



UNIVERSIDAD DE SANTIAGO DE CHILE

FACULTAD DE CIENCIAS

DEPARTAMENTO DE FÍSICA

**SIMULACIÓN COMPUTACIONAL DE
RECUBRIMIENTOS ANTIRREFLEJO PARA CRISTALES
METAL-ORGANIC FRAMEWORKS**

Andrea Fernanda Alarcón Manríquez

Profesor Guía:

Felipe Herrera Urbina

Tesis para optar al Título Profesional de Ingeniera Física

Santiago – Chile

2025

SIMULACIÓN COMPUTACIONAL DE RECUBRIMIENTOS ANTIRREFLEJO PARA CRISTALES METAL-ORGANIC FRAMEWORKS

ANDREA FERNANDA ALARCÓN MANRÍQUEZ

Este trabajo de graduación fue realizado bajo la supervisión del profesor guía

Felipe Herrera Urbina

y ha sido aprobado por los miembros de la comisión calificadora:

Dr. Juan Manuel García

Dr. Ignacio Olivares

Dr. Felipe Herrera Urbina (Profesor Guía)

Resumen

En este trabajo se estudia el diseño y análisis de recubrimientos antirreflejo, aplicados a diferentes sustratos, específicamente a cristales metal-organic frameworks (MOFs), considerando a materiales de recubrimiento como los óxidos. Con este fin, se implementó mediante Python el método de matrices de transferencia, permitiendo calcular la transmitancia y reflectancia espectral de distintas configuraciones de estructuras de una y múltiples capas. La validación del modelo se realizó a partir de los resultados experimentales reportados en la literatura para un sistema Si-SiO, obteniéndose un resultado favorable que coincide en la tendencia del comportamiento y en la posición del máximo de la transmisión en la longitud de onda de diseño.

Posteriormente, se evaluaron distintas estructuras de monocapas y multicapas, comparando la respuesta óptica de MOFs uniaxiales frente a materiales de recubrimiento típicos como los óxidos. En particular, se analizó el comportamiento en una estructura cuyo sustrato es el MOF QAMFUF01, recubierto con capas intercaladas de dióxido de silicio y dióxido de germanio, la cual mostró un comportamiento favorable en términos de reducción de reflectancia a una determinada longitud de onda al aumentar el número de capas depositadas, en comparación a la transmisión propia en dicho material.

Los resultados permitieron concluir que el método de matrices de transferencia fue implementado adecuadamente, al reproducir la condición de cero reflexión, confirmando que es una herramienta confiable para partir el estudio del diseño de recubrimientos antirreflectantes. Asimismo, se identificó que al elegir de manera adecuada espesores de cuarto de onda diferentes en cada capa, es posible otorgar mayor flexibilidad al diseño, estabilizando la curva de transmisión a lo largo del rango espectral de interés y no solo a una longitud de onda.

Dedicatoria

(.)

Agradecimientos

(.)

Tabla de contenidos

Resumen	II
Dedicatoria	III
Agradecimientos	IV
Tabla de contenidos	V
Índice de Tablas	VII
Índice de Ilustraciones	VIII
I. Introducción	1
I.1. Recubrimientos Antirreflejo (AR)	1
I.2. Metal-Organic Frameworks (MOFs)	2
I.3. Estado del Arte	3
I.4. Objetivos	3
I.4.1. Objetivo Principal	3
I.4.2. Objetivos Secundarios	4
II. Óptica de Películas Delgadas	5
II.1. Caracterización de una estructura multicapa	5
II.1.1. Electrodinámica de materiales	5
II.1.2. Factores de fase y coeficiente de directividad	6
II.1.3. Polarización transversal magnética y transversal eléctrica	8
II.1.4. Reflectancia y Transmitancia	10
II.2. Matrices de transferencia	10
II.2.1. Reflectancia, Transmitancia y Absorción	14
II.3. Espectro de transmisión de una microcavidad óptica	15
III. Teoría de Recubrimiento Antirreflejo	18
III.1. Interferencia Destructiva	18
III.2. Condición de cuarto de onda	19
III.2.1. Condición de Reflectancia cero para una monocapa	19
III.2.2. Bicapa de cuarto de onda	21
III.2.3. N capas de cuarto de onda (puente de admitancia)	21
III.3. Aplicación a un sistema Si–SiO: comparación con resultados de literatura	21
III.3.1. Parámetros y configuración experimental de Cox (1961)	22

IV. Diseño de Recubrimiento Antirreflejo para Cristales MOF	25
IV.1. Selección de clases de MOFs y materiales de recubrimiento	25
IV.2. MOFs y materiales de recubrimiento seleccionados	26
IV.2.1. MIRO101	27
IV.2.2. BEKVOD	30
IV.2.3. QAMFUF01	32
IV.3. Recubrimiento antirreflejo de multiples capas	34
IV.3.1. Modelos propuestos	34
IV.3.2. Recubrimiento de tres capas	35
IV.3.3. Recubrimiento de cinco capas	37
IV.3.4. Comparación entre modelos	40
IV.3.5. Modelo Extra	40
V. Análisis	42
Conclusión	44

Índice de Tablas

II.1. Coeficientes B_i y C_i para sílice, extraídos de (Jara Varela, 2018).	15
II.2. Parámetros para la plata, extraídos de (Jara Varela, 2018).	16
IV.1. Espesores de cada capa según el material en los modelos 1 y 2 considerados . .	35
IV.2. Espesores de cada capa según el material en los modelos 3 y 4 considerados . .	38

Índice de Ilustraciones

I.1.	Ejemplo del rendimiento de recubrimientos antirreflejo (AR) en la industria, mostrando la reducción de reflectancia en distintos rangos espectrales. (Edmund Optics, 2024)	1
I.2.	Ejemplo de estructura del metal–organic framework MIRO-101. (a) Diagrama químico de los ligandos y nodos metálicos que lo componen, según lo reportado en la base de datos Cambridge Crystallographic Data Centre (CCDC)(Cambridge Crystallographic Data Centre, 2025). (b) Representación tridimensional de la red cristalina, donde se destaca la celda unitaria en color naranja.	3
II.1.	Representación de una estructura multicapa, partiendo desde el medio de incidencia con índice de refracción n_0 , las capas de recubrimiento con índice de refracción n_i , $i = 1, \dots, N$, con N el número total de capas, y el índice del sustrato n_s .	5
II.2.	Sistema de referencia para una onda electromagnética pasando de un medio con índice de refracción n_0 a uno con índice n_1 . Se muestran la onda incidente (I), reflejada (R) y transmitida (T), junto con los ángulos de incidencia θ_0 y de transmisión θ_1 .	7
II.3.	Campo eléctrico y magnético en polarización TM	8
II.4.	Campo eléctrico y magnético en polarización TE.	9
II.5.	Representación de las interfaces: Entre el medio incidente y el recubrimiento tenemos la interfaz a . Entre el recubrimiento y el sustrato tenemos la interfaz b . El recubrimiento es una película delgada de espesor d . Los índices de refracción son n_0 en el medio incidente, n_1 en el recubrimiento, y n_s en el sustrato.	11
II.6.	Representación de los campos eléctrico ($E^\pm$) y magnético ($H^\pm$) en las interfaces a y b de onda una que se propaga desde un medio incidente de admitancia óptica η_0 , a un sustrato de admitancia η_s con un recubrimiento de admitancia η_1 .	12
II.7.	Estructura multicapa analizada, compuesta por capas alternadas de plata (Ag), dióxido de silicio (SiO_2) y un material activo orgánico (TDBC), con espesores de 30 nm, 50 nm y 20 nm respectivamente.	15
II.8.	Microcavidad óptica de TDBC como capa activa.	17

III.1. Esquema de un recubrimiento antirreflejo de una sola capa. La onda incidente (I) genera las reflexiones R_1 y R_2 en las interfaces aire–capa y capa–sustrato. Cuando el espesor de la película es un cuarto de la longitud de onda de diseño, las reflexiones interfieren de manera destructiva, reduciendo la reflectancia y aumentando la transmitancia (T). Extraído de <i>Wikipedia</i> (Wikipedia contributors, 2025).	19
III.2. Transmitancia de un sustrato de silicio ($d = 1.5 \text{ mm}$) con y sin recubrimiento antirreflejo de SiO_2 , diseñado con un espesor de cuarto de onda a $1.7 \mu\text{m}$. (a) Resultados experimentales reportados por Cox y Hass (Cox et al., 1961), en el rango espectral de 1 a $3 \mu\text{m}$. (b) Resultados obtenidos mediante la simulación implementada, considerando el mismo sistema para fines de comparación. . . .	23
IV.1. Índices de refracción de diferentes clases de materiales (MOFs, polímeros, vidrios y óxidos) a $\lambda = 1000 \text{ nm}$, extraídos de (Polyanskiy, 2025). Este análisis permite identificar materiales candidatos viables para emplearse como recubrimientos en función de su contraste con el sustrato.	25
IV.2. Índice de refracción en función de la longitud de onda: (a) MOFs uniaxiales, con datos obtenidos desde el repositorio de nuestro grupo de investigación; (b) materiales de la clase óxidos, con datos extraídos de la base de datos pública (Polyanskiy, 2025). En ambos casos se muestra el índice de refracción en función de la longitud de onda.	26
IV.3. Índice de refracción vs longitud de onda para SiO_2 y GeO_2 . Ambos muestran la interpolación que se realizó a los datos obtenidos en refractiveindex.info , mediante el método de Spline Cúbico para determinar el comportamiento espectral.	27
IV.4. Comparación entre el comportamiento del índice de refracción del MOF MIRO101 en sus tres ejes versus la interpolación con la Ecuación de Sellmeier aplicada al promedio de los datos.	28
IV.5. Intensidad de transmisión en función de la longitud de onda sobre MIRO101. Ambos casos utilizando un recubrimiento antirreflejo monocapa de dióxido de silicio. (a) peak de transmisión a los 750 nm con recubrimiento de 129 nm de espesor. (b) peak de transmisión a los 1550 nm con recubrimiento de 268 nm de espesor.	29
IV.6. Intensidad de transmisión en función de la longitud de onda sobre MIRO101. Ambos casos utilizando un recubrimiento antirreflejo monocapa de dióxido de germanio. (a) peak de transmisión a los 750 nm con recubrimiento de 129 nm de espesor. (b) peak de transmisión a los 1550 nm con recubrimiento de 268 nm de espesor.	30

IV.7. Comparación entre el comportamiento del índice de refracción del MOF BEK-VOD en sus tres ejes versus la interpolación con la Ecuación de Sellmeier aplicada al promedio de los datos.	31
IV.8. Intensidad de transmisión en función de la longitud de onda sobre BEKVOD. Ambos casos utilizando un recubrimiento antirreflejo monocapa de dióxido de silicio. (a) peak de transmisión a los 750 nm con recubrimiento de 129 nm de espesor. (b) peak de transmisión a los 1550 nm con recubrimiento de 268 nm de espesor.	31
IV.9. Intensidad de transmisión en función de la longitud de onda sobre BEKVOD. Ambos casos utilizando un recubrimiento antirreflejo monocapa de dióxido de germanio. (a) peak de transmisión a los 750 nm con recubrimiento de 117 nm de espesor. (b) peak de transmisión a los 1550 nm con recubrimiento de 244 nm de espesor.	32
IV.10. Comparación entre el comportamiento del índice de refracción del MOF QAM-FUF01 en sus tres ejes versus la interpolación con la Ecuación de Sellmeier aplicada al promedio de los datos.	33
IV.11. Intensidad de transmisión en función de la longitud de onda sobre QAMFUF. Ambos casos utilizando un recubrimiento antirreflejo monocapa de dióxido de silicio. (a) peak de transmisión a los 750 nm con recubrimiento de 129 nm de espesor. (b) peak de transmisión a los 1550 nm con recubrimiento de 268 nm de espesor.	33
IV.12. Intensidad de transmisión en función de la longitud de onda sobre QAMFUF01. Ambos casos utilizando un recubrimiento antirreflejo monocapa de dióxido de germanio. (a) peak de transmisión a los 750 nm con recubrimiento de 117 nm de espesor. (b) peak de transmisión a los 1550 nm con recubrimiento de 244 nm de espesor.	34
IV.13. Estructura del Modelo 1 y 2 del recubrimiento para un caso de tres capas	35
IV.14. Comparación entre las intensidades de transmisión en QAMFUF01 sin recubrimiento y con el recubrimiento del Modelo 1.	36
IV.15. Comparación entre las intensidades de transmisión en QAMFUF01 sin recubrimiento y con el recubrimiento del Modelo 2.	37
IV.16. Estructura del Modelo 3 y 4 de recubrimiento para un caso de 5 capas	38
IV.17. Comparación entre las intensidades de transmisión en QAMFUF01 sin recubrimiento y con el recubrimiento del Modelo 3.	39
IV.18. Comparación entre las intensidades de transmisión en QAMFUF01 sin recubrimiento y con el recubrimiento del Modelo 4.	39
IV.19. Comparación entre las intensidades de transmisión en QAMFUF01 sin recubrimiento y con recubrimiento de uno a cinco capas.	41

CAPÍTULO I: Introducción

I.1. Recubrimientos Antirreflejo (AR)

Los recubrimientos antirreflejos son fundamentales a la hora de mejorar la eficiencia en sistemas ópticos, debido a que permiten reducir la reflexión en la interfaz entre un sustrato y el medio incidente. El diseño de estos recubrimientos consta en estructuras de una o mas capas de películas delgadas con materiales específicos, cuyo índice de refracción y espesor de fase deben cumplir ciertos requisitos para generar interferencias destructivas entre las ondas reflejadas y así producir una anulación en la reflectancia. Sus aplicaciones van desde el uso en celdas solares, como en dispositivos electrónicos y sensores, en donde un mayor nivel de transmitancia se traduce en optimizar el rendimiento de los sistemas al aprovechar mas la radiación incidente. (Ji et al., 2022; Raut et al., 2011)

En la práctica, la industria óptica emplea diferentes diseños de recubrimientos AR, ajustados a rangos espectrales específicos, con el objetivo de minimizar la reflectancia y maximizar la transmisión. La Figura I.1 muestra un ejemplo de este comportamiento, donde se aprecia cómo cada recubrimiento se optimiza para un intervalo particular de longitudes de onda, evidenciando la importancia de esta tecnología en aplicaciones que van desde sistemas láser hasta dispositivos fotónicos avanzados. (Edmund Optics, 2024)

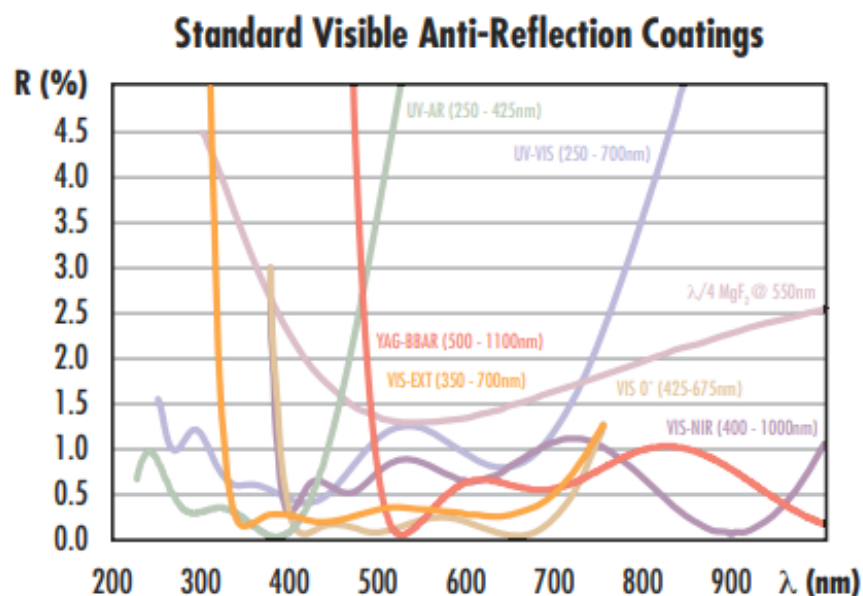


Figura I.1: Ejemplo del rendimiento de recubrimientos antirreflejo (AR) en la industria, mostrando la reducción de reflectancia en distintos rangos espectrales. (Edmund Optics, 2024)

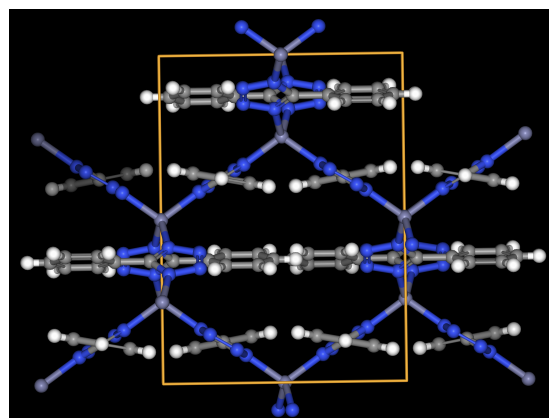
I.2. Metal-Organic Frameworks (MOFs)

Los *metal-organic frameworks* (MOFs) son materiales cristalinos formados por iones metálicos unidos a ligandos orgánicos, existiendo prácticamente un número ilimitado de posibles MOFs. Esto es debido a la existencia de gran diversidad de iones metálicos y ligandos orgánicos, lo que permite diseñar innumerables combinaciones dando origen a nuevos materiales con funciones o propiedades específicas.

