



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO**  
PROGRAMA DE MAESTRÍA Y DOCTORADO EN INGENIERÍA  
ELÉCTRICA - INSTRUMENTACIÓN

REFLEXIÓN Y TRANSMISIÓN DE LUZ COHERENTE POR UNA MONOCAPA  
ALEATORIA DE PARTÍCULAS POLIDISPERSAS SOPORTADAS POR UNA  
SUPERFICIE PLANA

T E S I S  
QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:  
MAESTRO EN INGENIERÍA

PRESENTA:  
OMAR WILFRIDO VÁZQUEZ ESTRADA

TUTOR PRINCIPAL  
DR. AUGUSTO GARCÍA VALENZUELA  
CENTRO DE CIENCIAS APLICADAS Y DESARROLLO TECNOLÓGICO CCADET

MÉXICO, D.F. JUNIO 2013



Universidad Nacional  
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

**Biblioteca Central**



**UNAM – Dirección General de Bibliotecas**  
**Tesis Digitales**  
**Restricciones de uso**

**DERECHOS RESERVADOS ©**  
**PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL**

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

## **JURADO ASIGNADO**

Presidente: DR. BRUCE DAVIDSON NEIL CHARLES

Secretario: DRA. MONTIEL SÁNCHEZ MARÍA HERLINDA

Vocal: DR. GARCÍA VALENZUELA AUGUSTO

1<sup>er</sup> suplente: DRA. SANCHEZ PÉREZ CELIA ANGELINA

2<sup>do</sup> suplente: DR. HERNÁNDEZ CORDERO JUAN ARNALDO

Lugar donde se realizó la tesis: CENTRO DE CIENCIAS APLICADAS Y  
DESARROLLO TECNOLÓGICO CCADET UNAM

## **TUTOR DE TESIS**

DR. GARCÍA VALENZUELA AUGUSTO

*Con cariño a todos mis hermanos ...*

# Índice general

Índice general	II
Índice de figuras	IV
Agradecimientos	v
Resumen	VII
<b>1. Introducción</b>	<b>1</b>
1.1. Motivación del estudio . . . . .	1
1.2. Objetivos y metas . . . . .	7
1.3. Aportaciones . . . . .	8
1.4. Contenido . . . . .	10
<b>2. Fundamentos y antecedentes</b>	<b>13</b>
2.1. Ecuaciones de Maxwell . . . . .	13
2.2. Campo eléctrico dinámico promedio alrededor de una molécula . . . . .	17
2.3. Teoría de Mie . . . . .	23
2.3.1. Índice de refracción relativo y parámetro de tamaño . . . . .	26
<b>3. Modelo teórico</b>	<b>29</b>
3.1. Reflexión y transmisión de ondas planas . . . . .	29
3.2. Modelo teórico para el caso monodisperso . . . . .	40
3.3. Modelo teórico para el caso polidisperso . . . . .	43
3.4. Monocapa soportada por una interfase plana . . . . .	50
<b>4. Preparación de muestras y arreglos experimentales</b>	<b>57</b>
4.1. Técnica <i>dip coating</i> . . . . .	57
4.2. Procedimiento experimental para el depósito de monocapas . . . . .	62
4.3. Arreglos experimentales para medir reflectancia y transmitancia . . . . .	64
4.4. Montaje experimental para medir el espectro de transmitancia . . . . .	69

<b>5. Resultados experimentales</b>	<b>75</b>
5.1. Resultados experimentales para la monocapa de alúmina . . . . .	75
5.2. Resultados experimentales para la monocapa de titania . . . . .	83
5.3. Análisis de los resultados experimentales . . . . .	88
<b>6. Discusión y conclusiones</b>	<b>93</b>
6.1. Discusión de la superficie de cubierta $\Theta$ , con una aplicación . . . . .	93
6.2. Resumen y conclusiones generales . . . . .	99
<b>A. Dispersión de luz de pequeñas partículas</b>	<b>101</b>
A.1. Subrutina 1. Coeficientes de dispersión $S_1(\theta)$ y $S_2(\theta)$ . . . . .	103
A.2. Subrutina 2. Amplitudes complejas del campo dispersado . . . . .	103
A.3. Subrutina 3. Funciones angulares de Mie $\pi_n$ y $\tau_n$ . . . . .	104
<b>B. Análisis teórico-experimental (casos monodisperso y polidisperso)</b>	<b>107</b>
B.1. Subrutina 4. Funciones integrales: $\beta_F$ , $\beta_B$ y $\beta_C$ . . . . .	113
B.2. Subrutina 5. Función para la distribución de tamaños $n(a)$ . . . . .	115
<b>C. Espectro de transmitancia</b>	<b>117</b>
<b>Bibliografía</b>	<b>128</b>

