole antenna-coupled metal-oxide-metal diodes," *J. Vac. Sci. Technol. B*, vol. 27(1), pp. 11-14, (2009).
- [8] Zhu Z., Joshi S., Grover S., and Moddel G., "Graphene Geometric Diodes for Terahertz Rectennas," *J. Phys. D: Appl. Phys.*, vol. 46, pp. 185101 (2013).
- [9] B. Edgar, Alda Javier and G.Francisco J., "Conversion efficiency of broad-band rectenas for solar energy harvesting applications", *Optics Express*, vol. 21, Issue S3, pp. A412-A418 (2013).
- [10] Vandenbosch G. A. E. and Ma Z., "Upper bounds for the solar energy harvesting efficiency of nano-antennas," *Nano Energy* 1(3), 494–502 (2012).
- [11] Ma Z. and Vandenbosch G. A. E., "Optimal solar energy harvesting efficiency of nano-rectenna systems," *Sol.Energy* 88, 163–174 (2013).
- [12] Briones, E., et al, "Seebeck nanoantennas for the detection and characterization of infrared radiation," *Optics express*, 22(106), A1538-A1546 (2014).
- [13] Graf A., Arndt M., Sauer M. and Gerlach G., "Review of micromachined thermopiles for infrared detection," *Meas. Sci. Technol.*, vol. 18, pp. R59–R75, (2007).
- [14] krenz P.M., Tiwari B.T., Szakmany G.P., Orlov A.O., Gonzalez F.G. and Boreman G.D., "Response Increase of IR Antenna-Coupled Thermocouple Using Impedance Matching," *J. Quantum Electron.*, vol. 48(5), pp. 659-664, May (2012).
- [15] Szakmany G.P., Krenz P.M., Orlov A.O., Bernstein G.H. and Porod W., "Antenna-Coupled Nanowire Thermocouples for Infrared Detection," *IEEE Trans. Nanotechnol.*, vol. 12(2), pp. 163-167, March (2013).

- [16] Gonzalez F. J., Alda J., Simon J., Ginn J., and Boreman G., "The effect of metal dispersion on the resonance of antennas at infrared frequencies," *Infrared Physics and Technology*, vol. 52, no. 1, pp. 48-51, (2009).
- [17] Palik, Edward D. *Handbook of optical constants of solids*. Vol. 3. Academic press, (1998).
- [18] Ordal, Mark A., et al. "Optical properties of fourteen metals in the infrared and far infrared: Al, Co, Cu, Au, Fe, Pb, Mo, Ni, Pd, Pt, Ag, Ti, V, and W." *Applied optics* 24.24: 4493-4499 (1985).
- [19] Ordal, Mark A., et al. "Optical properties of Au, Ni, and Pb at submillimeter wavelengths." *Applied Optics* 26.4:744-752 (1987).
- [20] Kovetz A., "The Principles of Electromagnetic Theory", Cambridge University Press, Cambridge, UK (1990).
- [21] Incropera F. P. and De Witt D. P., "Fundamentals of Heat and Mass Transfer", 4th ed., John Wiley & Sons, New York (1996).
- [22] Cuadrado, Alda, J., and González, F. J., "Multiphysics simulation for the optimization of optical nanoantennas working as distributed bolometers in the infrared", *Journal of Nanophotonics*, 7(1), 073093-073093, (2013).
- [23] Ioffe, Abraham Fedorovich. "Semiconductor thermoelements and thermoelectric cooling." (1957).
- [24] Rowe, David Michael, ed. "Thermoelectrics handbook: macro to nano". CRC press, (2005).
- [25] Graf A., Arndt M., Sauer M., and Gerlach G., "Review of micromachined thermopiles for infrared detection," *Meas. Sci. Technol.* 18(7), R59–R75 (2007).

Publicación 2 en congreso internacional

Tunable Resonance of Star Shaped Nanostructures

R. Diaz de Leon-Zapata^{1,*2}, B. Mora-Ventura², M. Jose-Yacamán³, and F. J. González²

¹Instituto Tecnológico de San Luis Potosí, Av. Tecnológico s/n Soledad de Graciano Sánchez, San Luis Potosí, C.P. 78376, México.

²Universidad Autónoma de San Luis Potosí, Álvaro Obregón 64, San Luis Potosí, San Luis Potosí, C.P. 78000, México.

³University of Texas at San Antonio, 1 UTSA Circle, San Antonio, TX 78249.

ramondz@hotmail.com

Abstract: Auto assembled Ag-ZnO [1] star shaped nanostructures depicted in figure 1, presents their natural electromagnetic resonance at 60 THz [2]. In this work we present that is possible changing this value by covering it with a variable in thickness layer of gold. The analysis is performed by numerical simulations using COMSOL Multiphysics®.

Keywords: COMSOL Multiphysics®, Nanoantennas, FEM simulation.

1. Introduction

Recent advances in nano fabrication, electron microscopy imaging and near field microscopy allowed metallic structures to be defined and characterized with sizes comparable or smaller to that of visible light, wavelengths of several hundred nanometers, opened up the possibility of apply nanotechnology and nanoscience in areas with pressing needs, e.g., in sensing, imaging, energy harvesting, and disease cure and prevention, have brought revolutionary improvements.

Metallic nanostructures can convert freely propagating electromagnetic radiation into localized energy, also can control and manipulate optical fields at the nanometer scale. Modifying the geometry and material of nanostructures is possible perform a strong coupling with the magnetic and/or electric component of an incident electromagnetic wave, in which the resonant frequency is dependent on the nanostructure size and shape.

In this work we present the electromagnetic analysis of star shaped nanostructures.

Auto assembled Ag-ZnO [1] star shaped nanostructures depicted in figure 1, presents their natural electromagnetic resonance at 60 THz [2]. Since star shaped geometry showed some interesting interactions with electromagnetic field in the optical regime, it is proposed in this work to adapt the geometry to perform some numerical studies assuming a possible subsequent fabrication by the method of nanolithography, a more convenient method to perform superficial nanoantennas which is the main (but not limited to it) application purpose as will be discussed later in this work. By covering the original auto assembled Ag-ZnO structure (fig. 1) with gold (Au), it is possible to change and adjust their electromagnetic field interaction allowing the purpose of having the directional-enhancer electric field nanostructure.

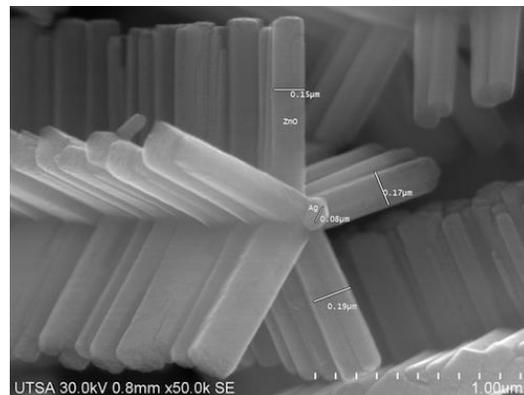


Figure 1. Star shaped nanostructure.

1.1 Design parameters of nanostructure for numerical simulations

2	Length of arms	0.72 μm
	Angle	72°
	Thickness	0.02 μm
	Width of arms	0.07 μm

Table 1. Parameter of the star shaped nanostructures.

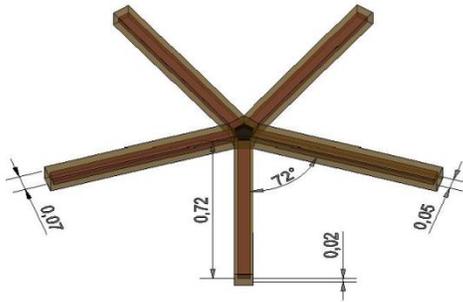


Figure 2. Design parameter.

2. Computational Methods

Using the COMSOL's RF module [3] to solve equation 1, and applying a planar electromagnetic wave, we can find the interaction of electromagnetic field over the structure for different thickness layer of gold.

$$\nabla \times (\nabla \times E) - k_0^2 \epsilon_r E = 0 \quad (1)$$

Equation 1 is obtained by Faraday, Ampere equations and constitutive relations.

$$\nabla \times H = J + \frac{\partial D}{\partial t} \quad (2)$$

$$\nabla \times E = -\frac{\partial B}{\partial t} \quad (3)$$

Using constitutive relations we get:

$$\nabla \times H = \sigma E + \frac{\partial \epsilon E}{\partial t} \quad (4)$$

$$\nabla \times E = -\mu \frac{\partial H}{\partial t} \quad (5)$$

To perform the simulation, it was constructed a geometry using three different domains, one of them for the star shaped nanostructure, other for covering the nanostructure with air and used as a port to generate the electromagnetic field and applying the scattering boundary condition, and the last one used as a silicon or another material substrate, scattering boundary condition and where the nanostructure is supported or placed.

In order to have a better result we used tetrahedral mesh. Figure 3 shows the mesh of the structure.