Presentan un amplio rango de aplicaciones debido a sus características de alta porosidad y diversidad estructural. Su capacidad de modificar el tamaño y la afinidad de los poros los convierte en tamices moleculares selectivos para la separación de gases. Además, mediante la elección de iones metálicos y ligandos específicos, pueden diseñarse MOFs con funciones particulares: catalíticos, fotoactivos, magnéticos, biomiméticos y conductores, con aplicaciones en catálisis, almacenamiento energético, sensores, supercondensadores y liberación de fármacos.

En los últimos años, se ha avanzado en la integración de MOFs con otros materiales (electrodos, polímeros, vidrios, nanocristales metálicos o biomoléculas), lo que genera efectos sinérgicos que mejoran las propiedades de cada componente. Estas combinaciones permiten aplicaciones multifuncionales en baterías, catálisis, sensores electroquímicos, hidrogenación, membranas de separación, recubrimientos ópticos y protección ambiental. (Li & Yang, 2025; Meng et al., 2020)

En el área de la óptica cuántica, encontramos la generación de fotones entrelazados en múltiples grados de libertad al transmitir luz láser intensa sobre materiales ópticos no lineales. Es aquí donde surge la importancia del estudio de los MOFs, en donde entran a ser nuevas opciones de dispositivos ópticos no lineales, ya que tienen la capacidad de generar de manera eficiente luz entrelazada mediante conversión paramétrica espontánea descendente (SPDC). Esto genera la motivación a estudiar sobre la generación de recubrimientos antirreflejos específicamente para MOFs, buscando incrementar la eficiencia en estos materiales al maximizar la transmitancia en ellos. (Raj et al., 2024)



(a) Estructura Tridimensional



(b) Diagrama Químico

Figura I.2: Ejemplo de estructura del metal–organic framework MIRO-101. (a) Diagrama químico de los ligandos y nodos metálicos que lo componen, según lo reportado en la base de datos Cambridge Crystallographic Data Centre (CCDC)(Cambridge Crystallographic Data Centre, 2025). (b) Representación tridimensional de la red cristalina, donde se destaca la celda unitaria en color naranja.

I.3. Estado del Arte

En la literatura reciente se han reportado múltiples estrategias para la síntesis de películas delgadas de MOFs sobre distintos sustratos, tales como vidrios, polímeros y electrodos, con aplicaciones en sensores, catálisis y óptica funcional (Li & Yang, 2025; Meng et al., 2020). Estos trabajos se enfocan en el uso de los MOFs como recubrimientos, aprovechando sus propiedades estructurales y químicas para otorgar nuevas funcionalidades al sustrato. Sin embargo, no se han encontrado estudios que aborden el problema de manera inversa: la utilización de MOFs como sustratos ópticos recubiertos con materiales convencionales (óxidos, polímeros o vidrios) para generar estructuras antirreflejo. Esta ausencia en la literatura representa una motivación para lo que este trabajo busca estudiar, que es determinar la factibilidad de diseñar recubrimientos antirreflejos sobre MOFs.

I.4. Objetivos

I.4.1. Objetivo Principal

Modelar computacionalmente el diseño de un recubrimiento antirreflejo de estructura multicapa determinando los parámetros de fabricación específicos para un MOF que maximiza la transmisión láser de 750 nm a 2500 nm.

I.4.2. Objetivos Secundarios

- Definir la clase de MOFs con los que se realizaran los análisis.
- Definir una lista de materiales compatibles con los sustratos (MOFs) en términos del índice de refracción, admitancia óptica y compatibilidad química.
- Determinar espesores de las películas delgadas con estos materiales y generar combinaciones posibles entre ellas.
- Obtener curvas de transmisión en función de la longitud de onda para las estructuras monocapa y multicapa de los materiales mencionados.
- Realizar un análisis de la transmisión en el rango espectral establecido para todos los modelos propuestos y definir la configuración de la estructura que más optimice su eficiencia.

CAPÍTULO II: Óptica de Películas Delgadas

II.1. Caracterización de una estructura multicapa

Para caracterizar una estructura plana de múltiples capas como se observa en la Figura II.1, necesitamos conocer las características ópticas y geométricas de cada material que la compone, que son sus espesores y sus índices de refracción que pueden ser complejos.

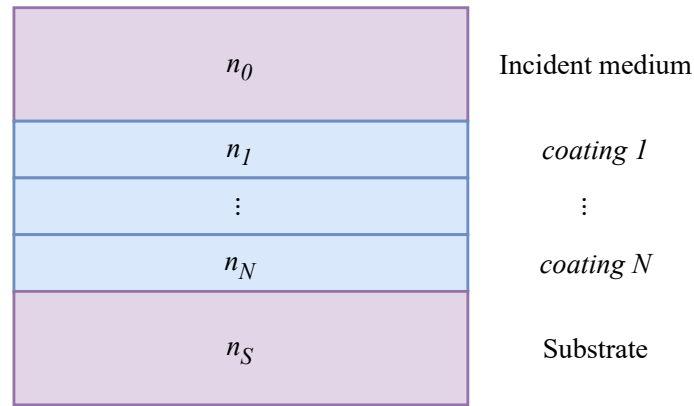


Figura II.1: Representación de una estructura multicapa, partiendo desde el medio de incidencia con índice de refracción n_0 , las capas de recubrimiento con índice de refracción n_i , $i = 1, \dots, N$, con N el número total de capas, y el índice del sustrato n_S .

Con esta información, más el ángulo de incidencia, podemos calcular la cantidad de energía reflejada, transmitida y absorbida por el material, utilizando el método de la matriz de transferencia.

II.1.1. Electrodinámica de materiales

En nuestro caso, la densidad de carga eléctrica es $\rho = 0$. En cuanto a la densidad de corriente eléctrica, tanto los términos de magnetización como de conducción son nulos. La relación entre la corriente de polarización y la polarización es la siguiente.

$$\vec{J} = \frac{\partial \vec{P}}{\partial t} \quad (\text{II.1})$$

Dado que este caso es lineal, la relación entre la polarización y el campo eléctrico es:

$$P = \epsilon_0 \chi_e E \quad (\text{II.2})$$

Donde χ_e es la susceptibilidad eléctrica.

Entonces, las ecuaciones de Maxwell para este caso son:

$$\nabla \cdot \vec{E} = 0 \quad (\text{II.3})$$

$$\nabla \cdot \vec{B} = 0 \quad (\text{II.4})$$

$$\nabla \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \quad (\text{II.5})$$

$$\nabla \times \vec{B} = \mu_0 \frac{\partial \vec{P}}{\partial t} + \mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \quad (\text{II.6})$$

Aplicando el operador rotor a la ecuación II.5

$$\nabla \times (\nabla \times \vec{E}) = -\frac{\partial}{\partial t} (\nabla \times \vec{B}) \quad (\text{II.7})$$

Usando la propiedad $\nabla \times (\nabla \times \vec{E}) = \nabla(\nabla \cdot \vec{E}) - \nabla^2 \vec{E}$ y II.6 en II.7, tenemos:

$$\nabla^2 \vec{E} = \mu_0 \epsilon_0 \chi_e \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} + \mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} \quad (\text{II.8})$$

Pero $\epsilon = \epsilon_0(\chi_e + 1)$, donde ϵ es la constante dieléctrica. Finalmente la ecuación II.8 toma la forma de ecuación de onda:

$$\nabla^2 \vec{E} = \frac{\epsilon}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} \quad (\text{II.9})$$

Definiendo una onda plana en una dimensión de la forma $E = E_0 e^{i(kx - \omega t)}$ y aplicándola a la ecuación II.9

$$\begin{aligned} -k^2 E_0 e^{i(kx - \omega t)} &= -\omega^2 \frac{\epsilon}{c^2} E_0 e^{i(kx - \omega t)} \\ k^2 &= \omega^2 \frac{\epsilon}{c^2} \\ \epsilon &= \left(\frac{ck}{\omega} \right)^2 \end{aligned} \quad (\text{II.10})$$

Donde $\left(\frac{ck}{\omega} \right)$ se define como el índice de refracción complejo N .

$$N^2 = \epsilon \quad (\text{II.11})$$

$$N^2 = (n + ik)^2 \quad (\text{II.12})$$

Siendo n el índice de refracción real y k el coeficiente de extinción, relacionado con la absorbancia.

II.1.2. Factores de fase y coeficiente de directividad

Podemos analizar cómo la onda altera su trayectoria cuando pasa de un medio a otro examinando el cambio en el factor de fase al aplicar el rotor, donde λ es la longitud de onda, n_0

es el índice de refracción del medio incidente y n_1 el índice del medio al que se transmite.

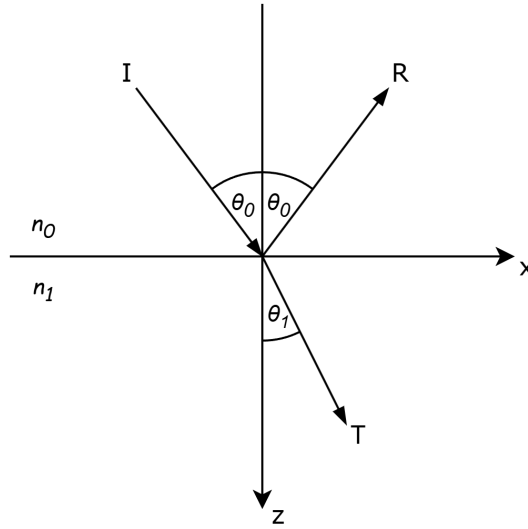


Figura II.2: Sistema de referencia para una onda electromagnética pasando de un medio con índice de refracción n_0 a uno con índice n_1 . Se muestran la onda incidente (I), reflejada (R) y transmitida (T), junto con los ángulos de incidencia θ_0 y de transmisión θ_1 .

Así, para incidencia oblicua, y considerando el sistema de la Figura II.2 los siguientes factores de fase para las ondas incidente, reflejada y transmitida son:

■ **Incidente**

$$e^{i\left[\omega t - \left(\frac{2\pi n_0}{\lambda}\right)(x \sin \theta_0 - z \cos \theta_0)\right]} \quad (\text{II.13})$$

■ **Reflejada**

$$e^{i\left[\omega t - \left(\frac{2\pi n_0}{\lambda}\right)(x \sin \theta_0 - z \cos \theta_0)\right]} \quad (\text{II.14})$$

■ **Transmitida**

$$e^{i\left[\omega t - \left(\frac{2\pi(n_1 - ik_1)}{\lambda}\right)(\alpha x - \gamma z)\right]} \quad (\text{II.15})$$

La fase varía con el rotor del coeficiente de directividad del factor de fase transmitido.

$$\nabla \times \equiv \left(-i \frac{2\pi N}{\lambda} \alpha \hat{i} - i \frac{2\pi N}{\lambda} \gamma \hat{k} \right) \quad (\text{II.16})$$

y su derivada temporal es

$$\frac{\partial}{\partial t} = i\omega \quad (\text{II.17})$$

II.1.3. Polarización transversal magnética y transversal eléctrica

Polarización TM (ondas p)

El campo magnético lo podemos escribir en términos de la intensidad del campo magnético, de la forma $\vec{B} = \mu\vec{H}$, donde μ es la permeabilidad magnética. En la polarización transversal magnética, la intensidad del campo magnético $\vec{H}$ se propaga perpendicular al plano de incidencia, paralelo a la frontera en la dirección y , por lo que $\vec{H} = H_y\hat{j}$. El componente del campo eléctrico paralelo a la frontera en la dirección x es $E_x\hat{i}$.

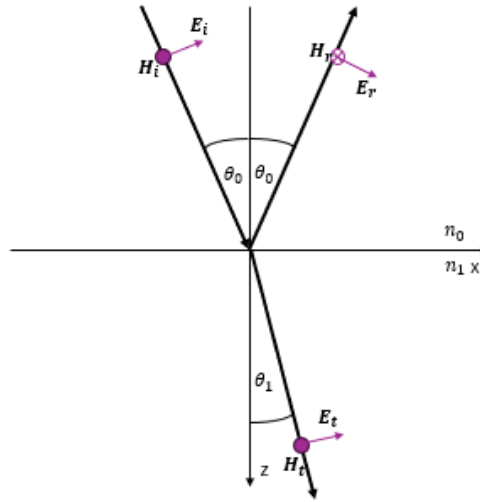


Figura II.3: Campo eléctrico y magnético en polarización TM

Si calculamos el rotor del campo magnético usando el coeficiente de directividad de la ecuación II.16 y lo comparamos con las ecuaciones de Maxwell, tenemos:

$$\nabla \times \vec{H} = \left(-i\frac{2\pi N}{\lambda}\alpha\hat{i} - i\frac{2\pi N}{\lambda}\gamma\hat{k} \right) \times H_y\hat{j} \quad (\text{II.18})$$

Por la ecuación $\nabla \times \vec{H} = \vec{J} + \frac{\partial \vec{D}}{\partial t}$, siendo $\vec{D}$ el desplazamiento eléctrico que se relaciona con el campo eléctrico de la forma $\vec{D} = \epsilon\vec{E}$.

$$\nabla \times \vec{H} = \frac{i\omega N^2}{c\mu_0^2} E_x\hat{i} \quad (\text{II.19})$$

Iguando los términos, nos queda

$$\frac{2\pi N}{\lambda}\gamma H_y = \frac{i\omega N^2}{c\mu_0^2} E_x \quad (\text{II.20})$$

$$\frac{H_y}{E_x} = \frac{\omega N \lambda}{2\pi c^2 \mu_0 \gamma} = \frac{N \mathcal{Y}}{\gamma} \quad (\text{II.21})$$

Donde $\mathcal{Y} = \frac{1}{c\mu_0}$ es la admitancia óptica en el vacío, y por el coeficiente de directividad en el factor de fase de la onda transmitida y la ley de Snell, tenemos que $\gamma = \cos \theta_1$ (Macleod, 2010). Entonces, se define la admitancia óptica en ondas con polarización transversal magnética es:

$$\eta_p = \frac{N}{\cos \theta_1} \quad (\text{II.22})$$

Polarización TE (ondas s)

En el caso de la polarización transversal eléctrica, podemos ver en la Figura II.4 que el campo eléctrico $\vec{E}$ se propaga paralelo a la frontera en la dirección y , por lo que $\vec{E} = E_y \hat{j}$. El componente del campo magnético paralelo a la frontera en la dirección x es $-H_x \hat{i}$.

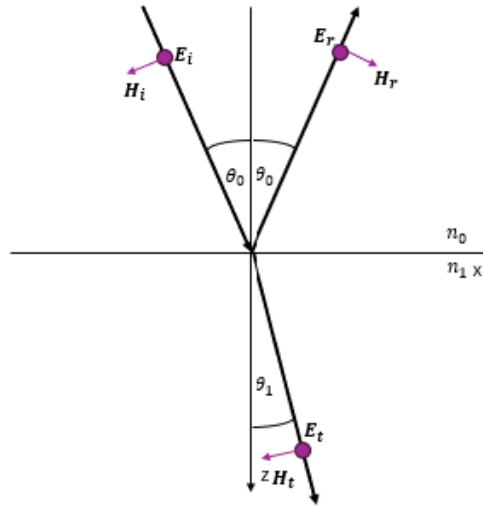


Figura II.4: Campo eléctrico y magnético en polarización TE.