# Índice de figuras

1.1.	Configuración por reflexión interna . . . . .	2
1.2.	Resultados experimentales para el modelo teórico CSM . . . . .	5
2.1.	Plano de esparcimiento en la teoría de Mie . . . . .	24
2.2.	Esparcimiento por una esfera . . . . .	27
3.1.	Condiciones de frontera para las componentes normales de $\vec{H}$ y $\vec{E}$ . . . . .	32
3.2.	Condiciones de frontera para las componentes tangenciales de $\vec{H}$ y $\vec{E}$ . . . . .	33
3.3.	Coefficientes de Fresnel para una interfase plana simple . . . . .	34
3.4.	Coefficientes de Fresnel para un material de espesor $d$ . . . . .	38
3.5.	Monocapa de partículas monodispersas depositada sobre un sustrato plano . . . . .	41
3.6.	Monocapa monodispersa absorbida en un medio . . . . .	42
3.7.	Monocapa independiente y aislada de partículas polidispersas . . . . .	43
3.8.	Monocapa de partículas polidispersas depositada sobre un sustrato plano . . . . .	48
3.9.	Esquema del múltiple esparcimiento de un haz . . . . .	51
4.1.	Etapas del proceso <i>dip coating</i> . . . . .	59
4.2.	<i>Potencial de Stern.</i> . . . . .	60
4.3.	Depósito de monocapas . . . . .	63
4.4.	Esquema del arreglo experimental para medir la reflectancia . . . . .	65
4.5.	Fotografía del montaje experimental para medir la reflectancia . . . . .	65
4.6.	Circuito para un amplificador de transimpedancia . . . . .	66
4.7.	Esquema del arreglo experimental para medir la transmitancia . . . . .	67
4.8.	Fotografía del montaje experimental para medir la transmitancia . . . . .	68
4.9.	Componente coherente y componente difusa . . . . .	69
4.10.	Esquema interno de un espectrofotómetro con rejilla de difracción . . . . .	70
4.11.	Espectro de emisión del fotodiodo <i>LED XR-C</i> . . . . .	72
4.12.	Arreglo experimental empleado para medir el espectro de transmitancia . . . . .	73
4.13.	Fotografía del montaje experimental para medir el espectro de transmitancia . . . . .	74
5.1.	Curvas de reflectancia y transmitancia para un portaobjetos . . . . .	77
5.2.	Reflectancia coherente de la muestra <i>AluM1</i> . . . . .	79
5.3.	Transmitancia coherente de la muestra <i>AluM1</i> . . . . .	79
5.4.	Reflectancia coherente de la muestra <i>AluM2</i> . . . . .	80

5.5.	Transmitancia coherente de la muestra <i>AluM2</i> . . . . .	80
5.6.	Reflectancia coherente de la muestra <i>AluM3</i> . . . . .	81
5.7.	Transmitancia coherente de la muestra <i>AluM3</i> . . . . .	81
5.8.	Espectro de transmitancia de la muestra <i>AluM1</i> . . . . .	82
5.9.	Espectro de reflectancia teórico de la muestra <i>AluM1</i> . . . . .	82
5.10.	Reflectancia coherente de la muestra <i>TitM1</i> . . . . .	84
5.11.	Transmitancia coherente de la muestra <i>TitM1</i> . . . . .	84
5.12.	Reflectancia coherente de la muestra <i>TitM2</i> . . . . .	85
5.13.	Transmitancia coherente de la muestra <i>TitM2</i> . . . . .	85
5.14.	Reflectancia coherente de la muestra <i>TitM3</i> . . . . .	86
5.15.	Transmitancia coherente de la muestra <i>TitM3</i> . . . . .	86
5.16.	Espectro de transmitancia de la muestra <i>TitM2</i> . . . . .	87
5.17.	Espectro de reflectancia teórico de la muestra <i>TitM2</i> . . . . .	87
5.18.	Distribución de tamaños para las partículas de alúmina y titania . . . . .	90
5.19.	Curvas de reflectancia y transmitancia para una monocapa de alúmina aislada	91
5.20.	Curvas de reflectancia y transmitancia para una monocapa de titania aislada	91
6.1.	Esquema de partículas depositadas sobre una superficie blanca . . . . .	94
6.2.	Esquema de partículas amorfas depositadas sobre una superficie blanca . . . . .	95
6.3.	Micrografías de las monocapas de partículas de alúmina y titania . . . . .	98

# Agradecimientos

Al finalizar un arduo trabajo que se encontró lleno de vicisitudes, me doy cuenta de los frutos obtenidos después de esta labor, que ha formado parte importante en mi vida personal y profesional, pues con ello he acrecentado mi acervo de conocimientos y me he percatado del amplio sendero que me queda aún por recorrer. Doy gracias a Dios, pues día a día me brinda un poco más de sapiencia y la oportunidad de seguir explorando el vasto universo que ha generado para nosotros, generando una premisa perenne para comprender la naturaleza. Pero he de agradecer también que en mi sendero ha colocado a personas inigualables, que me han apoyado en todo momento a llegar hasta este punto. Agradezco a mi madre, pues ella ha sido piedra angular en mi vida, me ha brindado la oportunidad de formarme y desarrollarme profesionalmente, ha reflejado en mi el ímpetu y determinación para buscar y lograr todos mis objetivos sin dejar de lado la humanidad y el respeto. A mis hermanos y amigos por su apoyo incondicional y moral durante mi proyecto de maestría. A mis profesores doy gracias por su apoyo que se me dio en la elaboración de este trabajo. Y a tantas personas que no he podido mencionar aquí que han contribuido en mi formación. A todos ellos muchas gracias.