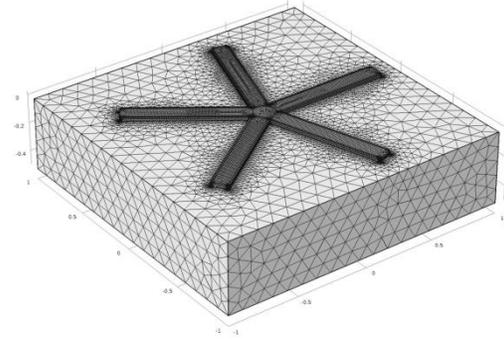


Figure 3. Mesh of the geometries

For each different thickness, must be necessary find their respective frequency of resonance where COMSOL's capabilities are so helpful allowing to perform complex, large and repetitive amount of calculations and presenting the results in a both, qualitative (3D images representing the behavior of electromagnetic field) and quantitative (data, tables and line graphs without any other postprocessing tools or software). For a particular case of a 50 nm of thickness, figure 4 depicts the shape and intensities in their resonance frequency and figure 5 depicts the electromagnetic field intensity response as a function of frequency. As geometry is varying, some other unique properties of COMSOL were used: "Geometry Import" and "LiveLink for Autocad".

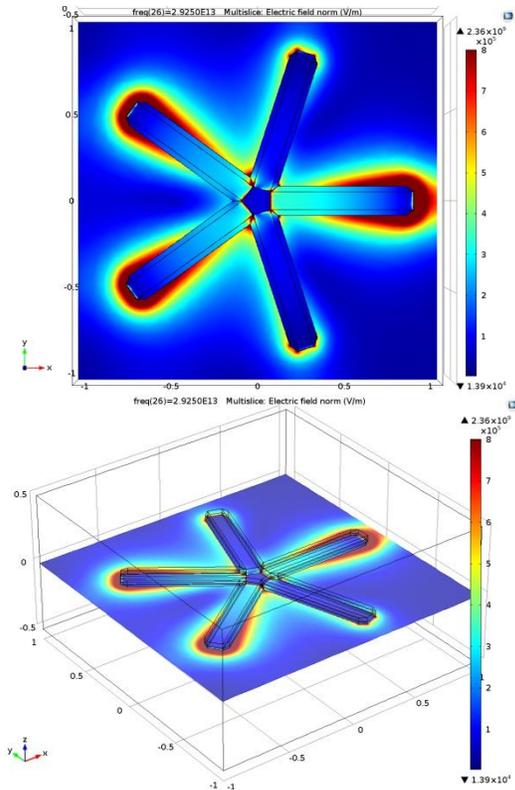


Figure 4. Electric field norm around the nanoantenna under resonant frequency condition for 50 nm of thickness.

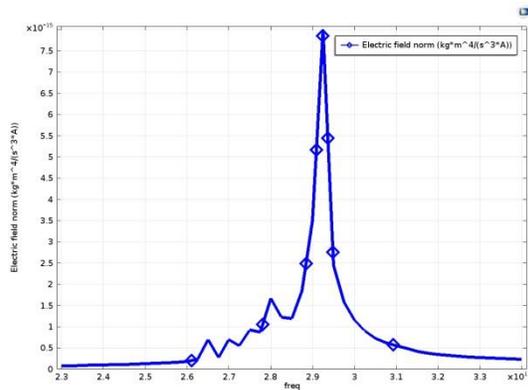


Figure 5. Freq. vs. Electric field norm.

3. Results and discuss

Using COMSOL Multiphysics® based in finite element method, numerical simulation was

realized, getting like result the electric field distribution for star shaped nanostructures.

It is possible to have control about the resonance frequency over the star shaped Ag-ZnO nanostructures by covering them with a layer of gold. The resonance frequency is a function of the layer thickness as can be seen in figure 6 and figure 7. Figure 6 shows the electric field concentration of nanostructures and their respective resonance frequency.

The results show in figure 7 the curve of frequency vs. gold layer thickness is approximated to linear fitted curve.

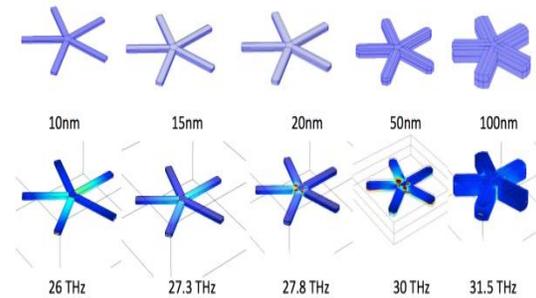


Figure 6. Relation between gold layer thickness and their respective resonant frequency.

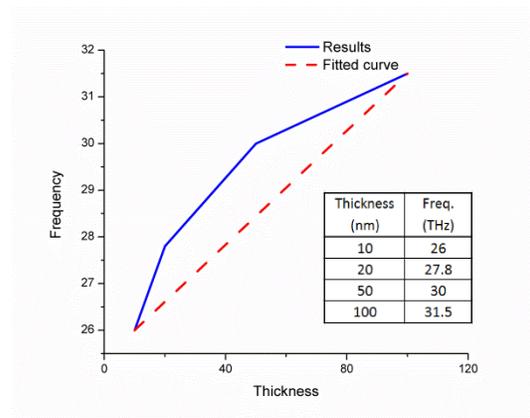


Figure 7. Frequency vs. gold layer thickness.

4. Conclusions

Adding a layer of gold allows the control of resonance frequency of star shaped Ag-ZnO nanostructures which can be used as THz radiation detection and/or as nanoantennas for TB/s communications which is the next step on this research.

Numeric simulation based in FEM Method is helpful to optimize the performance of nanostructures at infrared and visible radiation.

5. References

1. González F J, Ilic B, Alda J and D. B G Antenna-Coupled Infrared Detectors for Imaging Applications IEEE J. Sel. Top. Quantum Electron 11 4 (2005)
2. Gonzalez F J Wiley Encyclopedia of Electrical and Electronics Engineering, ed J Webster (USA: Wiley) pp 1-5 (2015)
3. Gonzalez F J Thermal-impedance simulations of antenna-coupled microbolometers Infrared physics & technology 4 (2005)
4. Fumeaux C, Gritz M A, Codreanu I, Schaich W L, González F J and Boreman G D Measurement of the resonant lengths of infrared dipole antennas Infrared Physics & Tecnology 10 (2000)
5. Gonzalez F J, Alda J, Simón J, Ginn J and Boreman G The effect of metal dispersion on the resonance of antennas at infrared frequencies Infrared Physics & Technology 4 (2009)
6. Reeves R C and Rowe J E Genetic Algorithms - Principles and Perspectives A Guide to GA Theory (U.S.A: Kluwer Academic Publishers) (2003)
7. Mitchell M An Introduction to Genetic Algorithms (Massachussets: Massachusetts Institute of Technology) (1999)
8. Derek L S Antenna Design Using Genetic Algorithms. In: Genetic and Evolutionary Computation Conference (GECCO), (New York, NY) (2002)
9. Goldberg D E Genetic Algorithms in Search, Optimization and Machine Learning (Boston, MA.: Kluwer Academic Publshers) (1989)
10. Rutkowski L Computational Intelligence (Berlin: Polish Scientific Publishers) (2008)

11. Feichtner T, Selig O, Kiunke M and Hecht B Evolutionary Optimization of Optical Antennas Physical Review Letters 109 5 (2012)
12. Chakraborty S, Mukherjee U and Anchalia K Circular micro-strip(Coax feed) antenna modelling using FDTD method and design using genetic algorithms: A comparative study on different types of design techniques. In: Computer and Communication Technology (IC CCT), 2014 International Conference on, ed IEEE (Allahabad: IEEE) (2014)
13. M. Mitchel "An Introduction to Genetic Algorithms", MIT Press (1999).
14. Hahn B and Valentine D Essential Matlab (U. S. A.: Academic Press) (2013)
15. Zhong Y K, Fu S M, Ju N P, Chen P Y and Lin A Experimentally-implemented genetic algorithm (Exp-GA): toward fully optimal photovoltaics Optics Express 23 (2015)
16. Briones E, Cuadrado A, Briones J, Díaz de León R, Martínez-Antón C, McMurty S, Hehn M, Moutaigne F, Alda J and González F J Seebeck nanoantennas for the detection and characterization of infrared radiation Optics Express 22 9 (2014)
18. B. Mora-ventura, R. Díaz de León, G. García Torales, J. L. Flores, J. Alda, and F. J. González. "Responsivity and resonant properties of dipole, bowtie, and spiral Seebeck nanoantennas". Journal of Photonics for Energy 6 2 (2016)

6. Acknowledgment

This work was supported by the "Cátedras CONACYT" program, project 32 of "Centro Mexicano de Innovación en Energía Solar" from Fondo Sectorial CONACYT-Secretaría de Energía-Sustentabilidad Energética and by the National Laboratory program from CONACYT through the Terahertz Science and Technology National Lab (LANCYTT). R. Díaz de León-Zapata thanks Tecnológico Nacional de México for the "Licencia por Beca Comisión 2015" scholarship and the "Materiales y Dispositivos Optoelectrónicos de la Universidad Autónoma de San Luis Potosí" academic group for their support and collaboration.

Publicación 3 en congreso internacional

Fabrication and Thermal Analysis of Micro Thermocouples for Energy Harvesting

Brhayllan Mora-Ventura, Gabriel González, Francisco J. González.

Universidad Autónoma de San Luis Potosí, Sierra Leona, 550, Lomas 2da Sección,
Building CIACYT, 78210 San Luis Potosí, México.

Abstract

We present the thermal study of micro thermocouples fabricated by electron beam lithography process, the micro thermocouples (MTCs) are based on a recently discovered thermoelectric effect in single-metal nanostructures with cross-sectional discontinuity, single-metal MTCs would simplify the fabrication process and allow the large-scale production of these devices using fabrication technologies such as nanoimprint lithography. In this work, we have investigated the temperature difference between the asymmetric unions of the micro thermocouples using Optotherm EL InfraSight 320 thermal imaging camera. Results show that single-metal MTCs are promising structures that could be used to harvest thermal radiation and generate electric energy through the Seebeck effect.