Si calculamos el rotor del campo eléctrico usando el coeficiente de directividad de la ecuación II.16, su derivada temporal en la ecuación II.17 y lo comparamos con las ecuaciones de Maxwell, tenemos:

$$\nabla \times \vec{E} = \left(-i \frac{2\pi N}{\lambda} \alpha \hat{i} - i \frac{2\pi N}{\lambda} \gamma \hat{k} \right) \times E_y \hat{j} \quad (\text{II.23})$$

$$\nabla \times \vec{E} = \frac{\partial H_x}{\partial t} \hat{i} \quad (\text{II.24})$$

$$\frac{1\pi i N}{\lambda} \gamma E_y = i \omega \mu H_x \quad (\text{II.25})$$

$$\frac{H_x}{E_y} = \frac{2\pi N\gamma}{\lambda\mu\omega} = \frac{N\gamma}{c\mu} = N\mathcal{Y}\gamma \quad (\text{II.26})$$

Entonces, la admitancia óptica en ondas con polarización transversal eléctrica es

$$\eta_s = N \cos \theta_1 \quad (\text{II.27})$$

II.1.4. Reflectancia y Transmitancia

Utilizando las componentes paralelas a la frontera, del campo eléctrico y magnético, y definiendo la admitancia óptica como $\eta = \frac{H}{E}$, tenemos

- Campo Eléctrico

$$E_i + E_r = E_t \quad (\text{II.28})$$

- Campo Magnético

$$H_i - H_r = H_t$$

Pero en términos del campo eléctrico nos queda

$$\eta_0 E_i - \eta_0 E_r = \eta_1 E_t \quad (\text{II.29})$$

Reemplazando II.28 en II.29 y despejando para E_r y E_t obtenemos

$$\begin{aligned} \rho &= \left(\frac{\eta_0 - \eta_1}{\eta_0 + \eta_1} \right), & \tau &= \left(\frac{2\eta_0}{\eta_0 + \eta_1} \right), \\ R &= \left(\frac{\eta_0 - \eta_1}{\eta_0 + \eta_1} \right)^2, & T &= \frac{4\eta_0\eta_1}{(\eta_0 + \eta_1)^2} \end{aligned} \quad (\text{II.30})$$

Donde ρ es el coeficiente de reflexión, τ el coeficiente de transmisión, R la reflectancia y T la transmitancia.

Estas expresiones son de aplicación general, ya que se expresan en términos de la admitancia óptica. La magnitud variará de acuerdo con la polarización del campo, ya sea con polarización transversal eléctrica o polarización transversal magnética como se definen en las ecuaciones II.22 y II.27.

$$\eta_m = \frac{n}{\cos \theta}, \text{ en polarización TM}$$

$$\eta_s = n \cos \theta, \text{ en polarización TE}$$

II.2. Matrices de transferencia

Se estudia el método de matrices de transferencia con el objetivo de implementar esta herramienta de manera numérica y así poder describir la propagación de la luz a través de un

recubrimiento monocapa y extenderlo a multicapa. Este método relaciona el comportamiento de los campos eléctricos y magnéticos en cada interfaz, considerando parámetros como el índice de refracción de los medios y sus espesores de fase, y con ello poder calcular la transmitancia y reflectancia espectral de las estructuras, siendo un estudio fundamental para el diseño de recubrimientos antirreflejo.

Empleamos el método de la matriz de transferencia, analizando las interfaces entre las capas como se muestra en la Figura II.5.

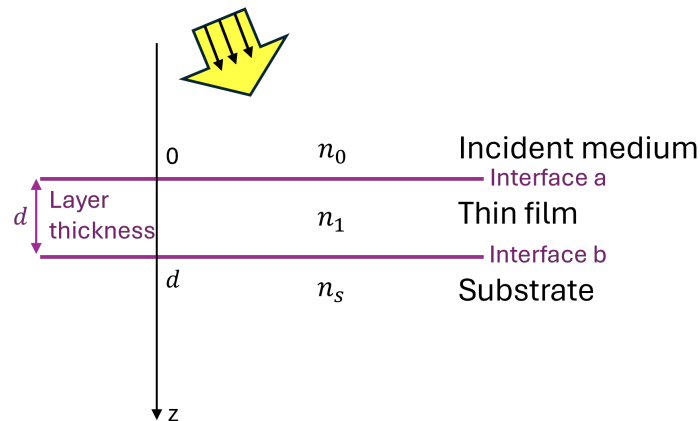


Figura II.5: Representación de las interfaces: Entre el medio incidente y el recubrimiento tenemos la interfaz a . Entre el recubrimiento y el sustrato tenemos la interfaz b . El recubrimiento es una película delgada de espesor d . Los índices de refracción son n_0 en el medio incidente, n_1 en el recubrimiento, y n_s en el sustrato.

Definimos los campos eléctrico y magnético como ondas incidentes en una interfaz b (con un superíndice +) y ondas que la abandonan (con -) como se observa en la Figura II.6.

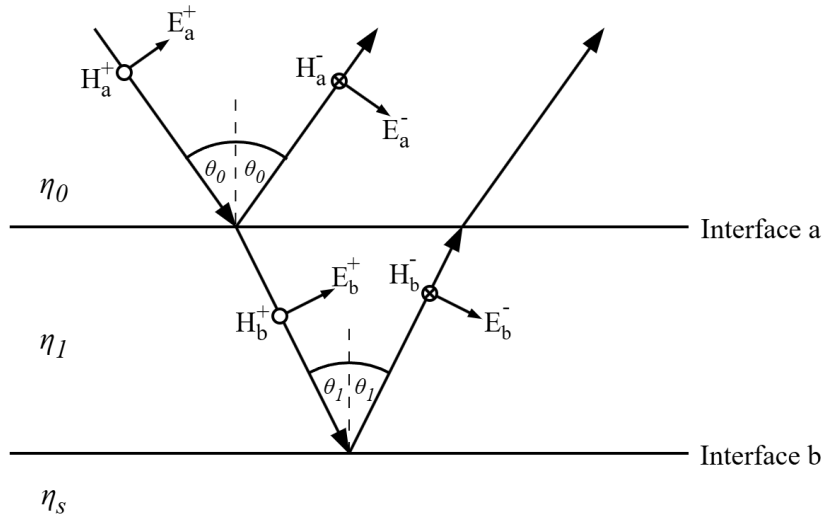


Figura II.6: Representación de los campos eléctrico ($E^\pm$) y magnético ($H^\pm$) en las interfaces a y b de onda una que se propaga desde un medio incidente de admitancia óptica η_0 , a un sustrato de admitancia η_s con un recubrimiento de admitancia η_1 .

$$E_b = E_b^+ + E_b^- \quad (\text{II.31})$$

$$H_b = -\eta_1 E_b^+ + \eta_1 E_b^- \quad (\text{II.32})$$

Ahora, escribiendo E_b^+ , E_b^- , H_b^+ , H_b^- en términos de E_b y H_b .

$$E_b^+ = \frac{1}{2} \left(E_b - \frac{H_b}{\eta_1} \right) \quad (\text{II.33})$$

$$E_b^- = \frac{1}{2} \left(E_b + \frac{H_b}{\eta_1} \right) \quad (\text{II.34})$$

$$H_b^+ = \frac{1}{2} (-\eta_1 E_b + H_b) \quad (\text{II.35})$$

$$H_b^- = \frac{1}{2} (\eta_1 E_b + H_b) \quad (\text{II.36})$$

Los campos en la interfaz a se pueden determinar modificando el factor de fase de la onda para permitir un cambio en la coordenada z de 0 a $-d$.

El factor de fase en la dirección positiva puede multiplicarse por $e^{i\delta}$, donde:

$$\delta = \frac{2\pi n \cos \theta_1}{\lambda} \quad (\text{II.37})$$

Y en la dirección negativa puede multiplicarse por $e^{-i\delta}$. Esto es válido para películas delgadas.

Para la interfaz a , tenemos:

$$E_a^+ = E_b^+ e^{i\delta} = \frac{1}{2} \left(E_b - \frac{H_b}{\eta_1} \right) e^{i\delta} \quad (\text{II.38})$$

$$E_a^- = E_b^- e^{-i\delta} = \frac{1}{2} \left(E_b + \frac{H_b}{\eta_1} \right) e^{-i\delta} \quad (\text{II.39})$$

$$H_a^+ = H_b^+ e^{i\delta} = \frac{1}{2} (-\eta_1 E_b + H_b) e^{i\delta} \quad (\text{II.40})$$

$$H_a^- = H_b^- e^{-i\delta} = \frac{1}{2} (\eta_1 E_b + H_b) e^{-i\delta} \quad (\text{II.41})$$

Entonces

$$\begin{aligned} E_a &= E_a^+ + E_a^- \\ E_a &= E_b \cos \delta + \frac{H_b}{\eta_1} i \sin \delta \end{aligned} \quad (\text{II.42})$$

Y

$$\begin{aligned} H_a &= H_a^+ + H_a^- \\ H_a &= E_b i \eta_1 \sin \delta + H_b \cos \delta \end{aligned} \quad (\text{II.43})$$

Esto en notación matricial se escribe

$$\begin{pmatrix} E_a \\ H_a \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \delta & (i \sin \delta)/\eta_1 \\ i\eta_1 \sin \delta & \cos \delta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_b \\ H_b \end{pmatrix} \quad (\text{II.44})$$

Podemos normalizar la ecuación II.44 dividiendo por E_b

$$\begin{pmatrix} E_a/E_b \\ H_a/E_b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} B \\ C \end{pmatrix} \quad (\text{II.45})$$

Siendo B y C los campos eléctricos y magnéticos normalizados en la interfaz frontal, se define la admitancia óptica de entrada como

$$\Upsilon = \frac{H_a}{E_a} = \frac{C}{B} \quad (\text{II.46})$$

$$\begin{pmatrix} B \\ C \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \delta & (i \sin \delta)/\eta_1 \\ i\eta_1 \sin \delta & \cos \delta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ \eta_2 \end{pmatrix} \quad (\text{II.47})$$

Extendiendo a un caso general de q capas, donde la matriz intermedia es el producto de las matrices individuales de cada capa se obtiene

$$\begin{pmatrix} B \\ C \end{pmatrix} = \left(\prod_{r=1}^q \begin{pmatrix} \cos \delta_r & (i \sin \delta_r)/\eta_r \\ i\eta_r \sin \delta_r & \cos \delta_r \end{pmatrix} \right) \begin{pmatrix} 1 \\ \eta_m \end{pmatrix} \quad (\text{II.48})$$

Donde, ahora hemos utilizado el sufijo m para denotar el sustrato. Recordamos que según la polarización, la admitancia puede tomar las siguientes formas

- $\eta_r = \eta_p = \frac{n_r}{\cos \theta_r}$ para polarización p (TM)
- $\eta_r = \eta_s = n_r \cos \theta_r$ para polarización s (TE)

Se puede apreciar que cada matriz tiene la forma $\begin{pmatrix} \alpha & i\beta \\ i\gamma & \delta \end{pmatrix}$ tal que su determinante es $\alpha\delta + \gamma\beta = 1$.

II.2.1. Reflectancia, Transmitancia y Absorción

Calculamos la irradiancia neta en el lado de salida de la estructura, tomándola como la k-ésima interfaz.

$$I_k = \frac{1}{2} \text{Re}(E_k H_k^*) = \frac{1}{2} \text{Re}(\eta_m^*) E_k E_k^* \quad (\text{II.49})$$

En la interfaz a , la irradiancia es

$$I_a = \frac{1}{2} \text{Re}(E_a H_a^*) = \frac{1}{2} \text{Re}(BC^*) E_k E_k^* \quad (\text{II.50})$$

Si definimos la irradiancia incidente como I_i , entonces la irradiancia en la interfaz a debe ser $(1 - R)I_i$.

$$I_i = \frac{\text{Re}(BC^* E_k E_k^*)}{2(1 - R)} \quad (\text{II.51})$$

Por lo tanto, la transmitancia es:

$$T = \frac{I_k}{I_i} = \frac{\text{Re}(\eta_m^*)(1 - R)}{\text{Re}(BC^*)} \quad (\text{II.52})$$

Para la absorbancia $A = 1 - R - T$

$$A = (1 - R) \left(1 - \frac{\text{Re}(\eta_m^*)}{\text{Re}(BC^*)} \right) \quad (\text{II.53})$$

Reemplazando en la ecuación II.30 el término de la admitancia η_1 , por la admitancia óptica de entrada II.46 se obtiene

$$R = \left(\frac{\eta_0 - Y}{\eta_0 + Y} \right) \left(\frac{\eta_0 - Y}{\eta_0 + Y} \right)^* \quad (\text{II.54})$$

Que reescribiendo en términos de B y C se obtiene

$$R = \left(\frac{\eta_0 B - C}{\eta_0 B + C} \right) \left(\frac{\eta_0 B - C}{\eta_0 B + C} \right)^* \quad (\text{II.55})$$

Reemplazando la ecuación II.55 en II.52, finalmente la transmitancia es

$$T = \frac{4\eta_0 \text{Re}(\eta_m)}{(\eta_0 B + C)(\eta_0 B + C)^*} \quad (\text{II.56})$$

Y reemplazando II.55 en II.53, la absorbancia es

$$A = \frac{4\eta_0 \operatorname{Re}(BC^* - \eta_m)}{(\eta_0 B + C)(\eta_0 B + C)^*} \quad (\text{II.57})$$

II.3. Espectro de transmisión de una microcavidad óptica

Para validar el marco teórico y comprobar la correcta implementación del modelo de matrices de transferencia, se reprodujo el espectro de transmitancia, reflectancia y absorbancia reportado en la tesis de Jara Varela (2018) para una estructura multicapa compuesta por plata, sílice y TDBC como se muestra en la Figura II.7.

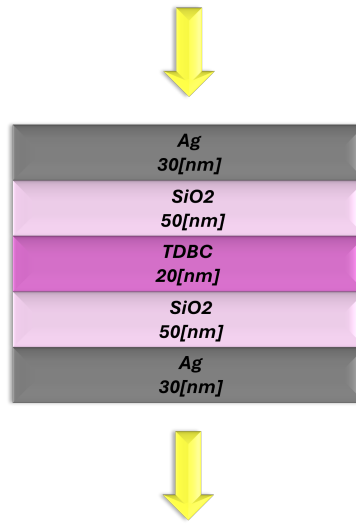


Figura II.7: Estructura multicapa analizada, compuesta por capas alternadas de plata (Ag), dióxido de silicio (SiO_2) y un material activo orgánico (TDBC), con espesores de 30 nm, 50 nm y 20 nm respectivamente.

Para obtener el índice de refracción, usamos la ecuación II.15 que relaciona esta variable con la constante dieléctrica del material.

Usamos la ecuación de Sellmeier para la sílice, ya que es un material que no presenta absorción; por lo tanto, su índice de refracción solo contiene la parte real.

$$n^2(\lambda) = 1 + \frac{B_1\lambda^2}{\lambda^2 - C_1} + \frac{B_2\lambda^2}{\lambda^2 - C_2} + \frac{B_3\lambda^2}{\lambda^2 - C_3} \quad (\text{II.58})$$

Donde los coeficientes B_i y C_i aparecen en la Tabla II.1

i	1	2	3
B_i	0.6961663	0.4079426	0.8974794
C_i	0.0684043	0.1162414	9.896161

Tabla II.1: Coeficientes B_i y C_i para sílice, extraídos de (Jara Varela, 2018).

Para calcular el índice de refracción de la plata, usamos el modelo de Lorentz, como se muestra en la ecuación II.59, ya que la plata es un material cuyo índice de refracción es complejo debido a sus propiedades de absorción.

$$\varepsilon_{Ag} = \varepsilon_0 + \omega_p^2 \cdot \sum_{j=1}^6 \frac{f_j}{\omega_{0j} - \omega^2 - i\Gamma_j\omega} \quad (\text{II.59})$$

Donde $\omega_p = 9.01[\text{eV}]$ y $\varepsilon_0 = 1$, con los parámetros en la Tabla II.2.

j	1	2	3	4	5	6
f_j	0.845	0.065	0.124	0.011	0.84	5.646
$\omega_{0j}[\text{eV}]$	0	0.816	4.481	8.185	9.083	20.29
$\Gamma_j[\text{eV}]$	0.048	3.886	0.452	0.065	0.916	2.419

Tabla II.2: Parámetros para la plata, extraídos de (Jara Varela, 2018).