Por último, y no menos importante quiero agradecer a dos instituciones que me han brindado su apoyo para poder culminar este trabajo. A , mi querida universidad, la UNAM, que a través del CCADET me proporcionó la infraestructura y los medios materiales para realizar la investigación presentada en este trabajo; y al CONACyT por su apoyo económico a través de la beca para la maestría.



# Resumen

Hoy en día existen muchos trabajos dedicados al estudio teórico y experimental de la reflectividad óptica en monocapas de partículas muy pequeñas desordenadas. Comúnmente la aproximación de un medio efectivo se emplea para describir este tipo de sistemas. En este caso la monocapa de partículas es reemplazada por una “película artificial” de espesor equivalente al diámetro de las partículas, de donde se deduce un índice de refracción efectivo, o bien, una permitividad efectiva, o una susceptibilidad superficial equivalente para la película. Sin embargo, cuando las partículas de la monocapa no son lo suficientemente pequeñas y el esparcimiento de esta sistema empieza a ser importante, la aproximación del medio efectivo falla y una alternativa adecuada a esto es el desarrollo de modelos de esparcimiento coherente. De aquí la motivación de este trabajo, pues hay muy pocos estudios dedicados a describir la reflexión de luz coherente en monocapas de partículas “grandes” depositadas sobre algún sustrato plano, y menos aún para la transmisión de luz coherente en este tipo de sistemas. Por partículas grandes se quiere decir, partículas cuyo tamaño es comparable o mayor a la longitud de onda incidente. El objetivo principal de este trabajo es comparar con datos experimentales el modelo óptico de reflexión y transmisión coherente de luz en monocapas aleatorias de partículas soportadas por un sustrato plano desarrollado recientemente en [1]. Se eligieron dos tipos de partículas altamente esparcidoras de luz para este trabajo de investigación: 1) partículas de alúmina de radio de  $1.5\mu m$  y, 2) partículas de dióxido de titanio con un radio promedio de  $220nm$ . Ambos tipos de partículas son polidispersas y esferoidales, las cuales se depositaron, respectivamente, en un sustrato de vidrio de espesor de  $1mm$ . Para poder comparar teoría con experimento se generalizó el modelo mencionado previamente, el cual contempla la reflexión y transmisión de luz coherente desde monocapas de partículas monodispersas, al caso general de monocapas constituidas por partículas polidispersas. El depósito de las monocapas sobre una superficie de vidrio plana se llevó a cabo usando la técnica *dip coating*, la cual se describe en este trabajo junto con el procedimiento experimental realizado; facilitando así, la reproducibilidad del experimento en otros laboratorios. Dentro del ajuste teórico-experimental, se supuso que las partículas que constituyen, respectivamente a cada monocapa, poseen una distribución de tamaños *log-normal*, una forma esférica, y una baja densidad de partículas depositadas sobre la superficie del sustrato. De donde se concluye un ajuste muy bueno entre el modelo teórico y los datos experimentales. Finalmente, en este trabajo se presentan los espectros de transmitancia experimentales de dos de las muestras preparadas, a incidencia normal, y su comparación con el modelo teórico respectivo.



# Capítulo 1

## Introducción

*La naturaleza ha tomado conciencia de sí misma a través del hombre y su luz es la revelación de ésta con él.*

El objetivo de este apartado es el de presentar las motivación del estudio, los objetivos y metas contempladas para realizar el trabajo teórico-experimental, junto con las aportaciones que se generan en este estudio; además de incluir en detalle el contenido principal correspondiente a cada capítulo de este documento.

### 1.1. Motivación del estudio

El avance de la instrumentación se debe en gran parte al avance científico que existe hoy en día, si bien es cierto que el diseño de dispositivos puede darse desde el punto de vista tecnológico, también se puede tomar el camino de estudiar la ciencia básica que hay de fondo para el diseño específico de un instrumento o sensor que nos permita estimar o medir las variables de un entorno en particular, o general, al que se desea estudiar. Desde este punto de partida, la labor que implica esto es mucho mayor. Sin embargo, contar con la ciencia básica, un modelo teórico, y un arreglo experimental nos otorga las herramientas necesarias para el diseño adecuado de nuestro dispositivo, pues de esta manera lo tenemos totalmente caracterizado. En este trabajo retomamos el estudio de monocapas con partículas grandes soportadas por un sustrato plano, y nos enfocamos a estudiarlas desde un punto de vista teórico y experimental, que sería la primera etapa contemplada para este trabajo. De manera concisa y breve, existen muy pocos modelos referentes al estudio de monocapas de partículas grandes soportadas por una superficie plana, de aquí la importancia de estudiar estos sistemas, y enfocar los modelos a una parte experimental y a una parte aplicada como es el área de sensores. Una vez que se realice la comprobación del experimento con la teoría nos encaminaremos a la segunda etapa correspondiente a su aplicación directa en el área de sensores ópticos.