Keywords: Thermal radiation, Seebeck effect, micro thermocouples.

1. INTRODUCTION

Thermoelectric devices play an important role in energy management and the recovery of wasted heat. Automotive exhaust, home heating and industrial processes all generate waste heat that could be converted to electricity by using thermoelectrics. As thermoelectric generators are solid-state devices, they are silent, reliable and scalable, making them ideal for small, distributed power generation. In 1990s theoretical predictions suggested that thermoelectric efficiency could be greatly enhanced through nanoscale engineering. Researchers have been realized experimental efforts to demonstrate the theories suggesting the possibility to achieve high-efficiency materials¹. Thermocouples have too much impact in thermoelectric energy conversion. Conventional thermocouples are made from metal or metal alloys. They generate small voltages, typically tens of microvolts per degree temperature difference by the Seebeck effect².

Thermocouple is a thermoelectric device made normally of two dissimilar conductors (X and Y) connected at two points and having different absolute Seebeck coefficients (S_X and S_Y). Suppose one side of two connected is hotter than the other, ΔT (Fig. 1). Since the material, its electrons are free to move. The electrons diffuse from the hot side to the cold side. An open-circuit voltage V_{oc} develops across the hot and the cold junctions in response to a temperature difference. The open-circuit voltage is proportional to both this temperature difference and the difference in absolute Seebeck coefficients³, such that

$$V_{oc} = (S_X - S_Y) \Delta T \quad (1)$$

where $S_X - S_Y$, is the relative Seebeck coefficient.

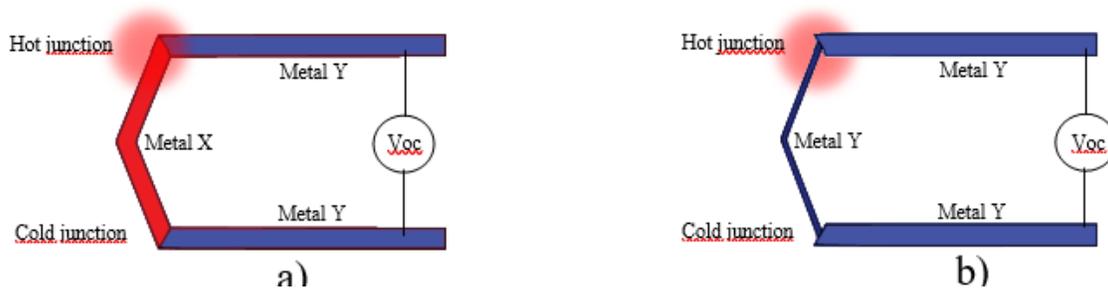


Figure 1. Schematics of conventional and single-metal thermocouples. (a) Traditional thermocouple by two different conductors. (b) Thermocouple constructed from the same conductor material having wide and narrow contiguous segments.

A newly discovered thermoelectric effect has been studied. Gergo P. Szakmany et al. showed that in single-metal nanostructures with crosssectional discontinuity is possible generate microvolts. They demonstrate “shape-engineered” nanowire thermocouples at room temperature by constructing them from the same metal, but with various cross sections. The reduction of the absolute Seebeck coefficient is more pronounced in the narrower wires, resulting in a nonzero relative Seebeck coefficient between the two wire segments. They vary the cross section of the nanowires forming a thermocouple through width-variation since the width can be accurately controlled by electron-beam lithography, while the thickness of the metal layer is defined by a single metal deposition, and is therefore the same for both the wide and the narrow segments⁴. The reduction of the absolute Seebeck coefficient of metallic thin films has been investigated⁵⁻⁷.

In this work, we present the fabrication of the microstructure by electron beam lithography, the deposition of the metal was by thermal evaporation. The thermal analysis of metallic microstructures is featured using Optotherm EL InfraSight 320 thermal imaging camera. In this paper we present the

device, but in the future we pretend connect a source current on heaters and generate radiation by Joule effect and we expect get the open voltage according the Seebeck effect.

2. DESIGN AND FABRICATION

We propose a device to study the thermoelectric effects by the crosssectional discontinuity of microwire, we fabricated the array of microthermocouples according to the figure 2 a). We design heaters to raise the temperature in a variation of microwire width.

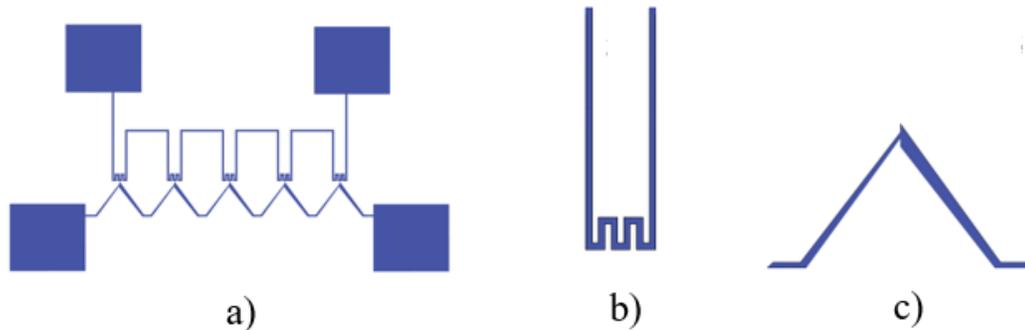


Figure 2. (a) Schematic of the heaters and microthermocouples array connected to the lead lines of the bonding pads. (b) Heater design. (c) Microthermocouple design.

The geometry of microthermocouples was designed of this way because the crosssectional discontinuity can be near to the heaters and would have maximum difference of temperature. The width of the narrow wire segment is $3\ \mu\text{m}$, and the wide wire segment is $16.5\ \mu\text{m}$ wide. The distance of the crosssectional discontinuity microthermocouple and the heater is $5\ \mu\text{m}$. The width of the line of heaters is $5\ \mu\text{m}$. Bonding pads have length $280\ \mu\text{m}$ and width $245\ \mu\text{m}$.

The separation of each heater is $150\ \mu\text{m}$ and we have 5 groups of heaters and crosssectional discontinuity microthermocouple.

Fabrication

The device is fabricated by electron beam lithography (EBL), we use a Si wafer coated with a $300\ \text{nm}$ -thick SiO_2 layer.

Then we deposited positive resist (PMMA 850) on a SiO_2 layer. The PMMA layer was deposited using spin coating with $1500\ \text{rpm}$, the thickness of the resist film was about $300\ \text{nm}$. After this process, the sample was dried using a hot plate. The devices was patterned with a "FEI INSPECT F50"

Scanning Electron Microscope (SEM), the patterning parameters used to get the array of thermocouples were, 30KeV, a current of 0.07320 nA and area dose of $500 \mu\text{C}/\text{cm}^2$.

Later the sample was first developed for 90 seconds in a mixture of MIBK:IPA (methyl isobutyl ketone: isopropanol alcohol) in a relation of 1:3, then in pure IPA for 80 seconds. The sample was dried with Nitrogen gun. The sample was metallized by 49 nm-thick Al (Nickel) layer using a PVD (physical vapor deposition) at $P= 3 \times 10^{-5}$ mbar, we used 60 mg of Al and 180A of current. In the last step of fabrication (Lift-off) we introduce the sample in acetone during 3 hours and then another 20 seconds under ultrasonic agitation. The purpose of the ultrasonic agitation was to clear away the remaining resist (PMMA) particles and metal on the substrate.

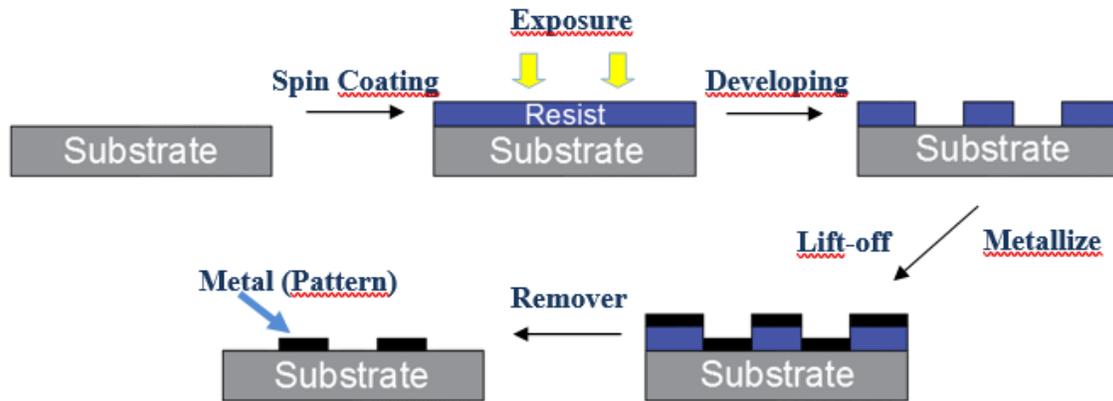


Figure 3. The process flow diagram of fabricating device on an un-patterned substrate.

3. RESULTS

Fabrication

Figure 4 shows the device fabricated, we used a dualbeam microscope Helios G4 CX to get the micrographs.