De manera similar, usamos el modelo de Lorentz para el TDBC, ya que es un material orgánico que también presenta absorción.

$$\varepsilon = \varepsilon_\infty + \frac{f_0\omega_0^2}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\gamma_0\omega} \quad (\text{II.60})$$

Donde $\omega_0 = 595[\text{nm}]$, $\varepsilon_\infty = 1.45$, $f_0 = 0.05$ y $\gamma_0 = 50[\text{meV}]$, también sacados de (Jara Varela, 2018)

Ahora, la estructura que se analizará con base en la ecuación II.40 tendrá la siguiente forma.

$$\begin{pmatrix} B \\ C \end{pmatrix} = T(\omega) \begin{pmatrix} 1 \\ \eta_m \end{pmatrix} \quad (\text{II.61})$$

Donde $T(\omega)$ representa a la matriz característica total de la estructura multicapa, obtenida a partir del producto secuencial de las matrices M_j de cada una de las capas que la componen, en el orden en que la luz atraviesa la estructura.

$$T(\omega) = M_{Ag} \cdot M_{SiO_2} \cdot M_{TDBC} \cdot M_{SiO_2} \cdot M_{Ag} \quad (\text{II.62})$$

En este caso particular, se analizó para incidencia normal ($\theta_0 = 0$), donde el medio de salida es aire, por lo que la admitancia es $\eta_m = 1$. Se observa en la Figura II.8 que en general la estructura presenta coherencia en sus resultados, ya que la suma $R + T + A \approx 1$ se mantiene a lo largo del espectro. Además, los peaks obtenidos se encuentran en las mismas longitudes de ondas reportadas en la referencia, lo cual valida la simulación.

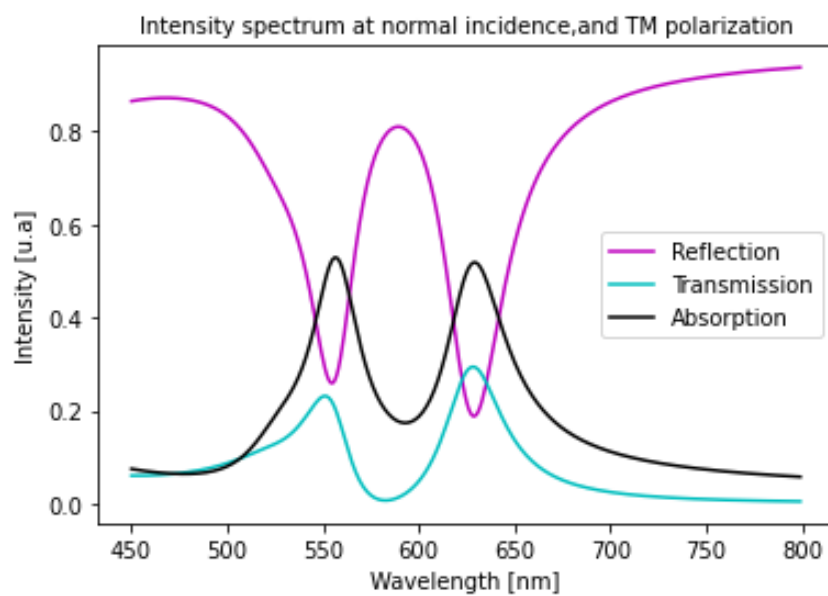


Figura II.8: Microcavidad óptica de TDBC como capa activa.

CAPÍTULO III: Teoría de Recubrimiento Antirreflejo

Los recubrimientos antirreflejo (AR) son componentes fundamentales en óptica, pues permiten reducir las pérdidas de luz producidas por la reflexión de Fresnel en las superficies. En ausencia de estos recubrimientos, cada interfaz aire–vidrio refleja en promedio un 4 % de la luz incidente, lo que limita la transmisión total y disminuye la eficiencia de los sistemas ópticos. Este efecto resulta especialmente crítico en aplicaciones láser, donde las reflexiones no deseadas pueden desestabilizar la cavidad, generar imágenes fantasma o incluso provocar daños por retroreflexión.

El principio de funcionamiento de un AR se basa en la interferencia destructiva entre los haces reflejados en una película delgada, de manera que la reflexión se cancela en la longitud de onda de diseño. Gracias a ello, se optimiza la transmisión en lentes, ventanas, cristales no lineales y otros componentes ópticos, mejorando el desempeño de sistemas con múltiples superficies transmisivas o en condiciones de baja iluminación.

Se busca aplicar el método de matrices de transferencia en el diseño de recubrimientos antirreflectantes, primero trabajando con una capa para luego entrar en el diseño de múltiples capas. Dentro del estudio es importante mencionar las condiciones que deben cumplir los materiales para ser usados como recubrimientos, como los espesores de las capas y el índice de refracción que deben tener para poder anular la reflectancia. Esto mediante el fenómeno de interferencia destructiva entre múltiples reflexiones. Para validar nuevamente la implementación del código desarrollado, se reproduce un caso reportado en la literatura.

III.1. Interferencia Destructiva

La Figura III.1 muestra una estructura monocapa donde los índices de refracción n_0 , n_1 y n_s corresponden al medio incidente, al recubrimiento y al sustrato respectivamente. Se observa que la capa $\lambda/4$ (siendo λ la longitud de onda de diseño) introduce, para la onda que se refleja en la interfaz interna y regresa al medio incidente, un desfase total de $\delta = \frac{\pi}{2}$, lo cual implica que llega invertida de fase respecto de la reflexión superficial, generando una interferencia destructiva entre las ondas y anulando por consecuencia la reflectancia.

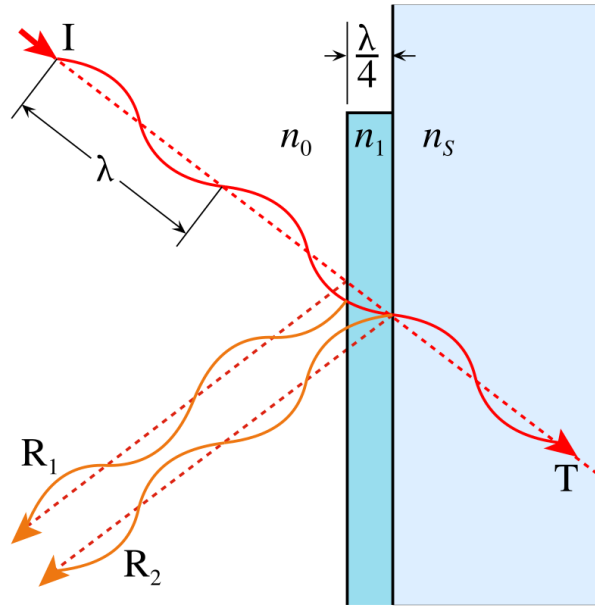


Figura III.1: Esquema de un recubrimiento antirreflejo de una sola capa. La onda incidente (I) genera las reflexiones R_1 y R_2 en las interfaces aire–capa y capa–sustrato. Cuando el espesor de la película es un cuarto de la longitud de onda de diseño, las reflexiones interfieren de manera destructiva, reduciendo la reflectancia y aumentando la transmitancia (T). Extraído de *Wikipedia* (Wikipedia contributors, 2025).

III.2. Condición de cuarto de onda

III.2.1. Condición de Reflectancia cero para una monocapa

Considerando una estructura de capas delgadas depositadas sobre un sustrato de admitancia óptica Y_s , como la de la Figura II.5 En la formulación de matrices características, los campos tangenciales en la interfaz de incidencia (a) y en la interfaz de salida (b) se relacionan mediante la ecuación II.44 que recordamos es la siguiente

$$\begin{pmatrix} E_a \\ H_a \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \delta & \frac{i}{\eta} \sin \delta \\ i \eta \sin \delta & \cos \delta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_b \\ H_b \end{pmatrix},$$

donde η es la admitancia óptica inclinada de la capa, y a incidencia normal, su espesor de fase está dado por la ecuación II.39 $\delta = (2\pi/\lambda) n d$. Definimos la *admitancia de entrada* de la estructura como:

$$Y_{in} \equiv \frac{H_a}{E_a}.$$

Cuya reflectancia en el medio incidente (de admitancia η_0), según la ecuación II.55 se puede escribir como

$$r = \frac{Y_{in} - \eta_0}{Y_{in} + \eta_0}, \quad R = |r|^2,$$

por lo que la condición para anular la reflectancia en una longitud de onda de diseño λ_0 es

$$Y_{\text{in}}(\lambda_0) = \eta_0$$

Para una **monocapa** de índice n_1 , admitancia η_1 buscando un espesor óptico de *cuarto de onda* $\delta_1 = \frac{\pi}{2}$, por la ecuación II.37 da como resultado que el espesor de la capa debe estar dado por

$$d_1 = \frac{\lambda_0}{4n_1} \quad (\text{III.1})$$

produciendo que la matriz de la ecuación II.44 se reduzca a

$$\mathbf{M}_{\lambda/4} = \begin{pmatrix} 0 & i/\eta_1 \\ i\eta_1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{III.2})$$

Si el sustrato visto por la capa tiene admitancia Y_s (es decir, $H_b = Y_s E_b$), entonces

$$E_a = \frac{i}{\eta_1} Y_s E_b, \quad H_a = i\eta_1 E_b \quad \implies \quad Y_{\text{in}} = \frac{\eta_1^2}{Y_s}$$

Imponiendo $Y_{\text{in}} = \eta_0$ se obtiene la condición de índice para el recubrimiento monocapa

$$\eta_1 = \sqrt{\eta_0 Y_s} \quad \text{con} \quad d_1 = \frac{\lambda_0}{4n_1}$$

A incidencia normal, $\eta \propto n$, por lo que la condición se escribe como

$$n_1 = \sqrt{n_0 n_s} \quad (\text{III.3})$$

La transformación de admitancia permite el ajuste simultáneo de las amplitudes de las reflexiones tal que, cumpliéndose la condición $Y_{\text{in}} = \eta_0$, dichas contribuciones a la reflexión tienen igual módulo con fase opuesta, anulándose la reflectancia a la longitud de onda de diseño.

Si utilizáramos un espesor de fase $\delta = m\pi$ con $m = 0, 1, 2, 3, \dots$, obtendríamos una capa de espesor de media onda $d_2 = \frac{m\lambda}{2n_1}$, por lo que la matriz de la ecuación II.44 queda

$$\mathbf{M}_{\lambda/2} = \pm \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (\text{III.4})$$

Esta es la matriz identidad y no puede tener ningún efecto sobre la reflectancia o transmitancia en una estructura, como si la capa fuera invisible. De igual manera este es un resultado particularmente útil, por lo que a las capas de media onda se les denominan capas ausentes.

III.2.2. Bicapa de cuarto de onda

Para una **bicapa** $\lambda/4$ con admitancias η_2 (capa adyacente al sustrato) y η_1 (la capa superior), la expresión de admitancia se aplica recursivamente:

$$Y_{(2)} = \frac{\eta_2^2}{Y_s}, \quad Y_{\text{in}} = \frac{\eta_1^2}{Y_{(2)}} = \frac{\eta_1^2 Y_s}{\eta_2^2}.$$

Aplicando la condición $Y_{\text{in}} = \eta_0$ obtenemos

$$\frac{\eta_1}{\eta_2} = \sqrt{\frac{\eta_0}{Y_s}}, \quad d_i = \frac{\lambda_0}{4n_i}$$

Lo cual a incidencia normal, $\eta \propto n$, resultando la condición de bicapa

$$n_1/n_2 = \sqrt{n_0/n_s} \quad (\text{III.5})$$

III.2.3. N capas de cuarto de onda (puente de admitancia)

Para una estructura de N **capas** todas de cuarto de onda, la transformación de admitancia $Y \mapsto \eta^2/Y$ se aplica capa por capa (desde el sustrato hacia arriba). Esto da

$$Y_{\text{in}} = \frac{\prod_{\text{capas impares}} \eta_j^2}{\prod_{\text{capas pares}} \eta_j^2} \times \begin{cases} \frac{1}{Y_s}, & N \text{ impar}, \\ Y_s, & N \text{ par}, \end{cases}$$

y la condición para anular la reflectancia $Y_{\text{in}} = \eta_0$ se traduce en

$$\frac{\prod_{\text{impares}} \eta_j}{\prod_{\text{pares}} \eta_j} = \begin{cases} \sqrt{\eta_0 Y_s}, & N \text{ impar}, \\ \sqrt{\frac{\eta_0}{Y_s}}, & N \text{ par}. \end{cases}$$

Este conjunto de soluciones describe un *puente de admitancia* que consta en una secuencia de capas $\lambda/4$ cuyas admitancias intermedias suavizan Y_s con η_0 , minimizando la reflexión en λ_0 .

III.3. Aplicación a un sistema Si–SiO: comparación con resultados de literatura

Como alternativa para validar la implementación de la simulación del diseño, se tomó como referencia el trabajo de Cox (Cox et al., 1961), en el análisis de recubrimientos antirreflejo. En dicho artículo, se examinan diversas configuraciones de películas delgadas depositadas sobre distintos sustratos, mostrando su efecto en la reducción de la reflectancia. Dentro de los casos

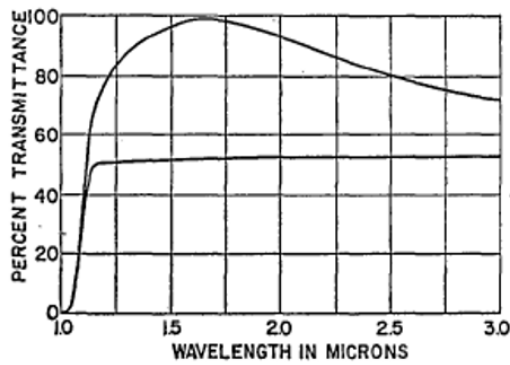
que se presentan, se encuentra el recubrimiento de un sustrato de silicio (Si) mediante una monocapa de monóxido de silicio (SiO), cuyos resultados se ilustran en la Figura ???. Esta parte del trabajo resulta ser de gran interés, ya que se trata de un caso sencillo de una estructura monocapa que puede trabajarse de manera analítica y, al mismo tiempo, proporciona una curva experimental/teórica que nos permite comparar directamente los resultados obtenidos con el código propio desarrollado, sirviendo como punto de partida en el estudio de recubrimientos antirreflectantes.

III.3.1. Parámetros y configuración experimental de Cox (1961)

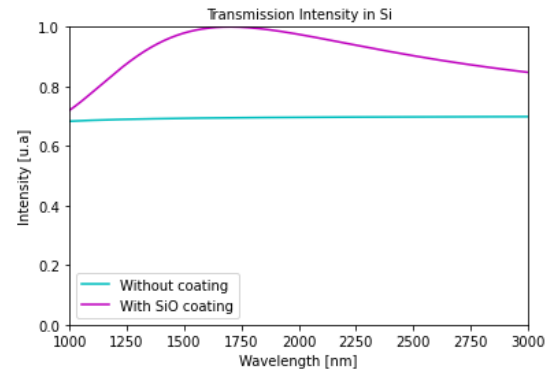
En la parte que nos interesa del trabajo de referencia (Cox et al., 1961), se analizó de forma experimental la reflectancia espectral en una placa de 1.5mm de silicio (Si) de espesor, recubierto con una monocapa de monóxido de silicio (SiO). Para ello, se consideró el aire como medio incidente ($n_0 \approx 1$) y se aplicó una película de SiO de espesor ajustado a la condición de cuarto de onda en la longitud de onda de diseño $\lambda_0 = 1.7\mu\text{m}$ por ambos lados del sustrato. Su índice de refracción depende de las condiciones de evaporación y puede reportar un valor de hasta 1,9 en el infrarrojo cercano mediante evaporación rápida a baja presión. Esto permite que sea un buen candidato de recubrimiento antirreflectante para materiales como el silicio o germanio cuyos índices son bastante mayores (aprox. 3.5). La Figura III.2a, obtenida del artículo, muestra la curva de transmitancia medida para esta estructura, donde se observa un peak generado en la longitud de onda de diseño, que valida el principio de la condición para anular la reflexión.

Utilizamos estos resultados como base para contrastar y validar la implementación numérica realizada en este trabajo mediante el método de matrices de transferencia. Para ello, se considera el sustrato de silicio con espesor semi-infinito (última capa de la estructura), el recubrimiento monocapa de monóxido de silicio, considerando el aire como el medio de incidencia con $n_0 = 1$. Se busca generar el peak al mismo espesor de cuarto de onda en $1.7\mu\text{m}$ y realizar el análisis del espectro entre $1\mu\text{m}$ y $3\mu\text{m}$.

Los valores de índice de refracción utilizados en este trabajo fueron obtenidos a través del repositorio refractiveindex.info (Polyanskiy, 2025), el cual recopila datos experimentales de diversas fuentes. En particular, para el silicio (Si) se emplearon los datos reportados por Franta et al. (Franta et al., 2019), mientras que para el monóxido de silicio (SiO) se usaron los resultados experimentales de Hass y Ramsey (Hass & Ramsey, 1956). Para trabajar los datos teniendo una representación continua y suavizada de los valores del índice de refracción en todo rango espectral de interés, los datos se interpolaron mediante el método de spline cúbico.