En la actualidad hay una gran variedad de publicaciones referentes al estudio teórico de la reflectancia y transmitancia óptica de monocapas depositadas sobre algún tipo de sustrato o bien, embebidas en un medio transparente, esto para monocapas de partículas esféricas

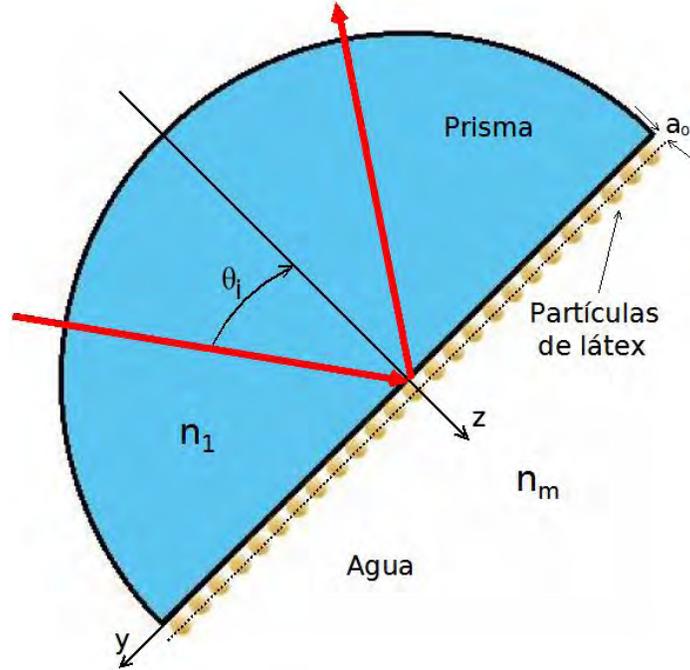


Figura 1.1: Geometría de la configuración por reflexión interna para medir la reflectancia de una monocapa de partículas de látex absorbida por la superficie plana de un prisma.

cuyo tamaño, radio de partícula- $a_0$ , es mucho menor a la longitud de onda incidente- $\lambda$  y con fracciones de cubierta pequeñas,  $\Theta$ , depositadas sobre la superficie del sustrato. En la práctica, las partículas de una monocapa son usualmente colocadas y localizadas al azar sobre la superficie de un sustrato plano transparente [2–14]. En estos trabajos el sistema físico se describe a partir de considerar a las partículas, que forman parte de la monocapa, como dipolos (o multipolos), utilizando además, la aproximación de un medio efectivo aproximado (MME). Pero cuando las partículas de la monocapa no son tan pequeñas, la aproximación del medio efectivo requiere de una extensión [7–9].

Sin embargo, cuando las partículas son comparables a la longitud de onda incidente, o más grandes que ésta,<sup>1</sup> la luz reflejada por la monocapa se dispersa fuera de la dirección especular, por lo que haz reflejado se puede dividir en una componente difusa y una componente coherente.<sup>2</sup> No obstante, no es difícil extraer la componente coherente de la luz esparcida por una monocapa, de ahí la importancia de poder estudiarlas por métodos ópticos tradicionales, véase sección 4.3. Dentro de este caso, en el que las partículas no son lo suficientemente pequeñas, la teoría del medio efectivo es poco eficaz y se recurre, por tanto, a la teoría de

<sup>1</sup>Por partículas grandes se quiere decir aquellas cuyo radio- $a_0$  es tal que el parámetro de tamaño,  $x = 2\pi a_0/\lambda$ , es comparable o mayor a 1.

<sup>2</sup>La componente coherente corresponde al promedio de los campos eléctricos que permanecen en la dirección especular, mientras que la componente difusa está relacionada con el promedio de las fluctuaciones del campo eléctrico que es esparcido en múltiples direcciones.

múltiple esparcimiento,<sup>3</sup> [16–18]. En la teoría de múltiple esparcimiento, para describir la reflexión y transmisión de luz coherente desde una monocapa de partículas soportada por una superficie plana, existen diferentes niveles de aproximación a emplear [19–26]. Por ejemplo, se puede usar la aproximación de esparcimiento simple (SS) o soluciones numéricas dentro de las llamadas aproximaciones cuasi-cristalinas (QCA).<sup>4</sup> No obstante, las soluciones numéricas requieren de un buen equipo de cómputo, consumen mucho tiempo y proporcionan poca información física del sistema.