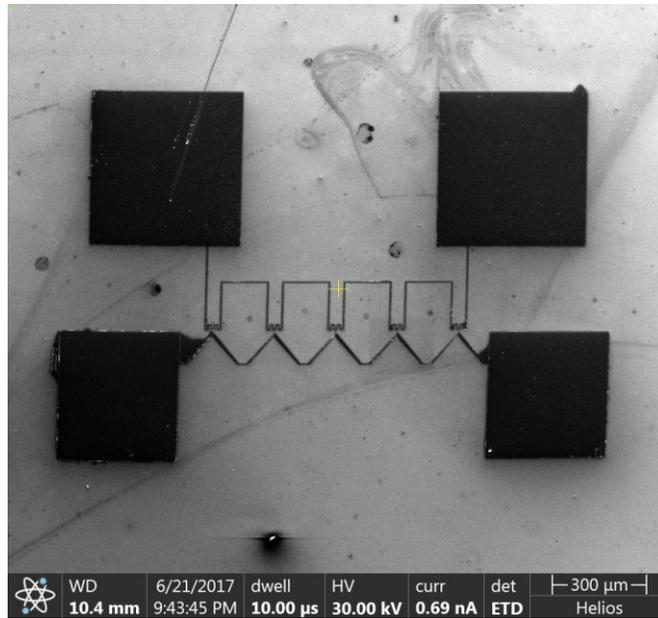


Figure 4. Scanning electron micrograph of a device. The microthermocouples and heaters are constructed from a single layer of aluminum wires with various cross sections.

Figure 5 shows the dimensions of the aluminum wires.

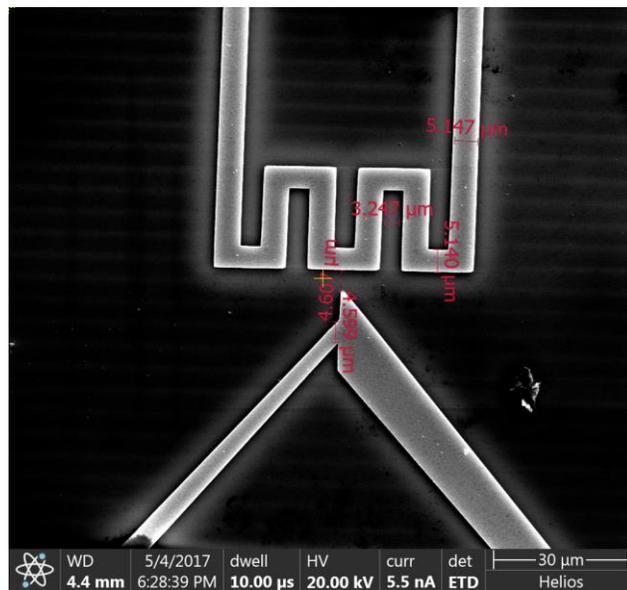


Figure 5. Scanning electron micrograph of a segment of the microthermocouple array and heaters. The microthermocouples are connected in series at their cold junctions. The separation between the thermocouple and the heater is 4.6 μm .

Thermal analysis

Figure 6 shows the micrograph captured by thermal imaging camera (Optotherm EL InfraSight 320). We used a controlled Peltier cell to get a difference of temperature between our substrate and the device, the temperature of the Peltier cell was 90 °C.

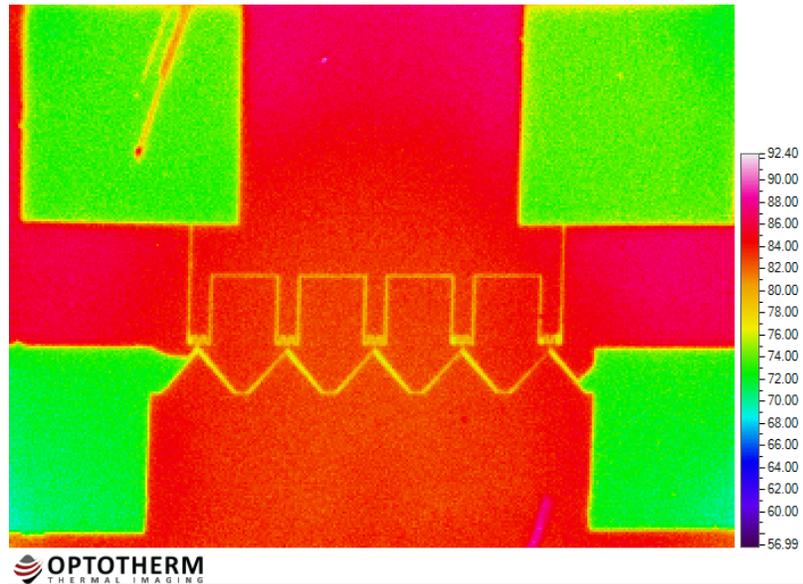


Figure 6. Thermal micrograph of the device.

We use a voltage supply to induce a current in our heaters, we analyzed the thermal behavior on wires. Figure 7 shows the points under analysis.

Table 1. Thermal measurements and voltage supplied

Voltage Supply (Volts)	Peltier cell Temperature °C	Temperature °C Point 3 (discontinued union)	Temperature °C Point 4 (heater wire)	Temperature °C Point 5 (heater wire)
0	90	94.5	93.8	93.6
31.7	90	96.13	96.04	94.9

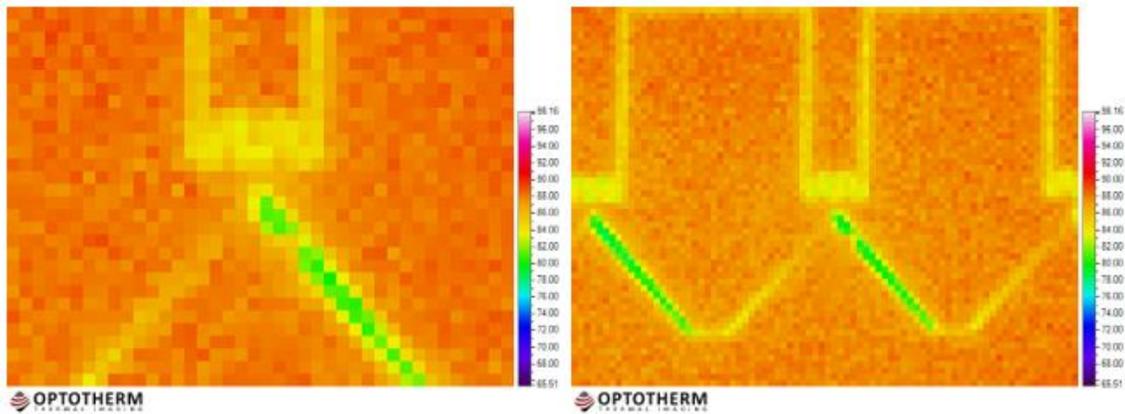


Figure 7. Thermal micrograph of a segment of the microthermocouple array and heaters.

4. CONCLUSIONS

We study the fabrication and thermal behavior our device, the fabrication process was improved, getting better adhesion results in our substrate and the metal with aluminum. The fabricate dimensions was different with design dimension because we need to reduce the developing time. We measured different points our device but mainly in this work analyzed the temperature changes when we induced a current on heaters. We got 2 °C difference in the point of discontinued union microthermocouple using the heater. This result will be helpful to get an electrical characterization. Micro thermo-electrical devices can work together with traditional systems to increase the harvest of spectral energy.

ACKNOWLEDGMENTS

The author B. Mora Ventura acknowledges the scholarship of the Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACYT), also the Universidad Autónoma de San Luis Potosí for the support to accomplish this research.

FJG and B. Mora Ventura would like to acknowledge support by project 32 of “Centro Mexicano de Innovación en Energía Solar” from Fondo Sectorial CONACYT-Secretaría de Energía-Sustentabilidad Energética and by the National Laboratory program from CONACYT through the Terahertz Science and Technology National Lab (LANCYTT).

REFERENCES

- [1] Tervo, Jyrki, et al. "State-of-the-art of thermoelectric materials processing." VTT Technical Research Center of Finland, Vuorimiehentie (2009).
- [2] Rowe, David Michael, ed. Thermoelectrics handbook: macro to nano. CRC press, 2005.
- [3] Martin, J., T. Tritt, and Ctirad Uher. "High temperature Seebeck coefficient metrology." *Journal of Applied Physics* 108.12 (2010): 14.
- [4] Szakmany, Gergo P., et al. "Antenna-coupled single-metal thermocouple array for energy harvesting." *Solid State Device Research Conference (ESSDERC), 2015 45th European. IEEE, 2015.*
- [5] Jain, G. C., and B. S. Verma. "Size effect in the electrical conductivity and seebeck coefficient in thin metallic films." *Thin Solid Films* 15.2 (1973): 191-198.
- [6] X. G. Zhang, H. Choi, A. Datta, and X. C. Li, "Design, fabrication and characterization of metal embedded thin film thermocouples with various film thicknesses and junction sizes," *J. Micromech. Microeng.*, vol. 16, no. 5, pp. 900–905, May 2006.
- [7] M. C. Salvadori, A. R. Vaz, F. S. Teixeira, M. Cattani, and I. G. Brown, "Thermoelectric effect in very thin film Pt/Au thermocouples," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 88, no. 13, pp. 113106–113108, Mar. 2006.

Publicación en revista indizada

Thermal Impedance Analysis of Nano-Dipole Linear Arrays for Energy Harvesting Applications

Brhayllan Mora-Ventura^{1,2}, John Eder Sánchez¹, Gabriel González¹, and Francisco J. González¹

¹Universidad Autónoma de San Luis Potosí, Sierra Leona, 550, Lomas 2da Sección, Building CIACYT, 78210 San Luis Potosí, México.