(a) Resultado experimental



(b) Resultado Teórico

Figura III.2: Transmitancia de un sustrato de silicio ($d = 1.5 \text{ mm}$) con y sin recubrimiento antirreflejo de SiO, diseñado con un espesor de cuarto de onda a $1.7 \mu\text{m}$. (a) Resultados experimentales reportados por Cox y Hass (Cox et al., 1961), en el rango espectral de 1 a $3 \mu\text{m}$. (b) Resultados obtenidos mediante la simulación implementada, considerando el mismo sistema para fines de comparación.

En la Figura III.2b se aprecian los resultados numéricos obtenidos sobre la transmitancia de la estructura estudiada. Se observa el aumento de la transmitancia al 100 % en torno a la longitud de onda del diseño ($\lambda_0 = 1.7 \mu\text{m}$), entregando un valor de 227.7 nm de espesor para la capa de SiO. Esta coincidencia en la posición del máximo de transmisión en comparación al resultado experimental de referencia, confirma la validez de la implementación numérica del método de matrices de transferencia. Por otra parte, se puede apreciar la diferencia entre la transmisión obtenida sobre el silicio sin recubrimiento, que experimentalmente es de un 54 % versus el resultado numérico que entrega una transmisión del 70 %. La diferencia se debe a la estructura estudiada, ya que en la simulación se considera la estructura del silicio como semi-infinita, por ende, el valor de la transmitancia obtenida corresponde a la transmitancia medida dentro de la placa de silicio, donde el 30 % de la reflectancia obtenida corresponde netamente a la reflexión producida entre la interfaz aire-SiO, dejando fuera la contribución de las múltiples reflexiones que se generan dentro de la capa de silicio, además de los efectos de absorción en el material. La decisión de considerar la estructura como semi-infinita se debe a que, utilizando el método matricial para la estructura SiO-Si-SiO, se observaban oscilaciones debido a las múltiples reflexiones producidas en la placa de silicio, las cuales impedían evidenciar el efecto del recubrimiento, que era el principal punto de interés. Esto ocurre cuando el espesor es mucho mayor a la longitud de onda ($d \gg \lambda_0$), siendo este caso el espesor de la placa de 1.5 mm en contraste con la longitud de onda de diseño de $\lambda_0 = 1.7 \mu\text{m}$, por lo que el espesor del sustrato comienza a comportarse como una placa "gruesa".

Otro efecto a considerar, que produce las diferencias entre los resultados experimentales reportados en la literatura y los obtenidos en la simulación pueden atribuirse en parte a que no se consideró la absorción del silicio en el modelo implementado. En la práctica, el silicio presenta un coeficiente de absorción no nulo sobretodo en longitudes menores a 1000 nm , lo que reduce la

transmitancia medida en los experimentos. Al no incorporar este factor en el cálculo, el modelo idealizado asume un material completamente transparente, entregando valores de transmisión mayores que los observados experimentalmente. Para mejorar los resultados teóricos se debiese incluir el coeficiente de extinción $\varepsilon = \varepsilon_r + i\varepsilon_i$.

CAPÍTULO IV: Diseño de Recubrimiento Antirreflejo para Cristales MOF

IV.1. Selección de clases de MOFs y materiales de recubrimiento

Para los análisis previos al diseño de recubrimiento se optó por estudiar MOFs anisotrópicos uniaxiales. No se consideraron materiales isotrópicos, ya que se realizó un primer estudio con el MOF isotrópico IRMOF-1, y su valor de índice de refracción era demasiado bajo, por lo que encontrar un material que cumpliera las condiciones de cero reflexión fue complejo y los posibles candidatos tenían elevado costo y son poco utilizados (por ejemplo, SnSe). En este contexto, los MOFs uniaxiales, que a diferencia de los biaxiales, presentan un eje óptico, nos permiten realizar un estudio mas representativo, ya que se trabajó con el promedio de sus índices. Además, para los MOFs biaxiales, el promedio de los índices se concentraban en un rango de valores menores a los de los uniaxiales, lo cual dificultaría aún más el encontrar un material para recubrimiento.

Considerando la relación entre el índice de refracción del recubrimiento y el del sustrato, se presenta un gráfico comparativo entre distintas clases de materiales y MOFs uniaxiales, con el fin de identificar posibles MOFs de interés y materiales candidatos a utilizar como recubrimiento. Se consideraron tres familias de materiales de interés: polímeros, óxidos y vidrios.

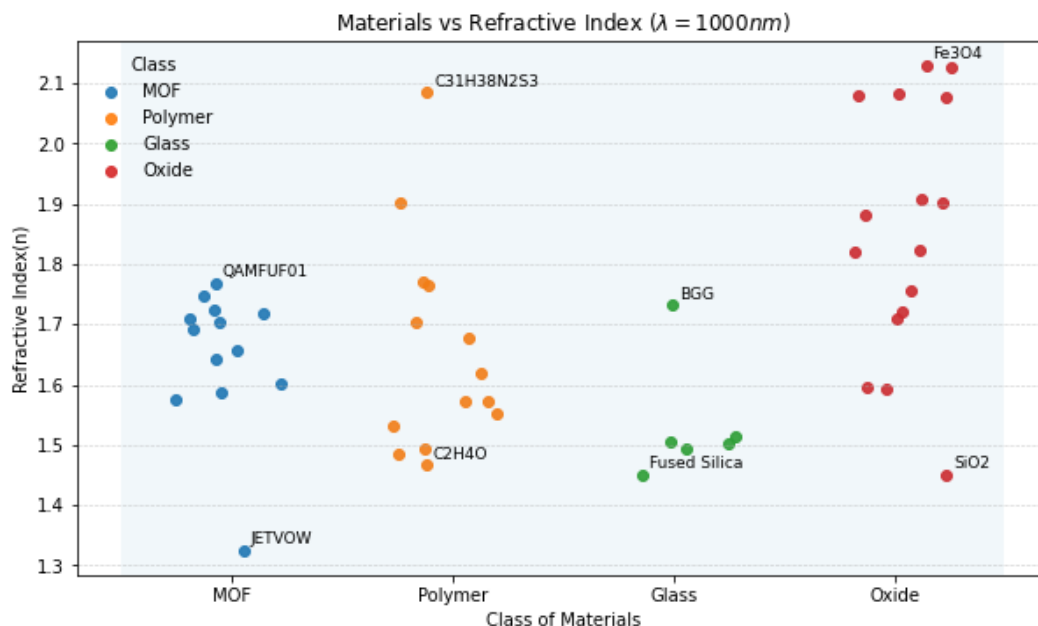


Figura IV.1: Índices de refracción de diferentes clases de materiales (MOFs, polímeros, vidrios y óxidos) a $\lambda = 1000\text{ nm}$, extraídos de (Polyanskiy, 2025). Este análisis permite identificar materiales candidatos viables para emplearse como recubrimientos en función de su contraste con el sustrato.

En la Figura IV.1 se observa que los MOFs presentan índices de refracción en el rango aproximado de 1.35 a 1.8. Además, encontramos tanto en los polímeros, como en los vidrios y óxidos algunos materiales que al menos cumplen con la condición de tener un índice de refracción menor al de ciertos MOFs, lo que nos permitiría usarlos como recubrimientos, por ejemplo, en el caso de la sílice fundida. No obstante, los óxidos destacan frente a las otras clases de materiales, ya que presentan mayor variedad de valores de índice de refracción, permitiendo diseñar gradientes de índices y para optimizar las condiciones de mínima reflectancia. Por otra parte, presentan mayor estabilidad química y durabilidad en comparación con los polímeros, los cuales tienden a degradarse. Asimismo, algunos ya se utilizan como recubrimientos antirreflejo (como son el caso del SiO_2 , TiO_2), para los cuales existen técnicas de deposición consolidadas, como el sputtering, sol-gel o ALD, pudiendo controlar la uniformidad y el espesor de las capas del recubrimiento. (Gutiérrez Martínez et al., 2019)

IV.2. MOFs y materiales de recubrimiento seleccionados

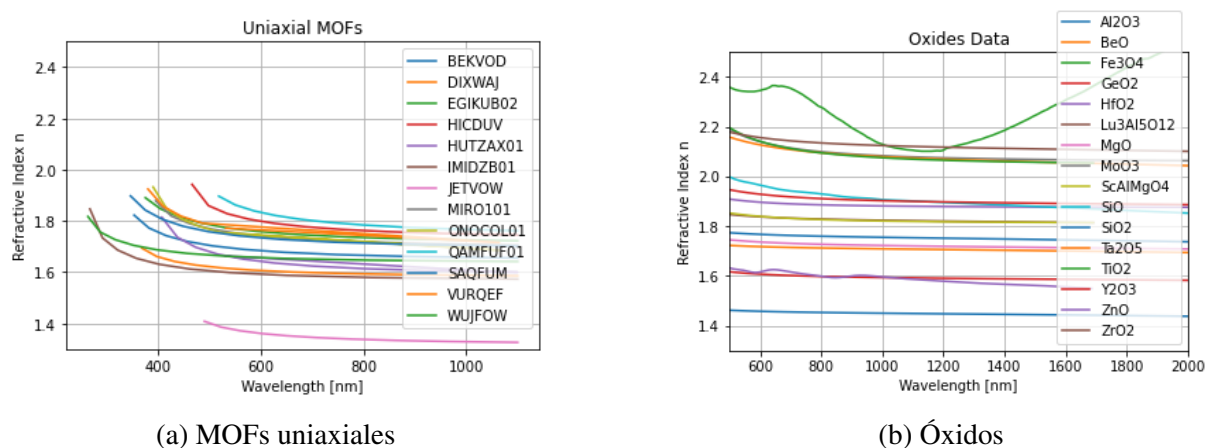


Figura IV.2: Índice de refracción en función de la longitud de onda: (a) MOFs uniaxiales, con datos obtenidos desde el repositorio de nuestro grupo de investigación; (b) materiales de la clase óxidos, con datos extraídos de la base de datos pública (Polyanskiy, 2025). En ambos casos se muestra el índice de refracción en función de la longitud de onda.

En la Figura IV.2 se presenta el comportamiento del índice de refracción en función de la longitud de onda para los MOFs uniaxiales y los óxidos. Se observa que, en gran parte de los casos, los óxidos presentan valores de índice de refracción mayores a los de los MOFs.

Los MOFs seleccionados para una primera evaluación son QAMFUF01, BEKVOD y MIRO101. Dado que necesitamos trabajar con materiales cuyo índice de refracción sea menor al del sustrato, el MOF QAMFUF01 favorece al tener la curva con mayor índice de refracción, por lo que permite que mas materiales de recubrimiento cumplan en parte con dicha condición. BEKVOD también se encuentra entre los MOFs con valores más altos de índice de refracción. Finalmente, MIRO101 fue seleccionado debido a que, si bien presenta un índice menor, resulta

ser un material de alto interés dentro del grupo de estudio, porque hay experimentos recientes de óptica láser aplicados a este material (Hidalgo-Rojas et al., 2023).

En el caso del recubrimiento se consideró el dióxido de silicio (SiO_2) y el dióxido de germanio (GeO_2), que si bien veremos después que no presentan los valores de índice de refracción ideal para los MOFs seleccionados, ambos muestran curvas con los valores más bajos dentro de los óxidos analizados, lo que los hace mas apropiados para realizar las pruebas de transmisión usándolos como recubrimiento. En particular, el SiO_2 destaca por ser un material que ya es utilizado en recubrimientos antirreflejo, con técnicas de deposición consolidadas (como sol-gel). El GeO_2 , por su parte, presenta un índice levemente mayor, pero sigue dentro de un rango de valores aceptables por lo que podemos considerarlo en las evaluaciones.

Para trabajar las estructuras de recubrimiento, se realizó una interpolación del índice de refracción en función de la longitud de onda, mediante el método de *Spline Cúbico* para el caso de los óxidos, que podemos observar en la Figura IV.3

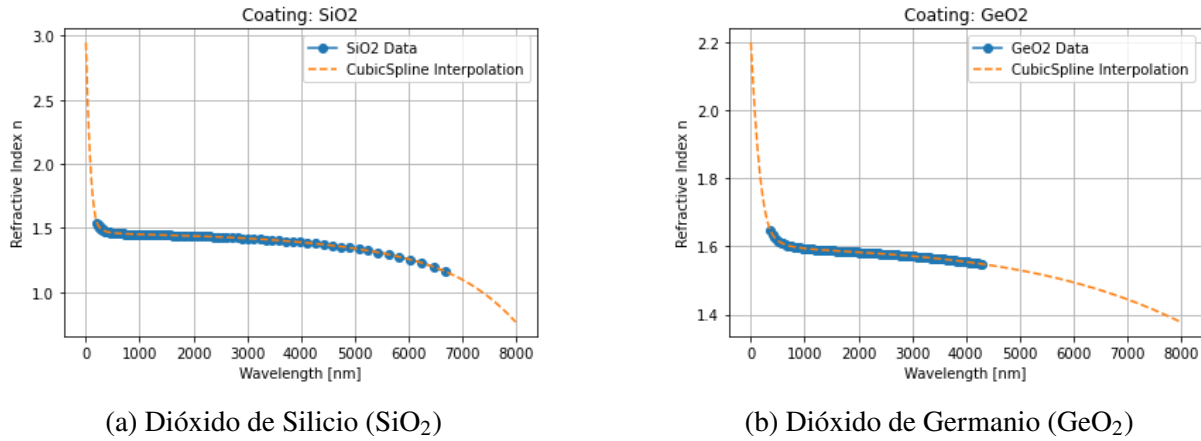


Figura IV.3: Índice de refracción vs longitud de onda para SiO_2 y GeO_2 . Ambos muestran la interpolación que se realizó a los datos obtenidos en refractiveindex.info, mediante el método de Spline Cúbico para determinar el comportamiento espectral.

Para el caso de los MOFs, se utilizó la Ecuación de Sellmeier al realizar la interpolación de los datos para determinar la tendencia en el comportamiento del índice de refracción. Cabe destacar, que en los tres MOFs seleccionados se trabajó utilizando el promedio de los índices en los tres ejes n_x , n_y y n_z . Luego, utilizando el código desarrollado en Python a partir del método de matrices de transferencia, se realizaron las pruebas con cada material (SiO_2 y GeO_2) como un recubrimiento antirreflejo monocapa con cada MOF.

IV.2.1. MIRO101

Con MIRO101, comenzamos observando en la Figura IV.4 el comportamiento del índice de refracción con la interpolación realizada en base al promedio de ellos, comparandolos con los datos de los índices en cada eje.

Consideremos que el promedio de el índice de refracción de los datos del MIRO101 y el valor

ideal del índice de refracción del recubrimiento para este material, se encuentran en los siguientes intervalos.

$$n_{MIRO101} = [1.879 - 1.705]$$

$$n_{coating} = [1.371 - 1.306]$$

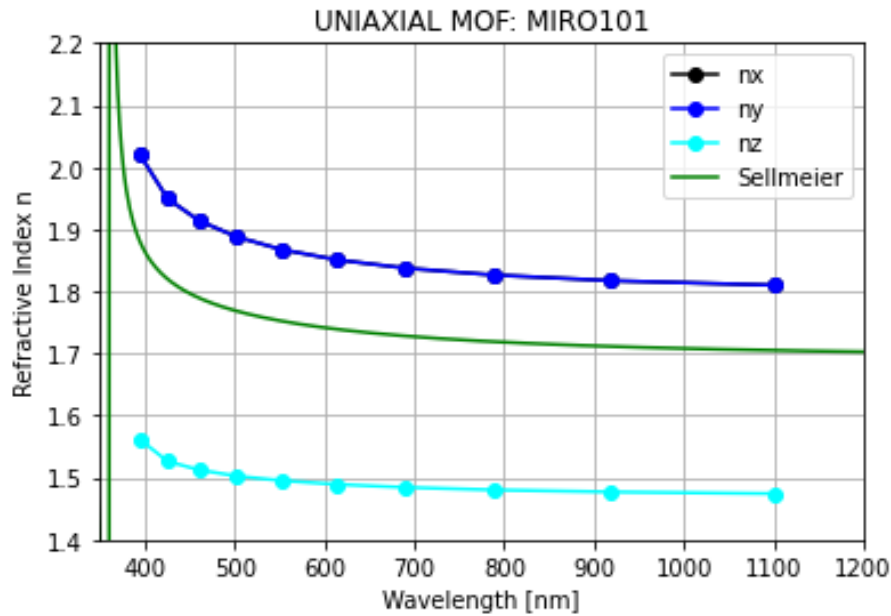
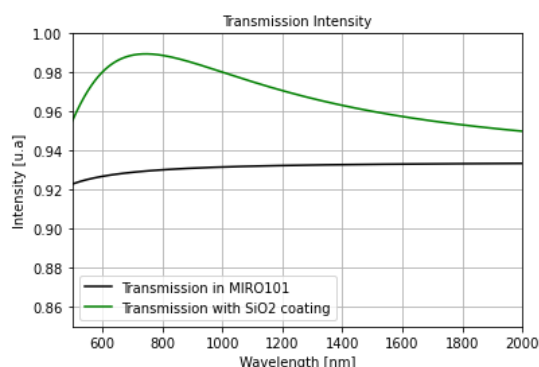
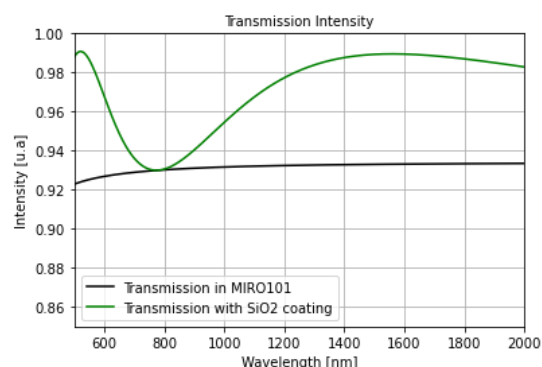


Figura IV.4: Comparación entre el comportamiento del índice de refracción del MOF MIRO101 en sus tres ejes versus la interpolación con la Ecuación de Sellmeier aplicada al promedio de los datos.