Recientemente se publicó un artículo Ref. [26], en el que se planteó un modelo heurístico (HM) con relativa simplicidad y de una manera más general al modelo de esparcimiento simple (SS), en el que se plantea el estudio teórico-experimental de la reflexión de luz coherente de una monocapa de partículas de látex absorbidas por la superficie plana de un semicilindro de vidrio, utilizando la configuración de reflexión interna para una interfase vidrio-agua, Fig. 1.1. De aquí nos surge inicialmente la motivación el poder estudiar, de manera teórica y experimental, la reflexión y transmisión de luz coherente en monocapas depositadas sobre sustratos planos. Pues el montaje experimental es relativamente sencillo y la parte teórica es altamente escalable. Describiré brevemente la información que se incluye en este trabajo, para dar de manera concisa, la viabilidad de poder estudiar estos sistemas con monocapas de partículas polidispersas. Para el desarrollo del modelo teórico descrito en este artículo, Ref. [26], se han considerado los efectos de múltiple esparcimiento entre las partículas que conforman la monocapa y el sustrato mismo, considerando además que en el proceso de dispersión el campo dirigido está determinado principalmente por la onda transmitida más que la propia onda incidente (nombrado Modelo de Esparcimiento Coherente-CSM), de donde se obtienen los siguientes coeficientes de reflexión y transmisión para la onda coherente

$$t_s = \frac{\cos \theta_i}{\cos \theta_i + \alpha S(0)}, \quad (1.1)$$

$$r_s = -\frac{\alpha S_n(\pi - 2\theta_i)}{\cos \theta_i + \alpha S(0)}. \quad (1.2)$$

donde  $\alpha = kd(3f/2x^3)$ ,  $d$  es el espesor del sustrato,  $n$  toma el valor de 1 o 2 para polarización  $TE$  o  $TM$ ,  $S_1(\theta)$  y  $S_2(\theta)$  son los elementos de amplitud para la matriz de esparcimiento [27],  $S_1(\theta = 0) = S_2(\theta = 0) = S(0)$ ,  $f$  es la fracción de volumen ocupada por las esferas,  $\theta_i$  es el ángulo de incidencia,  $k$  es el número de onda del medio que rodea a las esferas y  $x = ka_o$ , es el parámetro de tamaño, donde  $a_o$  corresponde al radio de las partículas. De una manera simplificada podemos escribir a la variable  $\alpha$  como

$$\alpha = \frac{2\Theta}{x^2}, \quad (1.3)$$

donde  $\Theta$  corresponde a la superficie de cubierta (en porcentaje). Las expresiones 1.1 y 1.2 son válidas para cualquier ángulo de incidencia, siempre que la superficie de cubierta sea

---

<sup>3</sup>Una presentación completa y extensa de la teoría de múltiple esparcimiento para ondas electromagnéticas a través de sistemas aleatorios de esparcimiento discreto se puede hallar en la siguiente Ref. [15].

<sup>4</sup>Siglas en inglés de single-scattering (SS) y quasi-crystalline approximation (QCA).

pequeña, esto es,  $\Theta \ll 1$ . Si se asume que el plano de la monocapa está en  $z = z_o$ , el coeficiente de reflexión debe ser multiplicado por un factor fase,  $e^{2ik_z^i z_o}$ , es decir

$$r_s = -\frac{\alpha S_n(\pi - 2\theta_i)}{\cos \theta_i + \alpha S(0)} e^{2ik_z^i z_o}, \quad \text{con } k_z^i = k \cos \theta_i. \quad (1.4)$$

En esta publicación, se toma en cuenta que la base del prisma, con índice de refracción  $n_1$ , coincide con el plano en  $z = 0$ , y éste se encuentra inmerso en un medio<sup>5</sup> con índice de refracción  $n_m$ . La monocapa de partículas esféricas, todas de radio  $a_o$ , son absorbidas en la base del prisma, véase Ref. [28], como se muestra en la Fig. 1.1. El plano de la monocapa está ahora en  $z = a_o$ . Si se hace incidir una onda plana monocromática desde el lado del prisma semicilíndrico hasta llegar a la interfase plana (con la monocapa), con un ángulo de incidencia  $\theta_i$  (respecto a la normal); una onda plana será transmitida fuera del prisma hasta la matriz que rodea la monocapa, a un ángulo  $\theta_m$ . Los dos ángulos,  $\theta_i$  y  $\theta_m$ , están relacionados por la ley de Snell. La onda transmitida es reflejada hacia adelante y hacia atrás, entre la monocapa y la base del prisma, por lo que la onda coherente reflejada desde la base del prisma contiene la superposición de todas las ondas coherentes reflejadas desde la monocapa y son transmitidas hacia el interior del prisma. Esto es análogo a las múltiples reflexiones de un sustrato plano homogéneo entre dos medios homogéneos (aire y agua, por ejemplo). El coeficiente de reflexión resultante para esta onda coherente es entonces:

$$r_{CSM} = \frac{r_{12}(\theta_i) + r_s(\theta_m)}{1 + r_{12}(\theta_i)r_s(\theta_m)}, \quad (1.5)$$