²Universidad Marista de San Luis Potosí, Beato Marcelino Champagnat, 305, 78413, San Luis Potosí, S.L.P., México.

Abstract

Efficient thermal harvesting energy applications, based on the Seebeck effect, require systems with high thermal impedance to enhance both the thermal and electric response. In this work, we study the thermal impedance (Z_{th}) response on steady conditions of metal dipole nanoarrays fabricated on polyimide and silicon dioxide (SiO_2) substrates by electron beam lithography. The experimental thermal characteristics of the nanoarray, measured with a thermal camera, reveals a high delta temperature of 89.8 °C. and a high thermal impedance of 292.2 (K/W) in polyimide, in contrast with the ones obtained in SiO_2 , which were around 63.9 °C and 13.5 (K/W), respectively. In addition, numerical simulations were performed using COMSOL multi-physics software. The numerical results support a higher thermal impedance in polyimide than the one for SiO_2 . These results show that polyimide could be a better thermal responsive substrate for thermal harvesting energy applications compared with its counterpart fabricated on SiO_2 .

Keywords: thermal impedance, nanoarrays, thermoelectric, nanostructures.

INTRODUCTION

The harvesting of thermal and electromagnetic radiation has gained a lot of attention during the last decades in fields such as: opto-electronics, nano-generators, and thermoelectric devices [1,2]. For instance, the need of thermal harvesting applications to convert thermal waste dissipation into useful electrical current has increase due to the availability of power waste in thermal-solar cells and photovoltaic cells. Several studies have shown that the thermal dissipation response depends on several parameters such as: temperature, substrate material, morphology and dimensions.

More recently, some reports are focused on the heat transfer problems that appear due to the performance on thermal substrates [3-5]. For example, in the last decade, thermoelectric nanoantennas, also known as Seebeck nanoantennas (capturing energy of free-propagating infrared waves, turning them into induced current), have been successfully used as energy harvesters because their tunability and possibility of collecting the longest wavelengths of the solar spectrum, which make them useful to convert the thermal energy waste into electricity through the Seebeck effect. Additionally, during the conversion process, an increase in temperature is generated that could be converted into an electric potential through the Seebeck effect [6]. Nowadays, theoretical and experimental efforts in thermoelectric applications have contributed to enhance the performance and achieved high-efficiencies using different geometries, materials and substrates [7-8]. Indeed, a significant experimental improvement in the efficiency of nanostructured thermoelectric devices could be achieved by increasing their thermal insulation properties. For example, *Szakmany et.al* described nano-devices fabricated on silicon substrates with a silicon dioxide (SiO_2) layer for the study of thermal and electrical insulation. In fact, they have shown that a SiO_2 layer acts as a thermal insulator allowing the structures to reach higher temperature gradients [2,9-12]. Therefore, the use of flexible polymers has been proposed to improve the thermal insulation of thermoelectric devices. For example, polymers such as polyimide (PI) has the advantage, when used as a substrate, of being, flexible, lightweight, with high temperature resistance and low thermal expansion coefficient, among other characteristics [13-17].

It is widely understood that thermal impedance studies require the use of heat transfer theory including: conduction, radiation, convection and transient thermal impedance in steady conditions. Therefore, to describe the physics involved in thermal transport

phenomena, it is necessary to consider how geometry, power dissipation and time affect to the temperature distribution.

In this study we report the thermal impedance analysis of thermal dipole nanoarrays fabricated on flexible (polyimide) and hard substrates (silicon wafer with a 300 nm SiO_2 layer). The study includes; thermal experiments by using an in-plane thermal camera (Optotherm EL InfraSight 320) as well as numerical simulations using COMSOL Multiphysics to explore the steady thermal impedance associated to the thermoelectric device. Our results show that polyimide could be a more thermal responsive substrate in thermal harvesting energy applications compared with its counterpart fabricated on SiO_2 .

METHODS: FABRICATION – ELEMENTARY ANALYSIS

The thermal nanostructures, modeled as simple dipole nanoarrays, were fabricated by electron beam lithography over two different substrates: a silicon wafer coated with a 300 nm-thick SiO_2 layer, and another one coated with a polyimide layer. The nanoarrays were patterned using a “FEI INSPECT F50” Scanning Electron Microscope (SEM) equipped with a Field Emission Gun (FEG) and a Raith ELPHY-Quantum Electron Beam Lithography Nanofabrication System.

The procedure used for coating, as well as the electron beam lithography, can be found elsewhere and we refer the interested reader to Ref. [18] and references therein for a detailed explanation. After the lift-off process is performed, a nanoarray of 1x5 elements is revealed with the dipole antennas connected in series as shown in Figure 1.

The fabricated dipole antennas have a higher resonant wavelength than what is commonly considered as the Infrared region of the Electromagnetic Spectrum, for this particular work, we were interested in the thermal interaction of the antenna structure with the substrate, and the instrumentation used consisted in an thermal image microscope with a minimum spatial resolution of 5 μm per pixel, so a larger antenna would give us a better thermal pattern than a shorter antenna.

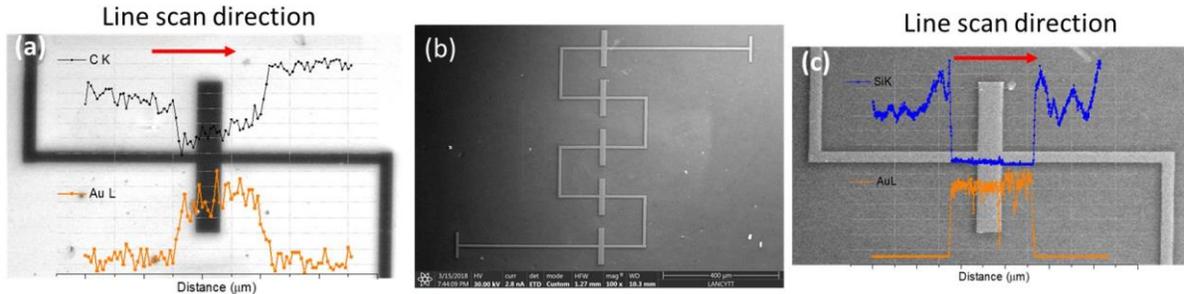


Figure 1. The images of the nanoarray were acquired with a microscope Helios G4 CX (a) EDXS analysis along the dipole element for the array on polyimide substrate. (b) scanning electron micrograph of the dipole nanoarray. (c) EDXS analysis along the dipole element for the array on silicon substrate.

Figure 1(a) shows an increase of the gold signal (orange line) as the scan runs from the polyimide substrate through the dipole element (red arrow above the scan path). Figure 1(b) shows a scanning electron micrograph of the fabricated nanoarray after the liftoff process. The figure shows the nanoarray extending upon both substrates with a pitch between dipole elements about 45 μm apart. An elementary analysis along the dipole element on the nanoarray allows the overlapping between the dipole array and the EDXS line scan profile for both substrates. Figure 1(c) shows an EDXS analysis along the dipole element and we can see an increase of the gold signal (orange line) as the scan runs from the silicon substrate through the dipole element (red arrow above the scan path).

Results

Thermal analysis (Experimental and Simulated)

The thermal study of the nanoarrays was performed using a thermal imaging microscope (Optotherm EL InfraSight 320) with a spatial resolution of 5 $\mu\text{m}/\text{pixel}$ and a Noise Equivalent Temperature Difference (NETD) of 0.15 $^{\circ}\text{C}$. A DC voltage was applied between the bond pads, pinned to the terminal of the nanoarray, to produce the heating of the dipole element by Joule effect (an illustration of the experiment is shown in Figure 2). Prior to the applied voltage, the system containing the nanoarray is brought to steady condition, after which the nanoarray reaches the target temperature during a time, long enough, to heat evenly the nanoarray dipole.

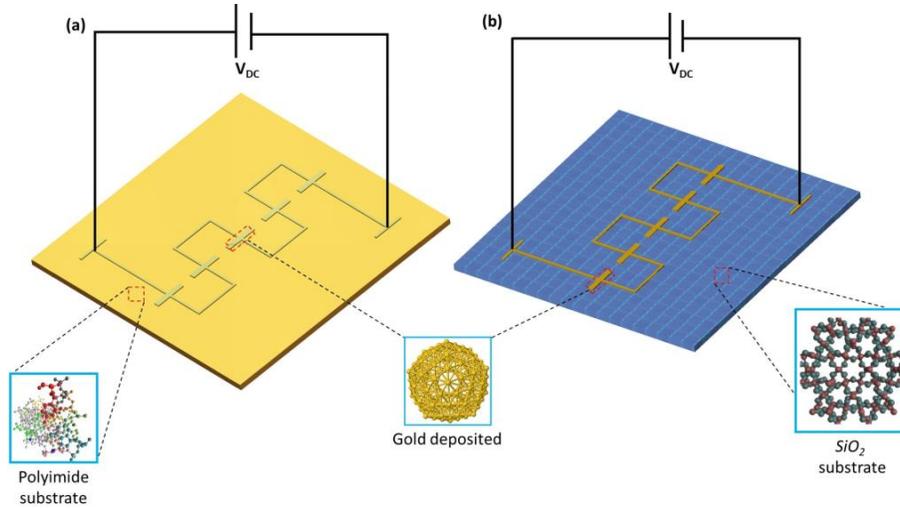


Figure 2. Representation of the dipole nanoarray on two different substrates. (a) polyimide, (b) SiO₂. The dipole elements are made of gold and arranged as a nanoarray with dimensions: length 125µm, width 20µm and thickness 50nm. The connection line has a width 10µm and 50 nm thick. The insets represented the organic nanostructure (polyimide) and the crystalline structure (SiO₂) respectively of the substrates. Moreover, the inset (center) depicted the gold nanostructure deposited during the sputtering of the metal material on both substrates.