Observamos que al ser un material uniaxial, el valor del índice de refracción coincide en el eje x e y. Esto se refleja ya que la curva de la interpolación al promedio de los índices se encuentra entre medio de las curvas de cada eje, acercándose mas hacia las curvas de n_x y n_y . Comenzamos analizando con un recubrimiento de una sola capa de dióxido de silicio.



(a) Transmisión con recubrimiento de SiO_2 de 129 nm y peak en 750 nm.

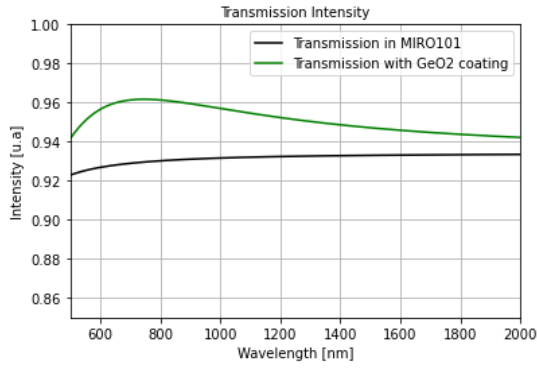


(b) Transmisión con recubrimiento de SiO_2 de 268 nm y peak en 1550 nm.

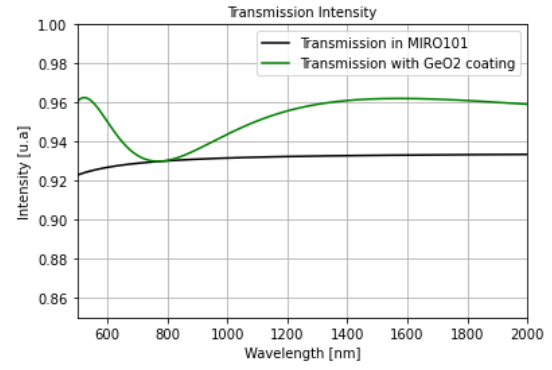
Figura IV.5: Intensidad de transmisión en función de la longitud de onda sobre MIRO101. Ambos casos utilizando un recubrimiento antirreflejo monocapa de dióxido de silicio. (a) peak de transmisión a los 750 nm con recubrimiento de 129 nm de espesor. (b) peak de transmisión a los 1550 nm con recubrimiento de 268 nm de espesor.

En la Figura IV.5 observamos la diferencia en la intensidad de transmisión entre el MOF con y sin recubrimiento, notando además que, al aumentar el espesor del recubrimiento, podemos generar que el peak de transmisión se desplace hacia la derecha. También se logra apreciar que el aumento de la intensidad de la transmisión tiende a mantenerse mas a lo largo del espectro si buscamos generar un peak a una longitud de onda mayor. En el primer caso, la intensidad de la transmisión aumenta de un 93 % a un 99 % en el peak de los 750 nm. En el segundo caso, la intensidad de la transmisión aumenta de un 93.5 % a un 99 %.

En la Figura IV.6 se repite el procedimiento ahora para el caso del dióxido de germanio. Al igual que como ocurre con el dióxido de silicio, el dióxido de germanio permite aumentar la intensidad de transmisión, incrementándose aproximadamente de un 93 % a un 96 % para el caso del peak en 750 nm, y de un 93.5 % a un 96 % a un peak de 1550 nm. Se observa el mismo comportamiento de aumento de espesor y estabilidad en el aumento de la transmisión al buscar generar el peak a los 1550 nm. Independiente del peak de transmisión que busquemos generar, en ambos casos logramos notar que se cumple con lo esperado en cuanto al valor del índice de refracción de los óxidos utilizados. Era esperable que maximizara de mejor manera la transmisión un material con menor índice de refracción, que en este caso corresponde al dióxido de silicio, ya que produce un aumento del 6 % versus el dióxido de germanio que aumenta la transmisión en un 3 % aproximadamente.



(a) Transmisión con recubrimiento de GeO_2 de 117 nm y peak en 750 nm.



(b) Transmisión con recubrimiento de GeO_2 de 244 nm y peak en 1550 nm.

Figura IV.6: Intensidad de transmisión en función de la longitud de onda sobre MIRO101. Ambos casos utilizando un recubrimiento antirreflejo monoca de dióxido de germanio. (a) peak de transmisión a los 750 nm con recubrimiento de 129 nm de espesor. (b) peak de transmisión a los 1550 nm con recubrimiento de 268 nm de espesor.

IV.2.2. BEKVOD

Continuamos realizando los mismos análisis, ahora para el caso de BEKVOD. Consideremos que el promedio de el índice de refracción de los datos del BEKVOD y el valor ideal del índice de refracción del recubrimiento para este material, se encuentran en los siguientes intervalos.

$$n_{BEKVOD} = [1.823 - 1.655]$$

$$n_{coating} = [1.350 - 1.287]$$

En la Figura IV.7 podemos observar que también coinciden las curvas del índice de refracción entre los ejes x e y , pero en esta ocasión ademas, notamos que en el eje z , el comportamiento de n_z se acerca bastante al de n_x y n_y , por lo que, a diferencia del MIRO101, el promedio de estos índices resulta ser mas representativo como para permitirnos trabajar en cualquiera de los ejes del BEKVOD.

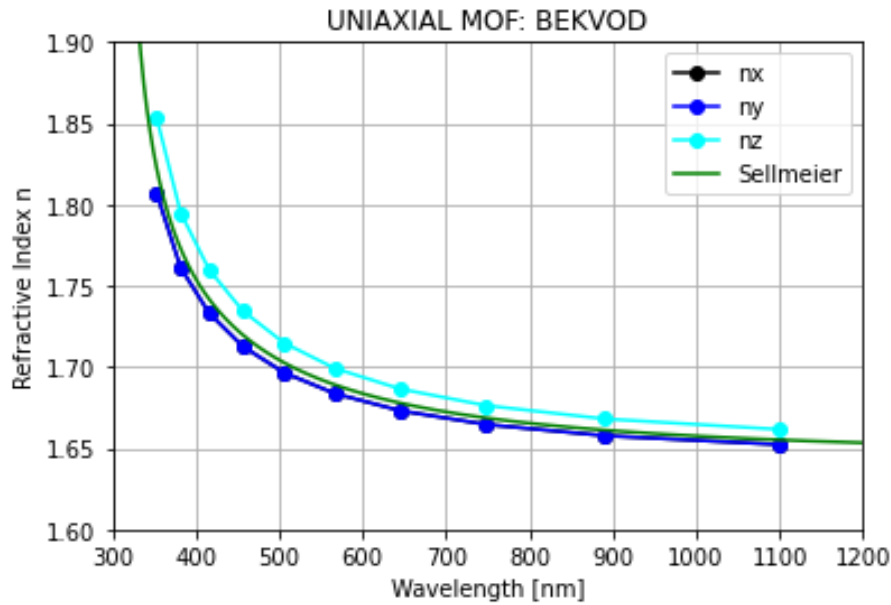
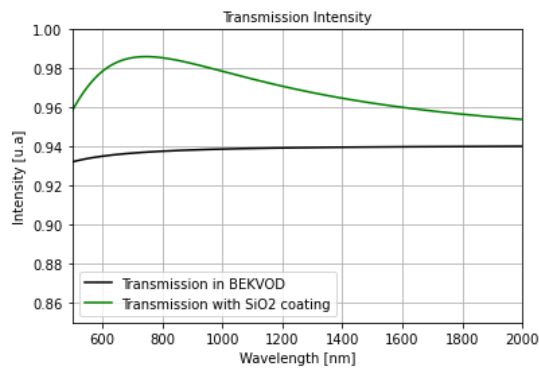
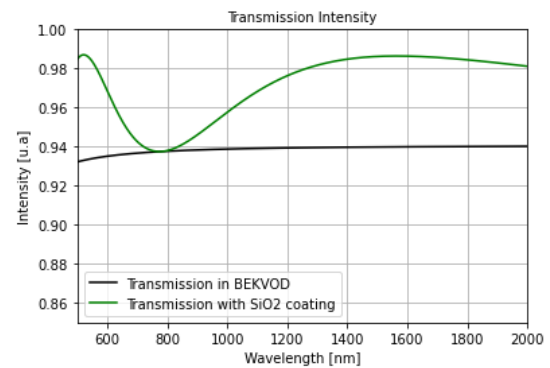


Figura IV.7: Comparación entre el comportamiento del índice de refracción del MOF BEKVOD en sus tres ejes versus la interpolación con la Ecuación de Sellmeier aplicada al promedio de los datos.

Repitiendo el procedimiento en cuanto al análisis de recubrimiento antirreflejo monocapa, primero con el dióxido de silicio, se obtienen los resultados de la Figura IV.8.



(a) Transmisión con recubrimiento de SiO_2 de 129 nm y peak en 750 nm.

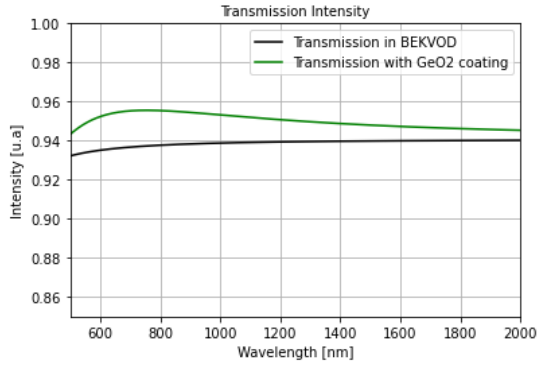


(b) Transmisión con recubrimiento de SiO_2 de 268 nm y peak en 1550 nm.

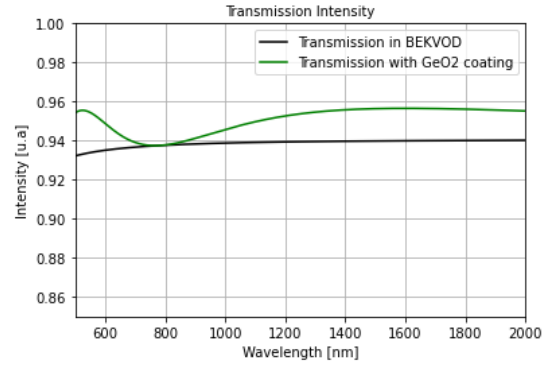
Figura IV.8: Intensidad de transmisión en función de la longitud de onda sobre BEKVOD. Ambos casos utilizando un recubrimiento antirreflejo monocapa de dióxido de silicio. (a) peak de transmisión a los 750 nm con recubrimiento de 129 nm de espesor. (b) peak de transmisión a los 1550 nm con recubrimiento de 268 nm de espesor.

Los análisis para el caso del BEKVOD son similares. Comparamos la intensidad de transmisión directamente sobre el material, versus el recubrimiento de dióxido de silicio con dos espesores diferentes. También sucede que, el aumentar el espesor del recubrimiento produce un corrimiento en el peak de transmisión hacia la derecha, apreciándose una mayor estabilidad en el aumento de transmisión a lo largo del espectro. En ambos casos la intensidad de la transmisión

en el peak aumenta aproximadamente de un 94 % a un 98.5 %.



(a) Transmisión con recubrimiento de GeO_2 de 117 nm y peak en 750 nm.



(b) Transmisión con recubrimiento de GeO_2 de 244 nm y peak en 1550 nm.

Figura IV.9: Intensidad de transmisión en función de la longitud de onda sobre BEKVOD. Ambos casos utilizando un recubrimiento antirreflejo monocapa de dióxido de germanio. (a) peak de transmisión a los 750 nm con recubrimiento de 117 nm de espesor. (b) peak de transmisión a los 1550 nm con recubrimiento de 244 nm de espesor.

En la Figura IV.9 observamos como es que influye el hecho de que el valor del índice de refracción del sustrato vs el recubrimiento sean parecidos, en donde ambos se aproximan al valor de 1.6 a los 1000 nm. Por eso notamos que si bien se genera un incremento en la transmisión, esta es bastante menor, siendo un aumento aproximadamente desde el 93.5 % al 95.5 % en los 750 nm y del 94 % al 95.5 % en los 1550 nm. De igual manera, el modelo sigue mostrando que para mayores espesores, mayor longitud de onda en el peak y más estable el aumento de la transmisión a lo largo del espectro.

IV.2.3. QAMFUF01

En último lugar analizamos el MOF QAMFUF01, en cuyo caso consideramos a partir del promedio de los datos de sus índices de refracción, cual sería el intervalo ideal de valores de índices para utilizar como recubrimiento.

$$n_{QAMFUF01} = [1.897 - 1.762]$$

$$n_{coating} = [1.377 - 1.327]$$

En la Figura IV.10 podemos notar que si bien la curva del índice de refracción n_x no es tan cercana a las de n_x y n_y como en el caso del BEKVOD, si son mucho más próximas en comparación a las del MIRO101, por lo que de igual manera trabajar con el promedio de los índices resulta ser una representativa aproximación.

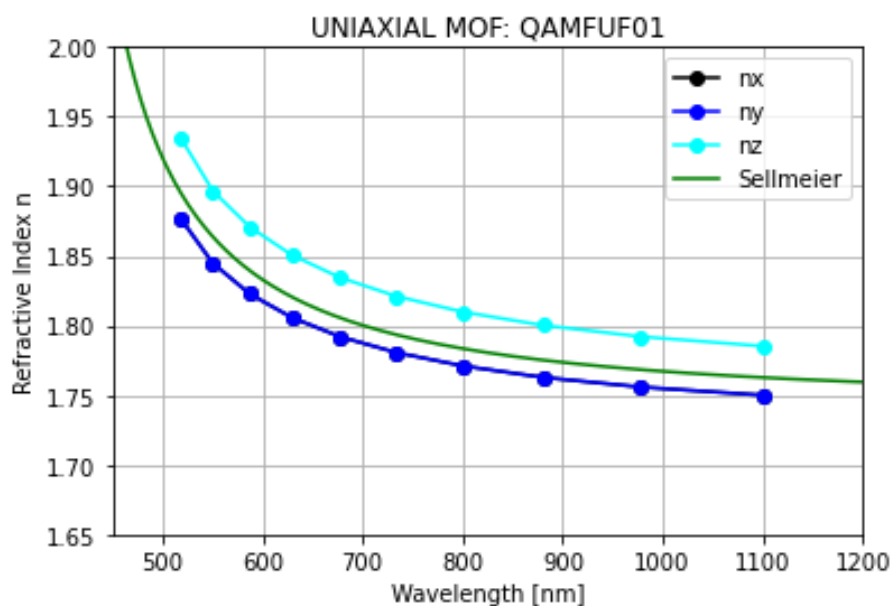
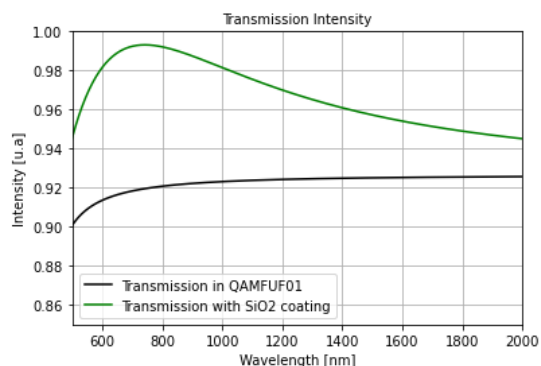
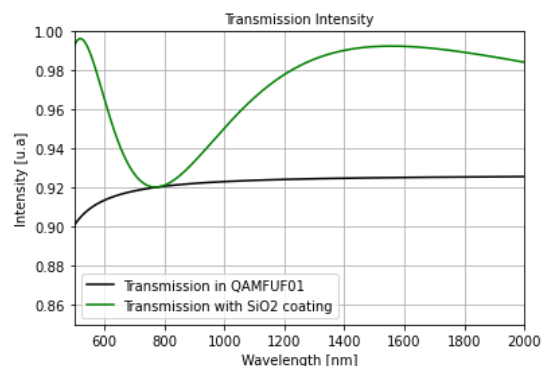


Figura IV.10: Comparación entre el comportamiento del índice de refracción del MOF QAMFUF01 en sus tres ejes versus la interpolación con la Ecuación de Sellmeier aplicada al promedio de los datos.