donde  $r_{12}$  es el coeficiente de reflexión de Fresnel entre el prisma y el medio matriz (sin partículas), y  $r_s$  está dado por:

$$r_s(\theta_m) = -\frac{\alpha S_n(\pi - 2\theta_m)}{\cos \theta_m + \alpha S(0)} e^{2ik_z^m a_o}, \quad \text{con } k_z^m = k \cos \theta_m, \quad (1.6)$$

o bien,  $k_z^m = k_o \sqrt{n_m^2 - n_1^2 \sin^2 \theta_m}$ ,  $S(0)$  y  $S_n(\pi - 2\theta_m)$  son evaluados para las partículas rodeadas por el líquido con índice de refracción  $n_m$ , y  $\theta_m = \sin^{-1}[(n_1/n_m) \sin \theta_i]$ . La ecuación 1.5, es el coeficiente de reflexión de la onda plana para la interfase prisma-líquido cuando la fracción de una monocapa es absorbida sobre la superficie plana del prisma (rodeada por la interfase líquida). Sin embargo, en el caso experimental es difícil tener una onda plana, a pesar de usar un haz bien colimado, en realidad muchos spot de láser tienen un perfil de intensidad Gaussiano. Por lo que la reflectancia de un haz Gaussiano puede ser calculado [29], a partir del coeficiente de reflexión de la onda plana  $r_{CSM}$ , como

$$R(\theta_i) = \frac{\omega_o k_1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{\pi/2} |r(\theta)|^2 e^{-\left[\frac{(\omega_o k_1)^2}{2} (\theta - \theta_i)^2\right]} d\theta \quad (1.7)$$

donde  $k_1$  es el número de onda de la luz en el medio incidente (en este caso el prisma). A partir de las consideraciones geométricas se puede calcular  $\omega_o$  como sigue

$$\omega_o \approx \frac{\lambda n_1 Y}{\pi \omega_o^{out}} \quad (1.8)$$

---

<sup>5</sup>A este medio se le suele nombrar *medio matriz*.

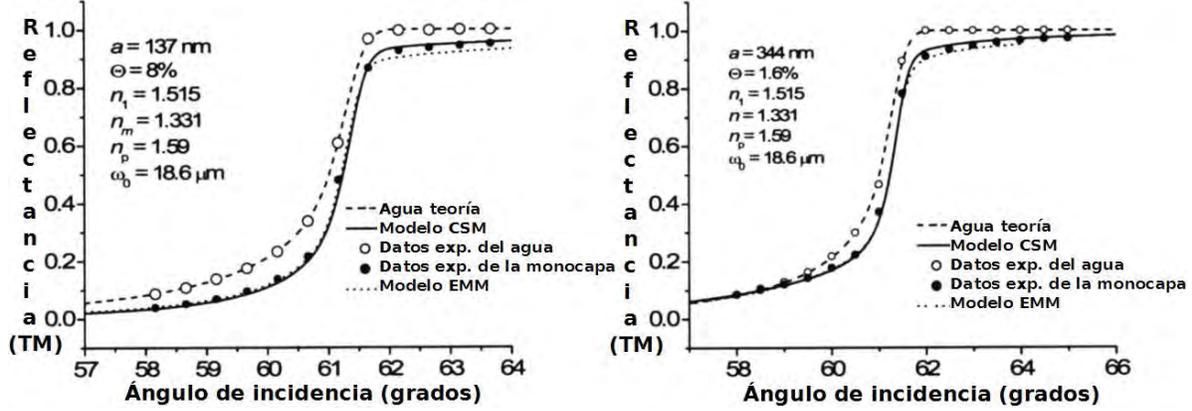


Figura 1.2: *Datos experimentales para la reflectancia de un haz láser He-Ne desde una interfase limpia vidrio-agua (círculos abiertos) y con una monocapa de partículas de látex absorbida (círculos rellenos). Las curva continua corresponde a la gráfica obtenida con el modelo de esparcimiento coherente (CSM) y la línea discontinua corresponde a la gráfica realizada con el modelo de medio efectivo (EMM). Véase la Ref. [26].*

siendo  $Y$  el radio del prisma semicilíndrico y  $\omega_o^{out}$  el radio del spot, para el haz, fuera del prisma. En esta publicación se procedió a comparar el modelo teórico, Exp. 1.7, con la reflectancia coherente de un haz láser, a diferentes ángulos de incidencia, desde la base de un prisma semicilíndrico con una monocapa de partículas de látex absorbidas por éste. En la figura 1.2, se muestran dos de las gráficas publicadas en este artículo correspondientes a la reflectancias como función del ángulo de incidencia alrededor del ángulo crítico para la superficie del prima sin monocapa (círculos huecos) y para la monocapa de partículas de látex absorbida por la superficie (círculos rellenos). Es importante recalcar que el parámetro  $\Theta$  (superficie de cubierta) se dejó como un parámetro ajustable. Como puede notarse de este par de gráficas, las curvas experimentales se ajustan de manera aceptable a la curva teórica del modelo descrito previamente 1.7, donde se utilizó un láser con polarización  $TM$ , con una longitud de onda  $\lambda = 632.8nm$ , y un radio de cintura para el haz de  $\omega_o = 18.6\mu m$ . Los índices de refracción usados para el prisma, el agua, y las partículas de látex fueron de 1.515, 1.331 y 1.59, respectivamente. Aún así, se pueden observar pequeñas discrepancias entre la teoría y el experimento, esto debido a la formación de agregados de partículas sobre la superficie del prisma que no se toman en cuenta en el modelo teórico.