Figure 3(a) shows a higher temperature distribution around the dipole elements of the nanoarray grown on the polymer substrate, which match perfectly with the thermal simulations (inset- Fig 3(a), as will be discussed below). It was observed that the thermal power dissipation that occurs in the dipole element of the nanoarray is more efficient when compared against its SiO₂ substrate counterpart (see Fig 3(b)), where the dissipation occurs along the whole substrate as shown in both experimental and simulation results (inset Fig 3(b)).

Thus, to gain an insight into thermal power dissipation for both configurations (polyimide and SiO₂), we calculated the thermal impedance Z_{th} , in steady conditions given by [19]:

$$Z_{th} = \frac{\Delta T}{P} \quad (1)$$

In this equation $\Delta T = (T_2 - T_1)$ represents the increase in temperature with respect to a reference point (see dash circle in Figure 3 (a-b)), and P is the electrical power dissipated by the circuit and calculated from the electrical resistance and the voltage measured directly on the nanoarray. Figure 3 (a-b) shows the temperatures marked as T_2 for $t \gg 0$, with T_1 as the reference temperature $T_1 = 60^\circ\text{C}$. From the thermal imaging results, the experimental thermal impedance was calculated considering T_1 and T_2 as shown in Table 1.

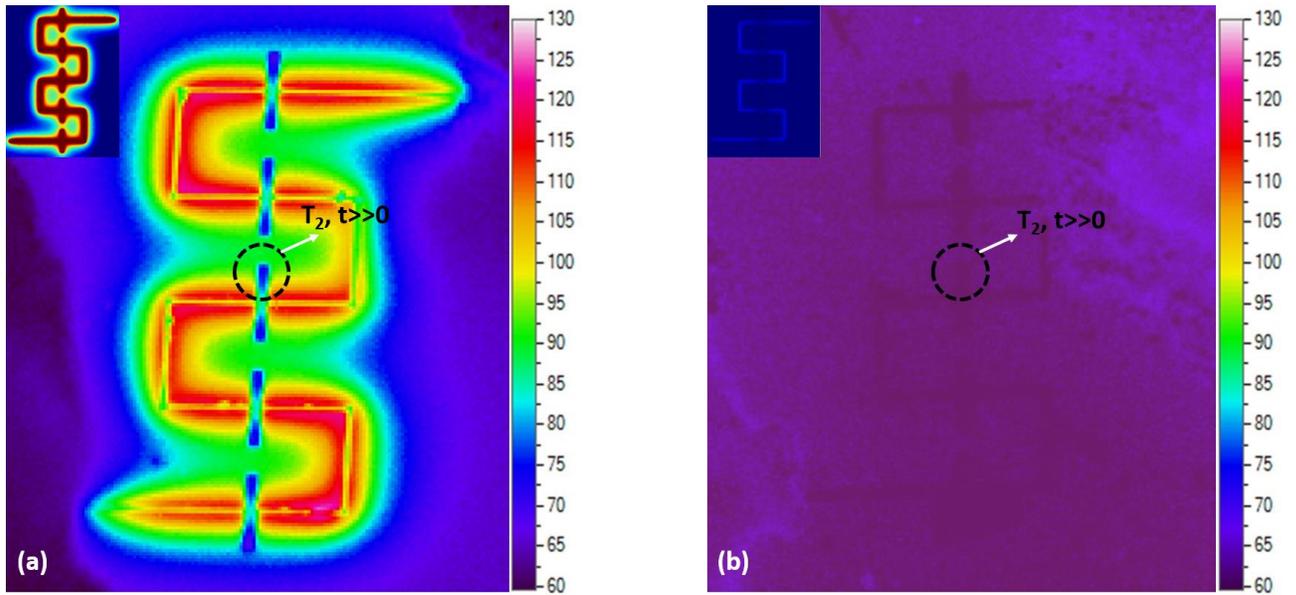


Figure 3. Thermal distribution along the dipole nanoarray fabricated on: a) polyimide and b) SiO_2 . The dash circle in (a) and (b) indicates the measured point of temperature gradients used for the thermal impedance calculations shown in Table 1.

Table 1. Experimental thermal impedance for polyimide and SiO_2 substrates obtained.

	Polyimide	SiO_2
T_1 ($^\circ\text{C}$)-Bias ($t=0$, $T=60$)	66.1	62.8
T_2 ($^\circ\text{C}$) - Measurement ($t \gg 0$)	89.8	63.9
Z_{th} (K/W)	292.2	13.5

From the thermal impedance measurements, it is possible to define a thermal performance that corresponds to a 95%, which is obtained from:

$$\eta = \left(1 - \frac{Z_{th(SiO_2)}}{Z_{th(polyimide)}}\right) \times 100 \quad (2)$$

In Table 1 it is inferred that the nanoarray fabricated on the polyimide substrate shows a higher thermal impedance (Z_{th}) than SiO_2 substrate. Thus, the results show a better thermal dissipation in the dipole nanoarray on the polyimide substrate. Additionally, we have plotted a temperature profile across a dipole line to obtain the temperature gradient along the active element on the nanoarray (Figure 4). This temperature profile is associated with the length (μm) that is crossed for a line through the dipole element, which is referred as *Arc length antenna*. Figure 4(a)-(b) shows the experimental and theoretical profiled obtained for both polyimide and SiO_2 substrates, respectively. From the data it is observed that the polyimide exhibits a higher thermal dissipation along the dipole element on the nanoarray when compared with the lower thermal dissipation occurring along the dipole element on the SiO_2 substrate.

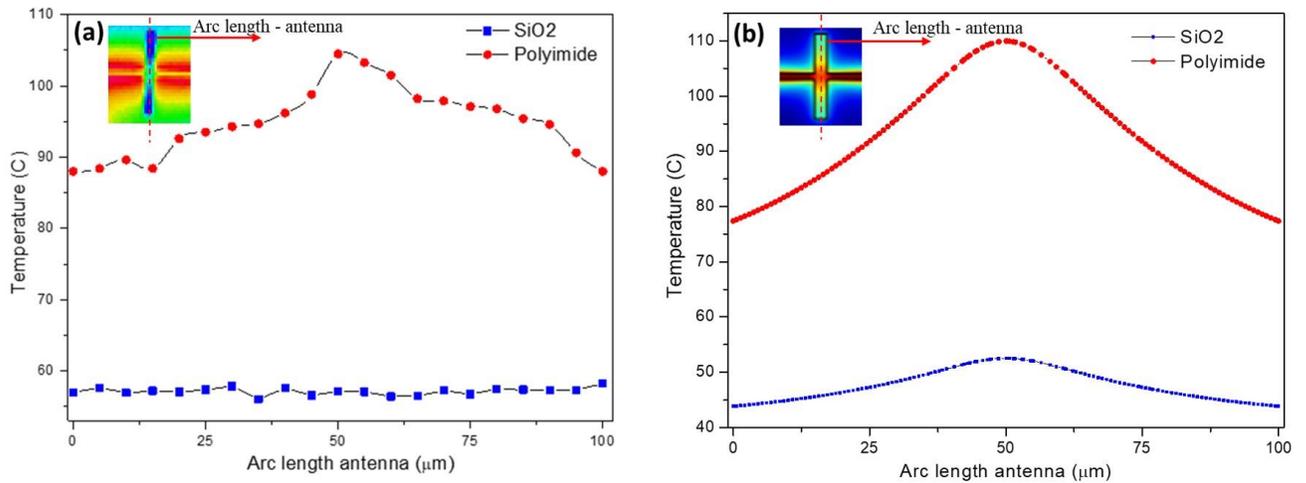


Figure 4. Temperature profile across a dipole line along the active element on the nanoarray for two different substrates. (a)-(b) experimental and theoretical measurements of the arc length along the dipole element respectively.

Thermal analysis (Simulations)

The theoretical study of the dipole nanoarray in two different substrates was carried out using the finite element method using COMSOL Multiphysics software. The configuration consists of a dipole nanostructure array on two different substrates, namely polyimide and

SiO_2 (thermal conductivity values of the polyimide = $0.15 \text{ W/m}^2\text{K}$, $SiO_2 = 1.4 \text{ W/m}^2\text{K}$). For the simulation the whole array was fabricated to measure $800 \times 650 \mu\text{m}$ (Figure 5 (a) and (b) Temperature map). The Nano-dipole antenna array was considered in the heat transfer simulation as the heat source, the power of these heat source was calculated by COMSOL from the electric current module and introduced to the heat transfer module through a Multiphysics simulation. The air/substrate boundary was considered a convective boundary condition with a convective heat transfer coefficient of $5 \text{ W}/(\text{m}^2\text{K})$.