Y para el análisis de recubrimiento de una capa, obtenemos lo siguiente para el caso del dióxido de silicio.



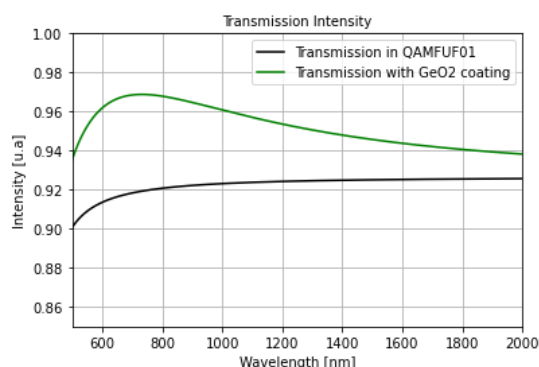
(a) Transmisión con recubrimiento de SiO_2 de 129 nm y peak en 750 nm.



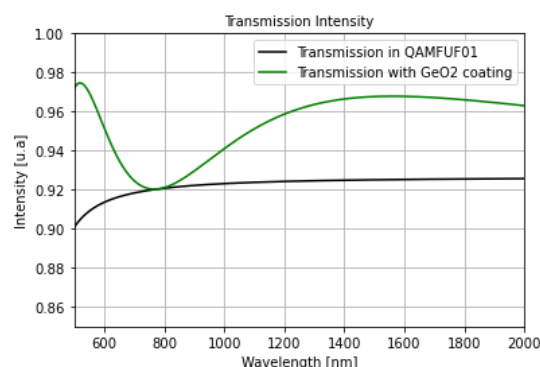
(b) Transmisión con recubrimiento de SiO_2 de 268 nm y peak en 1550 nm.

Figura IV.11: Intensidad de transmisión en función de la longitud de onda sobre QAMFUF. Ambos casos utilizando un recubrimiento antirreflejo monocapa de dióxido de silicio. (a) peak de transmisión a los 750 nm con recubrimiento de 129 nm de espesor. (b) peak de transmisión a los 1550 nm con recubrimiento de 268 nm de espesor.

Se compara la diferencia en la intensidad de la transmisión sobre el QAMFUF01 directo y con recubrimiento antirreflejo de dióxido de silicio para dos espesores diferentes, igualmente buscando peaks en los 750 nm que aumenta la transmisión desde aproximadamente el 92 % al 99 % y en los 1550 nm del 92.5 % al 99 % aproximadamente.



(a) Transmisión con recubrimiento de GeO_2 de 117 nm y peak en 750 nm.



(b) Transmisión con recubrimiento de GeO_2 de 244 nm y peak en 1550 nm.

Figura IV.12: Intensidad de transmisión en función de la longitud de onda sobre QAMFUF01. Ambos casos utilizando un recubrimiento antirreflejo monocapa de dióxido de germanio. (a) peak de transmisión a los 750 nm con recubrimiento de 117 nm de espesor. (b) peak de transmisión a los 1550 nm con recubrimiento de 244 nm de espesor.

Ya habiendo realizado los análisis con los tres MOFs, podemos observar en la Figura IV.12 que en el QAMFUF01 es donde mayor aumento produce el dióxido de germanio en la intensidad de transmisión. Esto es debido a que el QAMFUF01 es el MOF que presentaba una curva de índice de refracción mayor que en los valores del índice de los otros dos MOFs, generándose una mayor diferencia entre los índices de refracción entre recubrimiento y sustrato. El dióxido de germanio produce un aumento en la transmisión llevándolo de un 92 % a un 97 % en los 750 nm y en el caso del peak a los 1550 nm aumenta del 92.5 % al 97 %, manteniéndose en este caso, un aumento en la transmisión mas estable a lo largo del espectro.

IV.3. Recubrimiento antirreflejo de multiples capas

Debido a que el QAMFUF01 es el MOF que presenta la curva de mayores valores en el promedio de su índice de refracción, además, la curva promedio resulta ser una aproximación bastante representativa debido a la proximidad entre los valores del índice n_z en comparación con n_x y n_y y por último, ambos materiales seleccionados como recubrimiento generaron un aumento en la intensidad de la transmisión mayor que en los otros dos casos (7 % para el dióxido de silicio y 5 % para el dióxido de germanio). Es por esto que se ha decidido optar por este material para poder trabajar los modelos de recubrimiento de múltiples capas, y así poder visualizar con mayor facilidad la diferencia entre ellos.

IV.3.1. Modelos propuestos

La idea de diseñar un recubrimiento antirreflejo tiene por objetivo el maximizar la intensidad de la transmisión en el infrarrojo cercano. Inicialmente la idea era trabajar en un rango espectral entre los 750 nm y los 1500 nm, por lo que se buscó trabajar el diseño de dos

maneras. La primera es poder generar peaks en distintas longitudes de onda para producir un aumento en la transmisión a lo largo de todo el espectro de interés, y la segunda es buscar un valor intermedio de λ para el cual al generar un peak se pueda aumentar la transmisión pero alcanzando a contemplar en mayor medida los extremos del intervalo de longitudes de onda. Se extiende este método para generar recubrimientos con tres y cinco capas.

IV.3.2. Recubrimiento de tres capas

La estructura del recubrimiento de tres capas la podemos observar en la Figura IV.13 considerando que la luz incide inicialmente sobre la primera capa de dióxido de silicio y se transmita por esta estructura antes de llegar al QAMFUF01. En la tabla IV.1 podemos observar el valor del espesor de cada capa para cada material, los cuales fueron calculados numéricamente a partir de la ecuación III.1 considerando un espesor de fase de cuarto de onda. Esto para los modelos 1 y 2, cuyos resultados podemos observar en las Figuras IV.14 y IV.15 respectivamente.



Figura IV.13: Estructura del Modelo 1 y 2 del recubrimiento para un caso de tres capas

Modelo	Capa	Material	Espesor (nm)
1	d_1	SiO ₂	155
	d_2	GeO ₂	141
	d_3	SiO ₂	312
2	d_1	SiO ₂	155
	d_2	GeO ₂	141
	d_3	SiO ₂	155

Tabla IV.1: Espesores de cada capa según el material en los modelos 1 y 2 considerados

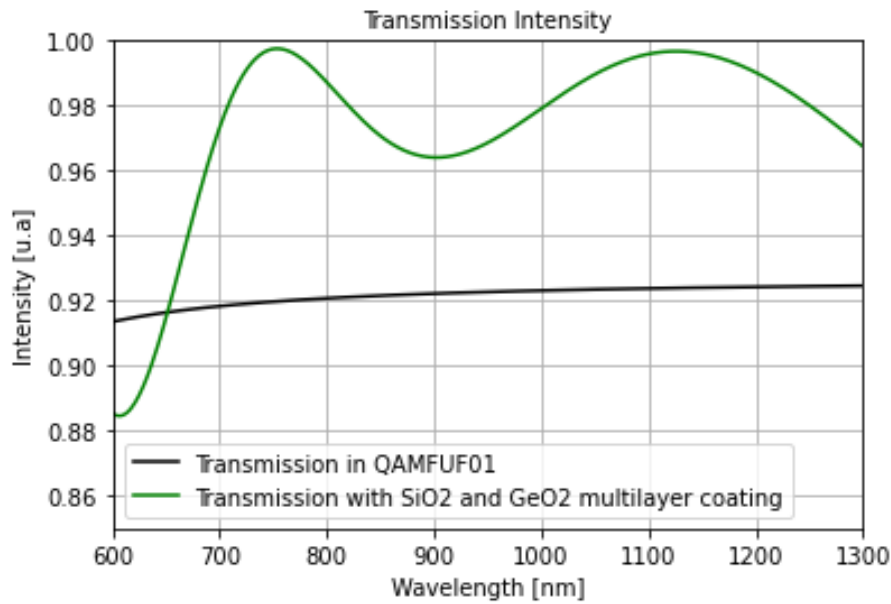


Figura IV.14: Comparación entre las intensidades de transmisión en QAMFUF01 sin recubrimiento y con el recubrimiento del Modelo 1.

En la Figura IV.14 nos encontramos con el resultado del Modelo 1, en donde se puede observar un aumento en la transmisión desde el 92 % a más del 99 % en dos peaks a lo largo del espectro, a los 750 nm y a los 1100 nm aproximadamente, esto es debido a que el espesor de ambas capas de dióxido de silicio son diferentes. En la capa d_1 y d_2 se buscó generar el cuarto de onda a los 900 nm, en d_3 se buscó el cuarto de onda a los 1800 nm. Esto debido a que la intención de este modelo era poder aumentar la transmisión a lo largo de todo el espectro de interés. Aunque este modelo genera un aumento considerable en la transmisión a lo largo de todo el intervalo estudiado, se puede notar un decaimiento en la transmisión alrededor de los 900 nm.

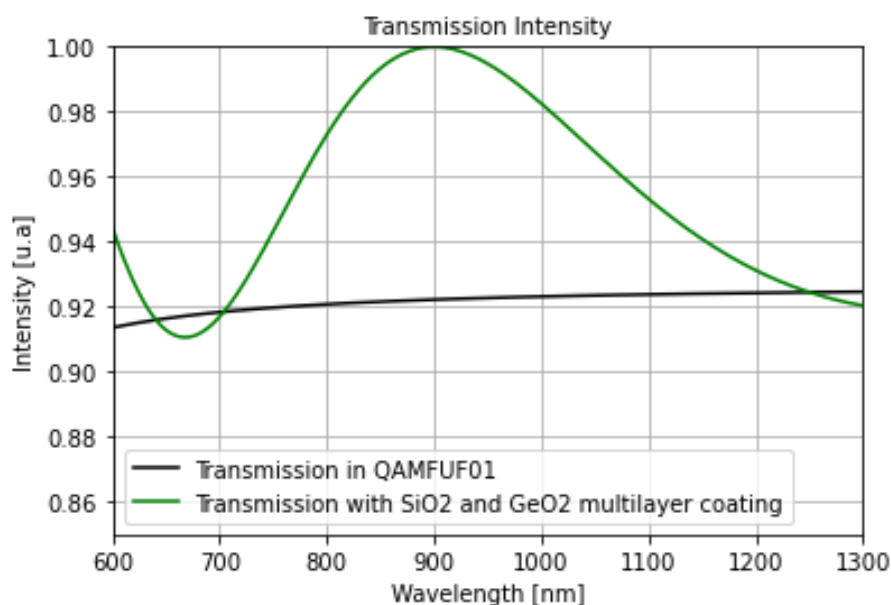


Figura IV.15: Comparación entre las intensidades de transmisión en QAMFUF01 sin recubrimiento y con el recubrimiento del Modelo 2.

En la Figura IV.15 observamos los resultados del Modelo 2. Acá se buscó generar el cuarto de onda para todas las capas a los 900 nm, generando en consecuencia que el único peak de interés se encontrara en esta longitud de onda, alcanzando el 100 % de la transmisión alrededor de dicho valor, pero decayendo rápidamente, dejando gran parte del espectro de interés fuera de este aumento e incluso disminuyendo en los extremos, comparado con la transmisión propia del QAMFUF01.

IV.3.3. Recubrimiento de cinco capas

La estructura del recubrimiento de cinco capas se muestra en la Figura IV.16, donde nuevamente nos encontramos con capas intercaladas entre el dióxido de silicio y dióxido de germanio. En la Tabla IV.2 encontramos el espesor de cada capa según el material, para los Modelos 3 y 4.

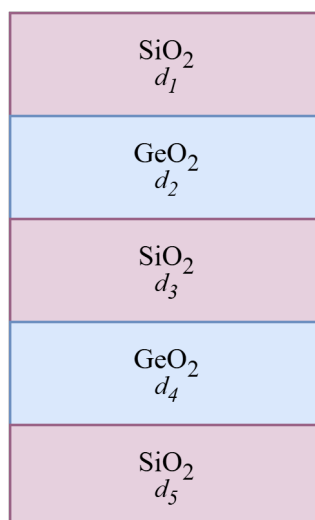


Figura IV.16: Estructura del Modelo 3 y 4 de recubrimiento para un caso de 5 capas

Modelo	Capa	Material	Espesor (nm)
3	d_1	SiO_2	155
	d_2	GeO_2	141
	d_3	SiO_2	155
	d_4	GeO_2	141
	d_5	SiO_2	344
4	d_1	SiO_2	155
	d_2	GeO_2	141
	d_3	SiO_2	155
	d_4	GeO_2	141
	d_5	SiO_2	155

Tabla IV.2: Espesores de cada capa según el material en los modelos 3 y 4 considerados

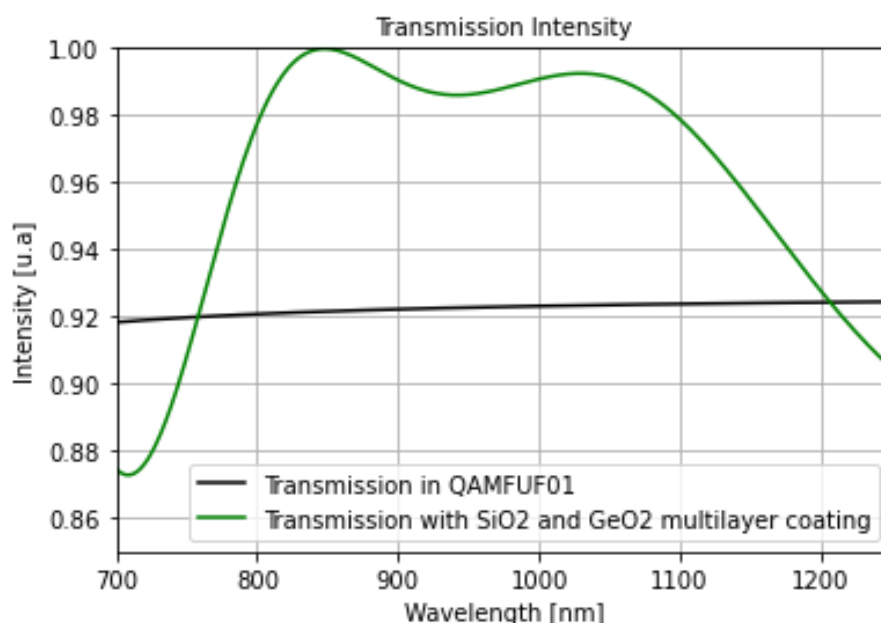


Figura IV.17: Comparación entre las intensidades de transmisión en QAMFUF01 sin recubrimiento y con el recubrimiento del Modelo 3.

En la Figura IV.17 se aprecia el comportamiento de la intensidad de transmisión sobre el QAMFUF01 utilizando el Modelo 3. Se genera un aumento importante de la transmisión, por sobre el 98 % entre los 750 nm y 1100 nm, llegando al 100 % en aproximadamente los 850 nm. Se generaron los espesores d_1 , d_2 , d_3 y d_4 buscando el cuarto de onda a los 900 nm, y para d_5 a los 2000 nm, esto al igual que con el Modelo 1, con la intención de generar un aumento en la transmisión lo mas estable posible a lo largo de todo el espectro de interés.