Es importante recalcar que en esta publicación también se hace la comparación entre el modelo de esparcimiento coherente (CSM) con el modelo de medio efectivo (EMM), donde en este último la monocapa de partículas es sustituida por una película artificial de espesor  $2a_o$  con propiedades efectivas. Es decir, se toma un índice de refracción efectivo (para esta película artificial), cuya expresión está dada por la relación de van der Hulst, [30]

$$n_{eff} = n_m[1 + i\gamma S(0)] \quad (1.9)$$

donde  $\gamma = 3f/2x^3$ , siendo  $n_{eff}$  una cantidad compleja y  $f$  corresponde a la fracción de cubierta igual a  $(2/3)\Theta$ . Recordemos que  $\Theta$  es la superficie de cubierta (en porcentaje).

Entonces, la reflectancia aplicando el modelo de medio efectivo, es calculada a partir de la bien conocida expresión para el coeficiente de reflexión en tres medios homogéneos (Sec. 3.1).

$$r_{EMM} = \frac{r_{12} + r_{23} e^{(2ik_{z2}d)}}{1 + r_{12} r_{23} e^{(2ik_{z2}d)}} \quad (1.10)$$

Aquí  $r_{12}$  y  $r_{23}$  son los coeficientes de reflexión de Fresnel para la interfase prisma-película y para la interfase película-agua, respectivamente,  $k_{z2} = k_o \sqrt{n_{eff}^2 - n^2 \sin^2 \theta_i}$ , y  $d = 2a_o$ . En la figura 1.2, también se grafican las curvas de reflectancia predichas por el modelo del medio efectivo, asumiendo el mismo valor, usado en el modelo CSM, para la superficie de cubierta. De donde podemos ver que el EMM se ajusta relativamente bien a los datos experimentales. Las diferencias entre el EMM y el CSM, respecto a los datos experimentales, son similares, aunque estas curvas no se superpongan.

La simplicidad de las expresiones para los coeficientes de reflexión y transmisión (Exps. 1.1 y 1.2) de una onda coherente en el modelo heurístico la hacen muy atractiva hacia la aplicación en nuevos problemas. No obstante, su naturaleza heurística limita un análisis profundo del modelo, y por ende da poca fiabilidad de su uso para aplicaciones nuevas, además de estar limitada para superficies de cubierta pequeñas. De manera paralela al trabajo realizado con el modelo heurístico [26], recientemente se ha desarrollado un modelo con expresiones de forma muy precisa para los coeficientes de reflexión y transmisión de luz coherente de una monocapa de partículas monodispersas colocadas al azar sobre la superficie de un sustrato plano, éste derivado de la teoría de múltiple esparcimiento con aproximaciones bien identificables [1]. Dentro del (MME) se usó la aproximación quasi-cristalina (QCA) donde se obtuvo una ecuación integral correspondiente al promedio del campo eléctrico que excita a las partículas de la monocapa cuando ésta es iluminada por una onda monocromática plana externa. Para hallar la solución aproximada, a esta ecuación integral, se usa el modelo de correlación para dos partículas y se asume que el campo excitante consiste de dos ondas viajeras efectivas planas monocromáticas. Con estas suposiciones se puede resolver la ecuación integral, siempre y cuando la fracción de cubierta de la superficie sea moderadamente baja. De esta manera se obtienen las expresiones analíticas correspondientes a los coeficientes de reflexión y transmisión, para cualquier ángulo de incidencia y tamaño de partícula, de una monocapa de partículas monodispersas. Estos resultados, relativamente simples, se reducen al (HM) y al (SS) mencionados previamente para fracciones de cubierta bajas. El modelo así obtenido puede ser fácilmente usado en muchos fenómenos ópticos relacionados con monocapas de partículas desordenadas monodispersas.