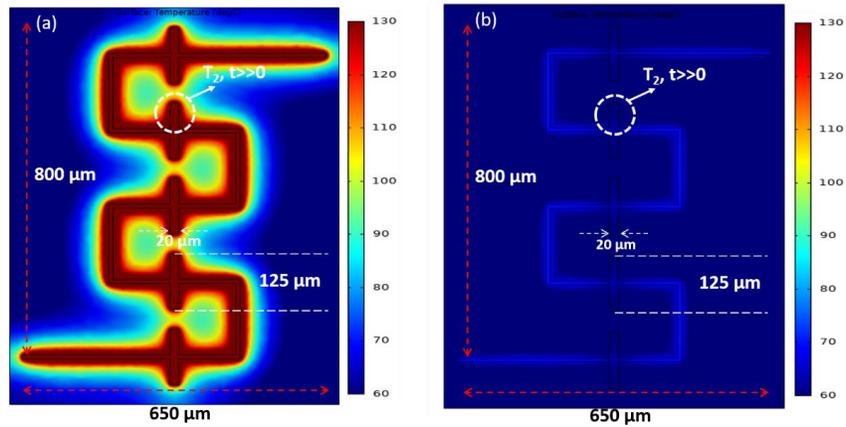


Figure 5. Thermal distribution for, a) polyimide substrate and b) SiO_2 substrate

For the thermal simulations, the back of the substrate was set at $60 \text{ }^\circ\text{C}$ in order to replicate the experimental conditions where the Infrared Temperature Patterns were measured on the device which was sitting on a 60°C hot plate in order to reduce noise from infrared reflections at room temperature.

As shown in Table 2, it was assigned two different thermal points $T_1(t=0)$ and $T_2(t \gg 0)$ (see dash circles in Figure 5 (a-b)). The theoretical values of the thermal impedance Z_{th} for polyimide and SiO_2 substrates are obtained from the values in Table 2. The results clearly show the increase of the thermal impedance for the polyimide with respect to the SiO_2 substrate. This behavior could be explained in terms of the thermal physical properties of the materials involved. For that reason, it has been determined that polyimide exhibits a lower thermal conductivity because of the intrinsic properties. Likewise, as in Table 1, a 61 % of thermal performance has been determined from the theoretical calculations using the data in Table 2.

Figures 3 and 5, these both figures, even though their main purpose is to compare the temperature pattern, are different in the sense that Figure 3 is an Infrared Image and Figure 5 is the computed temperature pattern, in Figure 3 the temperature was inferred from IR radiation by using the emissivity of the antenna (Au) so the apparent temperature of the substrate is different since the emissivity of polyimide is higher than the emissivity of the metal, giving an apparent temperature higher than the temperature of the metal, however the temperature in the boundary between the metal and the substrate should be almost the same, which is showed in Figure 5.

Table 2. Theoretical thermal impedance for polyimide and SiO₂ substrates

	Polyimide	SiO ₂
T₁ (°C)-Bias (t=0, T=60)	60	60
T₂ (°C) - Measurement (t>>0)	71.5	64.4
Z_{th} (K/W)	159.7	61.1

Additionally, we have simulated the thermal response as a function of the thickness of the active elements on the nanoarray (Figure 6). Specifically, those elements fabricated on a polyimide substrate (red curve) shows a higher thermal impedance than the ones fabricated on a SiO₂ substrate for a wide range of thickness of the substrates (0.3 – 500 μm). In fact, a higher thermal impedance could be achieved when the device is completely isolated from the environment, i.e., reducing the heat conduction through the substrate induces an increase in the responsivity on thermoelectric devices [20- 23]. Therefore, we have calculated the thermal impedance of both substrates (polyimide and SiO₂), keeping the thermal source in steady conditions (DC current). The response of the nanoarray (on polyimide substrate) under the thermal study shows a nearly linear increase of the thermal impedance with respect to the values of the thickness from h = 25 - 500 μm. Clearly, the thermal impedance in the polyimide substrate has a higher Z_{th} when compared with SiO₂ for the same range of thickness and simulated electrical power, these results match perfectly with previous reports [5]. In fact, *Vermeersch, B., et.al* reported that for small thickness values there occurs a “transition phenomenon”, which is present in our results too. For instance, Figure 6 (a), shows that for small a substrate thickness, a smooth decay

around 25 μm is present for both polyimide and silicon substrates. Indeed, the linear region of both curves could be represented with a relation of the form $Z_{\text{th}} = R_0 + hR$. Thus, for polyimide curve we have obtained $Z_{\text{th-polyimide}} = 1324 + h*10$ [(K/W)/ μm]. On the other hand, in the silicon oxide substrate we have obtained $Z_{\text{th-SiO}_2} = 145 + h*1.1$ [(K/W)/ μm]. It allows us to infer, that for our application purposes the rate of thermal impedance in the polyimide is up to 10 times more efficiently that in silicon dioxide substrate.

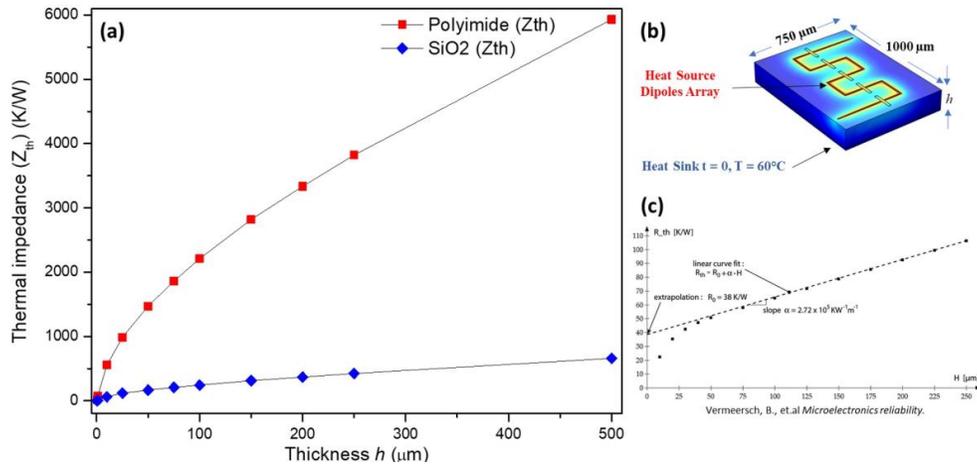


Figure 6. (a) simulated thermal impedance as a function of the thickness: (red curve) polyimide, (blue curve) silicon dioxide substrates. (b) the diagram shows the simulated nanoantenna array configuration under similar parameters to obtain the thermal impedance curves. (c) the inset shows the thermal impedance for previous report on silicon substrates [5].

CONCLUSIONS

We have studied, numerically and experimentally, the thermal response of an array of dipole nanoantennas fabricated on two different substrates for thermal radiation harvesting applications. We have measured the steady thermal impedance (Z_{th}) of metal dipole nanoarrays fabricated on polyimide and silicon dioxide (SiO_2) substrates by electron beam lithography. The experimental measurements of the thermal impedance were obtained using a thermal camera, the measurements revealed a high $Z_{\text{th}} = 292.2$ (K/W) for the polyimide, in contrast with lower values $Z_{\text{th}} = 13.5$ (K/W) obtained for the SiO_2 substrate.

Similarly, numerical simulations allow us to corroborate that a higher thermal impedance is obtained with polyimide substrate, and lower values with SiO_2 . Additionally, it was also observed an increase of the simulated thermal response as a function of the thickness of the substrate. In conclusion, the experimental and simulated results show that the thermal performance of nanostructured thermoelectric devices can be increased using polyimide substrates.

ACKNOWLEDGMENTS

The authors acknowledge the scholarship of the Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACYT) and the Universidad Autónoma de San Luis Potosí for the support to accomplish this research. FJG and B. Mora Ventura would like to acknowledge the support by project P-32 and P-105 of “Centro Mexicano de Innovación en Energía Solar” from Fondo Sectorial CONACYT-Secretaría de Energía-Sustentabilidad Energética and by the National Laboratory program from CONACYT through the Terahertz Science and Technology National Lab (LANCYTT).

G.G would like to acknowledge support by the program Cátedras Conacyt through project 1757 and from project A1-S-43579 of SEP-CONACYT Ciencia Básica.