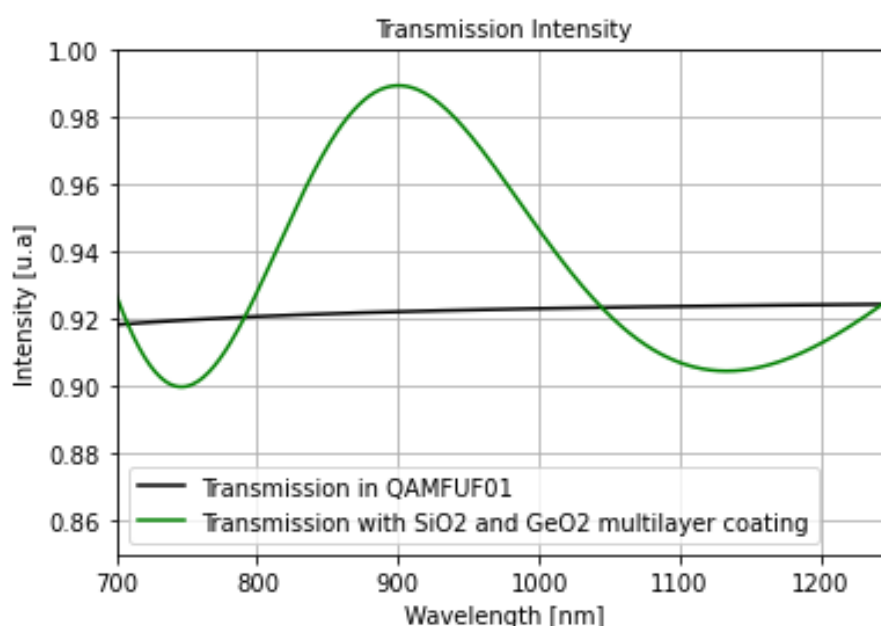


Figura IV.18: Comparación entre las intensidades de transmisión en QAMFUF01 sin recubrimiento y con el recubrimiento del Modelo 4.

En la Figura IV.18 se observa el resultado del Modelo 4, en donde se intenta generar el mismo efecto que con el Modelo 2 al utilizar espesores buscando el cuarto de onda a los 900 nm en todas las capas del modelo. Este modelo logra un peak de transmisión en los 900 nm, alcanzando el 99 %.

IV.3.4. Comparación entre modelos

Por la intención en cuanto a como generar el aumento de la transmisión a la hora de determinar los espesores a partir del cuarto de onda, podemos notar que los modelos 1 y 3 buscan estabilizar el aumento de la intensidad de la transmisión a lo largo del espectro de interés, mientras que los modelos 2 y 4 se centran en generar un solo peak de transmisión.

Para el primer caso, comparando el Modelo 1 y 3, observamos que el Modelo 1 logra aumentar la transmisión contemplando un mayor intervalo del espectro que el Modelo 3, pero el porcentaje que aumenta es menor estable a lo largo del espectro, por lo que la elección del modelo puede basarse en los intereses a la hora de maximizar la transmisión, además de los costos que impliquen implementar el recubrimiento, el cual variará si se utilizan 3 o 5 capas.

Para el segundo caso, comparando el Modelo 2 y 4, el objetivo es el mismo. Generar un peak de transmisión más acotado, por lo que evidentemente convendría optar por el Modelo 2. Primero porque el peak del Modelo 2 permite llegar al 100 % de la transmisión, versus el Modelo 4 que llega aproximadamente al 99 %. Además, generar un recubrimiento de tres capas es menos costoso que uno de cinco capas, por la cantidad del mismo material que se está utilizando.

IV.3.5. Modelo Extra

En el último modelo presentado en la Figura IV.19 se genera la misma idea que en el Modelo 2 y 4 de determinar los espesores al generar un cuarto de onda para un mismo λ en todas las capas, siendo en este caso un peak en los 1550 nm (longitud de onda de interés por su uso en telecomunicaciones). La idea es poder observar el cambio de la intensidad de la transmisión a medida de que se le van agregando capas al recubrimiento (considerando el orden de la estructura de cinco capas observada en la Figura IV.16). Se puede observar claramente, como es que las mejores opciones para este caso de un único peak, son de una sola capa (en este caso de dióxido de silicio) si la intención es aumentar la transmisión en un mayor rango de longitudes de onda, pero si se quisiera centrar solo en un peak, la mejor opción es el modelo de tres capas, como el Modelo 2, ya que nos permite llegar al 100 % de la intensidad de transmisión, produciendo un incremento aproximadamente del 7.5 %. Por último, se observa que todas las configuraciones de recubrimiento coinciden en un mismo valor de reflexión alrededor de 775 nm. Esto ocurre porque la longitud de onda de diseño fue fijada en los 1550 nm, determinando el espesor de las capas con la condición de cuarto de onda. A la mitad de esta longitud de diseño, el espesor óptico para esas mismas capas es de media onda, cuyo espesor de fase es $\delta = \pi$, haciendo que la matriz tome el valor ± 1 III.4 como una matriz de identidad, haciendo que no cambie la admitancia de

entrada, como si las capas fueran "invisibles".

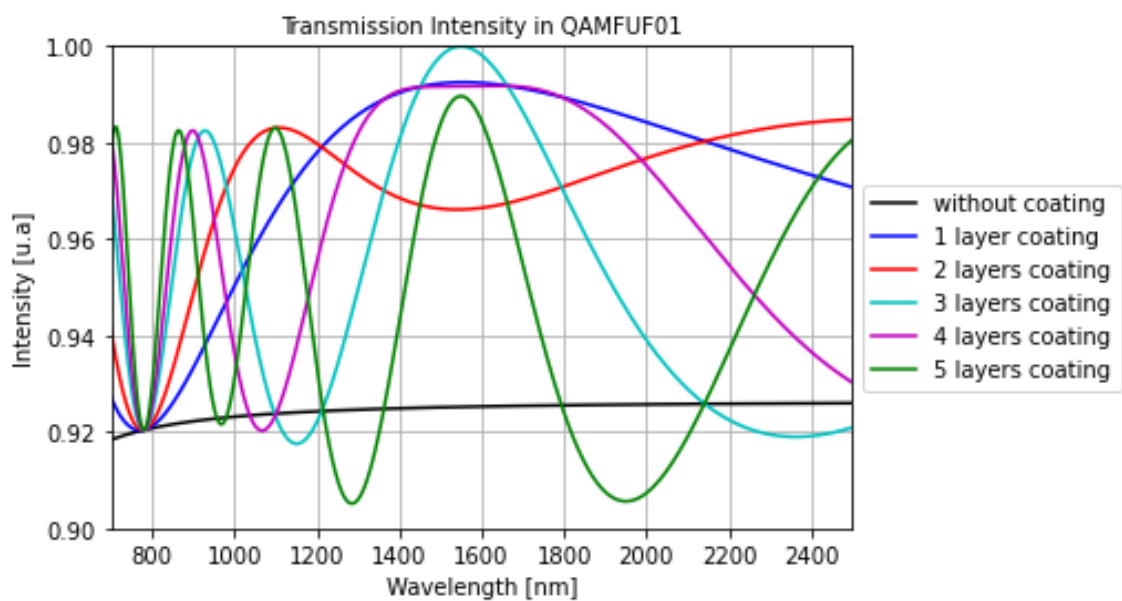


Figura IV.19: Comparación entre las intensidades de transmisión en QAMFUF01 sin recubrimiento y con recubrimiento de uno a cinco capas.

CAPÍTULO V: Análisis

El código desarrollado en Python fue validado exitosamente mediante la comparación con los resultados de la microcavidad estudiada por (Jara Varela, 2018) y con los resultados experimentales reportados en (Cox et al., 1961) sobre un sistema monocapa aire-Si-SiO₂, reproduciendo tanto la tendencia general de la transmisión como la ubicación del máximo en la longitud de onda de diseño. La diferencia en la transmisión obtenida en el sustrato de silicio sin recubrimiento, es atribuida a la aproximación de considerar el sustrato de silicio como semi-infinito, ya que estudiándolo de esa manera no se consideran en la reflectancia total las contribuciones de las reflexiones internas que se producen en la placa gruesa (oscilaciones de Fabry-Pérot), enfocando el análisis solo al efecto del recubrimiento. Esta comparación entre los resultados sobre la estructura con recubrimiento de una capa permite validar la eficiencia de la implementación del método de matrices de transferencia, dando pie a su aplicación sobre los materiales de interés de este trabajo que son los MOFs.

En el caso de los MOFs uniaxiales estudiados, se optó por trabajar con aquellos que cuyas curvas del promedio del índice de refracción entregaran valores mas altos (QAMFUF y BEKVOD) y así poder ampliar la elección de materiales candidatos como recubrimientos antirreflejo. De igual manera se analizó el comportamiento de la transmisión en MIRO101 al ser un MOF de interés por los estudios recientes realizados con el en (Hidalgo-Rojas et al., 2023). El análisis comparativo mostró que QAMFUF01 presenta la mayor ganancia en transmisión al aplicar recubrimientos de óxidos, alcanzando incrementos de hasta un 7 % en configuraciones monocapa. Es por esto que fue escogido para extender su uso al estudio de recubrimientos de estructura multicapa. Asimismo, se identificó por las curvas de transmisión que el dióxido de silicio, por su menor índice y consolidado uso en óptica, resulta más efectivo que el dióxido de germanio, confirmando la condición de la relación entre los índices de refracción del sustrato y el recubrimiento a partir de la condición de cuarto de onda.

En cuanto a los diseños de estructura multicapa, se estudió la diferencia entre configuraciones que buscan estabilizar la intensidad de transmisión en un rango amplio de longitudes de onda (Modelos 1 y 3) y otras configuraciones que buscan concentrar el máximo de transmisión en una longitud de onda específica (Modelos 2 y 4). Los primeros se determinaron mediante ensayo y error, variando las longitudes de diseño para cada capa, por lo que estos diseños entregan una respuesta más robusta en todo el espectro, mientras que los segundos se determinaron a una misma longitud de onda de diseño en cada capa, alcanzando en el caso del Modelo 2 una transmisión que llega al 100 % en la longitud de onda de diseño. Estos resultados entregan flexibilidad en el diseño que otorga el uso de capas múltiples, permitiendo balancear estabilidad espectral y maximización puntual según el interés de la aplicación. Finalmente, se identificó en el Modelo extra de la Figura IV.19 un punto común en torno a 775 nm donde todas las configuraciones convergen. Esto debido a que corresponde a la mitad de la longitud de onda de

diseño, por lo que en este caso, el espesor de las capas produce un desfase de π , haciendo que la matriz funcione como una matriz identidad, y por lo tanto, que la presencia de las capas no influya en la transmisión, como si fuese una capa invisible para esa longitud de onda.

Conclusión

Desarrollar este trabajo permitió la implementación del método de matrices de transferencia de manera numérica, tal que fue posible diseñar los parámetros de recubrimientos antirreflejo, reproduciendo resultados experimentales de la literatura al obtener reflectancia nula a determinada longitud de diseño, siendo estos resultados una validación del método. Esta reproducción de resultados nos permitió extender el método para así estudiar la reflectancia y transmitancia directamente en MOFs como sustratos, ya que resultan ser de gran interés al tratarse de materiales ópticos no lineales. Si bien los MOFs estudiados por si solos muestran una intensidad de transmisión que supera el 90 % , los resultados mostraron que es posible incrementar la transmitancia tanto en configuraciones monocapa como multicapa, llegando a aumentar en un 100 % la transmitancia en algunos casos. Todo esto va a depender del objetivo del recubrimiento, ya sea si se busca optimizar un rango amplio del espectro o focalizarse en una longitud de onda específica. Se comprobó que los diseños multicapa ofrecen un mejor resultado minimizando pérdidas por reflectancia, con la libertad de variar parámetros del diseño según lo que se desee obtener, mientras que los recubrimientos de una sola capa presentan una solución simple pero menos efectiva.

Buscando proyectar el estudio, se propone ampliar el rango de materiales evaluados, partiendo por ejemplo con los polímeros y vidrios que se compararon inicialmente, para luego extender otras posibilidades en donde se cumpla mejor la condición de relación entre el índice de refracción del recubrimiento y el del sustrato. Además se pueden estudiar modelos con mezclas de clases de materiales, no solo óxidos o polímeros o vidrios. Otra opción es considerar la anisotropía de los MOFs en el modelado y llevar a cabo estudios experimentales, que validen las predicciones numéricas reportadas. Poder concretar estas etapas permitirán determinar si se puede llevar a cabo la implementación práctica de recubrimientos antirreflejo sobre MOFs, y así mejorar la eficiencia de estos materiales ópticos en nuevas aplicaciones.

Bibliografía

- Cambridge Crystallographic Data Centre. (2025). *Structure: MIRO-101 (CCDC code: OHOROS)* [Accedido: 4 de octubre de 2025]. <https://www.ccdc.cam.ac.uk/structures/Search?Ccdcid=OHOROS&DatabaseToSearch=Published>
- Cox, J. T., Hass, G., & Jacobus, G. F. (1961). Infrared Filters of Antireflected Si, Ge, InAs, and InSb*. *Journal of the Optical Society of America*, 51(7), 714-718. <https://doi.org/10.1364/JOSA.51.000714>
- Edmund Optics. (2024). *Anti-Reflection Coatings* [Accessed: 2025-10-02]. <https://www.edmundoptics.com/knowledge-center/application-notes/lasers/anti-reflection-coatings/?srsltid=AfmBOooFRwfb38pGaHqC7X1TMQcSghB4HTGlqrQt5JMXXI-cDD7iQ7hh>
- Franta, J., Ohlídal, I., & Ohlídal, M. (2019). Optical properties of crystalline silicon: temperature dependence. *Journal of Applied Physics*, 125(6), 065702. <https://doi.org/10.1063/1.5064072>
- Gutiérrez Martínez, M. A., Reyes Osorio, L. A., Bermúdez-Reyes, B., Guerra-Fuentes, L., & Zambrano Robledo, P. C. (2019). Recubrimientos nanoestructurados SiO₂-TiO₂ en aleaciones de aluminio 6061-T6. *Revista Ciencia UANL*, 22(96), 48-55. <https://doi.org/10.29105/cienciauanl22.96-3>
- Hass, G., & Ramsey, J. B. (1956). Reflectance and Transmittance of Coated Infrared Transmitting Materials. *Journal of the Optical Society of America*, 46(1), 31-36. <https://doi.org/10.1364/JOSA.46.000031>
- Hidalgo-Rojas, D., García-Garfido, J., Enríquez, J., Rojas-Aedo, R., Wheatley, R. A., Fritz, R. A., Singh, D. P., Herrera, F., & Seifert, B. (2023). Phase-Coherent Optical Frequency Up-Conversion with Millimeter-Size Zn(3-ptz)₂ Metal-Organic Framework Single Crystals. *Advanced Optical Materials*, 11(15), 2300142. <https://doi.org/10.1002/adom.202300142>
- Jara Varela, I. A. (2018). *Simulación computacional de la eficiencia óptica de estructuras OLED* [Tesis de pregrado]. Universidad de Santiago de Chile, Facultad de Ciencia, Departamento de Física [Licencia Creative Commons Atribución 3.0 Chile]. <https://fherreralab.com/assets/resources/thesis-ijara.pdf>
- Ji, C., Zhao, Y., Zhang, L., & Yang, H. (2022). Recent Applications of Antireflection Coatings in Solar Cells. *Photonics*, 9(12), 906. <https://doi.org/10.3390/photonics9120906>
- Li, F., & Yang, Z. (2025). Recent Advances in MOF Coatings on Electrodes, Polymers, and Glass Surfaces. *Nanomaterials*, 15(15), 1187. <https://doi.org/10.3390/nano15151187>
- Macleod, H. A. (2010). *Thin-Film Optical Filters* (4.^a ed.). CRC Press.
- Meng, J., Yang, S., Kaspar, R. J., Zhang, W., Gu, J., Xu, S., Xu, H., Wang, H., Wang, X., Liu, J., & Zhong, C. (2020). MOF coatings: synthesis strategies, properties, and multifunctional

- applications. *Chemical Society Reviews*, 49(11), 3142-3186. <https://doi.org/10.1039/C9CS00806C>
- Polyanskiy, M. N. (2025). RefractiveIndex.INFO — Refractive index database [Accedido el 27 de septiembre de 2025].
- Raj, S., Paiva, S., Fritz, R. A., Herrera, F., & Colón, Y. J. (2024). First-principles screening of metal–organic frameworks for entangled photon pair generation [Open access]. *Materials for Quantum Technology*, 4(1), 015404. <https://doi.org/10.1088/2633-4356/ad2c96>
- Raut, H. K., Ganesh, V. A., Nair, A. S., & Ramakrishna, S. (2011). Anti-Reflective Coatings: A Critical, In-Depth Review. *Energy & Environmental Science*, 4(10), 3779-3804. <https://doi.org/10.1039/C1EE01297E>
- Wikipedia contributors. (2025). *Anti-reflective coating* [Accedido: 2 de octubre de 2025]. https://en.wikipedia.org/wiki/Anti-reflective_coating