REFERENCES

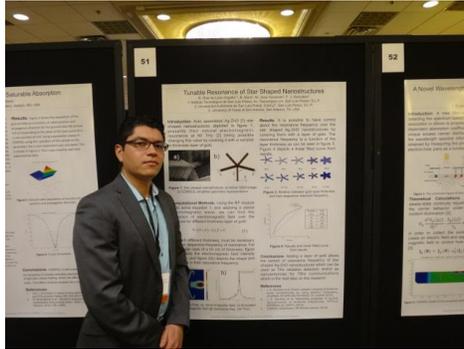
- [1]. E. Briones et al., “Seebeck nanoantennas for solar energy harvesting,” *Appl. Phys. Lett.* 105(9), 093108 (2014).
- [2]. G.P. Szakmany et al., “Nanoantenna integrated infrared thermoelectric converter,” in *IEEE 14th Int. Conf. Nanotechnology (IEEE-NANO 2014)*, pp. 571–573 (2014).
- [3] Gonzalez, F. J., Fumeaux, C., Alda, J., & Boreman, G. D. (2000). Thermal impedance model of electrostatic discharge effects on microbolometers. *Microwave and Optical Technology Letters*, 26(5), 291-293.
- [4] González, F. J. (2006). Thermal-impedance simulations of antenna-coupled microbolometers. *Infrared physics & technology*, 48(3), 223-226

- [5] Vermeersch, B., & De Mey, G. (2007). Influence of substrate thickness on thermal impedance of microelectronic structures. *Microelectronics reliability*, 47(2-3), 437-443.
- [6] Briones, E., Briones, J., Martínez-Anton, J. C., Cuadrado, A., McMurtry, S., Hehn, M., ... & González, J. (2015, May). Seebeck nanoantennas for infrared detection and energy harvesting applications. In *Antennas and Propagation (EuCAP), 2015 9th European Conference on* (pp. 1-4). IEEE.
- [7] Mora-Ventura, B., de León, R. D., García-Torales, G., Nuñez, J. L. F., Alda, J., & González, F. J. (2016). Responsivity and resonant properties of dipole, bowtie, and spiral Seebeck nanoantennas. *Journal of Photonics for Energy*, 6(2), 024501.
- [8] Cuadrado, A., Alda, J., & González, F. J. (2013). Multiphysics simulation for the optimization of optical nanoantennas working as distributed bolometers in the infrared. *Journal of Nanophotonics*, 7(1), 073093.
- [9] Szakmany, G. P., Orlov, A. O., Bernstein, G. H., & Prood, W. (2014, June). Bi-metallic and mono-metallic antenna-coupled nanoscale thermocouples for infrared detection. In *Device Research Conference (DRC), 2014 72nd Annual* (pp. 67-68). IEEE.
- [10] Szakmany, G. P., Krenz, P. M., Orlov, A. O., Bernstein, G. H., & Prood, W. (2013). Antenna-coupled nanowire thermocouples for infrared detection. *IEEE Transactions on Nanotechnology*, 12(2), 163-167.
- [11] Cuadrado, A., Silva-López, M., González, F. J., & Alda, J. (2013). Robustness of antenna-coupled distributed bolometers. *Optics letters*, 38(19), 3784-3787.
- [12] Silva-López, M., Cuadrado, A., Llombart, N., & Alda, J. (2013). Antenna array connections for efficient performance of distributed microbolometers in the IR. *Optics express*, 21(9), 10867-10877.
- [13] Pakhuruddin, M. Z., Ibrahim, K., & Aziz, A. A. (2013). Properties of polyimide substrate for applications in flexible solar cells. *Optoelectron Adv Mater*, 7, 377-380.
- [14] F. Kessler, D. Rudmann, *Solar Energy* **77**, 685 (2004).

- [15] Yang, Z., Takacs, A., Charlot, S., & Dragomirescu, D. (2016). Flexible substrate technology for millimeter wave wireless power transmission. *Wireless Power Transfer*, 3(1), 24-33.
- [16] Jatlaoui, M. M., Dragomirescu, D., Charlot, S., Pons, P., Aubert, H., & Plana, R. (2010, December). 3D heterogeneous integration of wireless communicating nano-sensors on flexible substrate. In *Advanced Topics in Optoelectronics, Microelectronics, and Nanotechnologies V* (Vol. 7821, p. 78211E). International Society for Optics and Photonics.
- [17] Lee, C. M., Kim, Y., Kim, Y., Kim, I. K., & Jung, C. W. (2015). A flexible and transparent antenna on a polyamide substrate for laptop computers. *Microwave and Optical Technology Letters*, 57(5), 1038-1042.
- [18] Pease, R. F. W. (1981). Electron beam lithography. *Contemporary Physics*, 22(3), 265-290.
- [19] Bahman, A. S., Ma, K., & Blaabjerg, F. (2014, November). Thermal impedance model of high power IGBT modules considering heat coupling effects. In *Power Electronics and Application Conference and Exposition (PEAC), 2014 International* (pp. 1382-1387). IEEE.
- [20] González, F. J., Ilic, B., & Boreman, G. D. (2005). Antenna-coupled microbolometers on a silicon-nitride membrane. *Microwave and Optical Technology Letters*, 47(6), 546-548.
- [21] Gonzalez, F. J., Fumeaux, C., Alda, J., & Boreman, G. D. (2000). Thermal impedance model of electrostatic discharge effects on microbolometers. *Microwave and Optical Technology Letters*, 26(5), 291-293.
- [22] González, F. J. (2006). Thermal-impedance simulations of antenna-coupled microbolometers. *Infrared physics & technology*, 48(3), 223-226
- [23] González, F. J., Ashley, C. S., Clem, P. G., & Boreman, G. D. (2004). Antenna-coupled microbolometer arrays with aerogel thermal isolation. *Infrared physics & technology*, 45(1), 47-51.

Asistencias en congresos nacionales e internacionales

COMSOL Conference 2016 Boston, United States



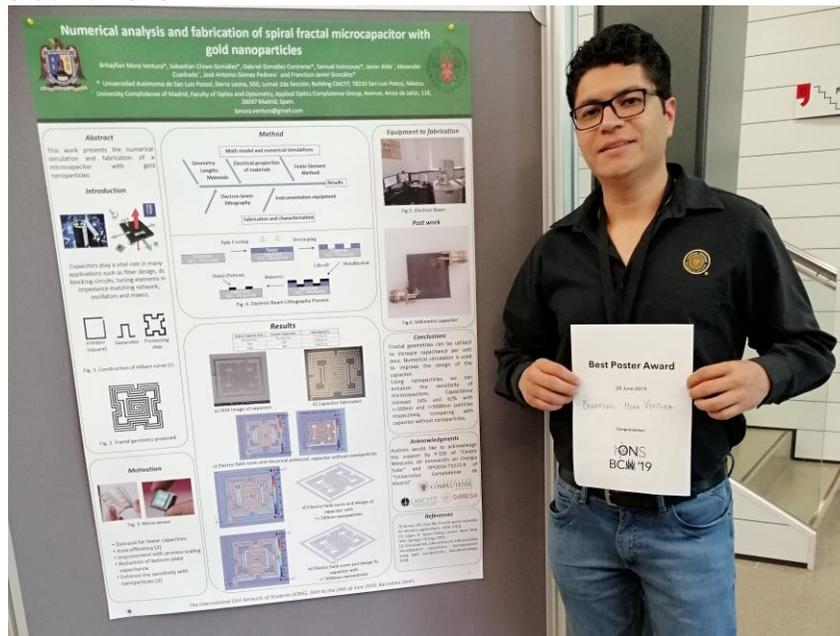
Optics + Photonics, Conference: 6 - 10 August 2017, San Diego Convention Center, San Diego, California, United States



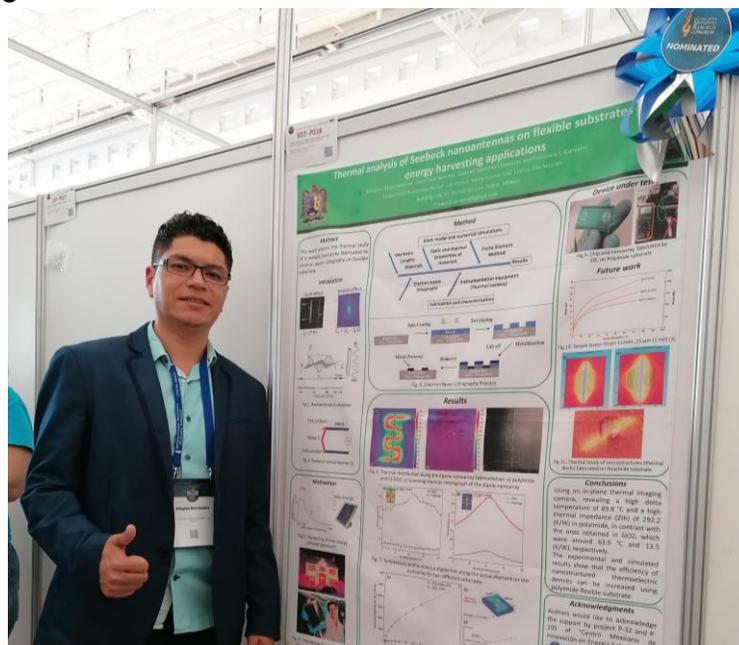
"IONS BOGOTÁ 2017", International networking in optics and photonics, OSA (The Optical Society of America), Bogota, Colombia, 15th - 18th August 2017



IONS Barcelona '19, International networking in optics and photonics, OSA (The Optical Society of America). ICFO, CASTELLDEFELS, BARCELONA, 26 June 2019, 08:00am - 29 June 2019



XXVIII International Materials Research Congress, IMRC 2019, 18-23 AUGUST 2019. Cancun, Mexico



XII International Conference on Surfaces, Materials and Vacuum, September 23rd to 27th, 2019 / San Luis Potosí, México

Estancias nacionales e internacionales

- **Estancia de investigación corta en el Instituto de Energías Renovables, para realizar tareas ligadas al proyecto sobre “Caracterización térmica de nanoestructuras utilizando cámara infrarroja”. Periodo: del 10 al 15 de septiembre de 2018.**
- **Estancia de investigación en la Universidad Complutense de Madrid, en el grupo complutense de Óptica Aplicada, periodo 03 de mayo al 03 de agosto del 2019.
Proyecto: “Avances en estructuras resonantes para nano fotónica”.**
- **Estancia de investigación en el Centro de Nanociencias y Micro y Nanotecnologías del Instituto Politécnico Nacional (CNMN-IPN), periodo 09 al 13 de diciembre del 2019.
Proyecto: Caracterización eléctrica de micro capacitores para aplicaciones de biosensado. Fabricación y caracterización eléctrica de dispositivos de película delgada por fotolitografía.**