De esta última publicación surge el deseo y la motivación de poder realizar su análisis experimental en monocapas con partículas de dióxido de titanio, también conocido como titania,  $TiO_2$ , así como con partículas de alúmina u óxido de aluminio  $Al_2O_3$ , respectivamente; esto empleando la configuración de reflexión externa, para una interfase aire-vidrio. Ambas monocapas son depositadas, por técnica *dip coating* (véase sección 4.1), sobre sustratos planos (portaobjetos). Además no sólo se desea corroborar, de este modelo, las reflectancias de este par de monocapas, sino también se tiene en mente medir la transmitancia de estas dos; algo totalmente nuevo a lo realizado en el artículo [26], donde no solamente nos limitaremos

alrededor del ángulo crítico, sino a cualquier ángulo de incidencia, esto es de  $0^\circ$  hasta  $90^\circ$ , sin tomar importancia en el tamaño de partícula o en la fracción de superficie cubierta por la monocapa. Además, la viabilidad así como los recursos necesarios para llevar a cabo el experimento, nos incita a realizar otro tipo de estudios experimentales como es el caso de medir sus espectros de transmitancia (a incidencia normal), para así comparar, de otra forma, con el modelo teórico. En otras palabras, primero como función del ángulo de incidencia (para la reflectancia y transmitancia), y después como función de la longitud de onda (para el espectro). Si bien es cierto que estas partículas no poseen un tamaño constante (radio fijo), a diferencia de las partículas de látex que tienen un tamaño constante, de aquí que sea prudente conocer hasta que punto el modelo presentado en la Ref. [1], se ajusta a las curvas experimentales, para la reflectancia y transmitancia, de este par de monocapas (junto con sus respectivos espectros de transmitancia). Por supuesto, bajo la posibilidad de encontrar discrepancias entre la teoría y el experimento, se contempla para este trabajo, el desarrollo de un modelo teórico en el que se extienda el análisis a monocapas de partículas polidispersas, considerando siempre una forma esférica para las partículas (no siempre cierto) y sin considerar la formación de aglomeraciones sobre la superficie en la que se deposita. Finalmente se contempla su comparación de este modelo extendido con los datos experimentales obtenidos.

## 1.2. Objetivos y metas

Los objetivos principales que se contemplan para este trabajo de investigación de manera directa son los siguientes:

- Comparar y analizar empleando la configuración experimental de reflexión externa, para una interfase aire-vidrio, la reflectancia y transmitancia en monocapas de partículas de alúmina y titania depositadas, respectivamente, sobre un sustrato plano transparente con el modelo teórico para reflexión y transmisión de luz coherente en monocapas de partículas monodispersas publicado en el artículo [1].
- Extender el modelo presentado en la Ref. [1], para obtener los coeficientes de reflexión y transmisión de una monocapa aislada constituida por partículas polidispersas.
- Obtener las expresiones matemáticas para la reflectancia y transmitancia de una monocapa de partículas polidispersas montada sobre una superficie plana.
- Comparar los resultados experimentales obtenidos de este par de monocapas con el nuevo modelo teórico correspondiente a la reflexión y transmisión de luz coherente en monocapas de partículas polidispersas depositadas sobre una superficie plana transparente.
- Obtener los espectros de transmitancia para el par de monocapas (alúmina y titania), y su comparación con el modelo teórico, como función de la longitud de onda, en monocapas monodispersas y polidispersas.

Dentro del área instrumental y con el fin de encaminarnos a los objetivos tenemos como metas primordiales las siguientes:

- Realizar el depósito de monocapas, con partículas de alúmina y titania, sobre un sustrato plano transparente (portaobjetos), utilizando la técnica *dip coating*, con distintas superficies de cubierta.
- Montar el arreglo experimental utilizando la configuración de reflexión externa en una interfase aire-vidrio-(con monocapa), para corroborar el modelo teórico de reflexión y transmisión de luz coherente en monocapas de partículas monodispersas y polidispersas, en particular para el caso de partículas de alúmina y titania.
- Implementar un arreglo experimental que nos permita medir los espectros de transmitancia empleando una configuración de reflexión externa para una interfase aire-vidrio-(con monocapa), esto para un rango amplio de longitudes de onda, a incidencia normal, para su comparación con el modelo teórico en el caso monodisperso y polidisperso.
- Elaborar un *software* (en *Matlab* u *Octave*) para el análisis de los resultados experimentales, que permita la comparación de éstos con los modelos teóricos para el caso: monodisperso y polidisperso. Igualmente se puede emplear *Origin*, *qtplot* u otro *software* para el análisis de los resultados teórico-experimentales. Sin embargo, por su fácil uso se optó por *GNU - Octave*.
- Estimar mediante el análisis de imágenes ópticas la fracción de cubierta de las monocapas empleando un microscopio óptico. Cabe señalar que las partículas de titania poseen un radio muy pequeño, lo que imposibilita verlas a través del microscopio óptico, no obstante el interés surge de poder estimar los agregados que se generan en la superficie del sustrato de éstas partículas, en tomarlo en cuenta para la fracción de la superficie cubierta.

### 1.3. Aportaciones

Si bien es cierto que existen pocas publicaciones referentes al estudio teórico de la reflexión y transmisión de luz de monocapas depositadas sobre algún tipo de sustrato, también las hay en menor cantidad para sus aplicaciones, Refs. [31–34]. Por ejemplo, una de ellas la podemos encontrar en la construcción de sensores ópticos donde se censan cambios físicos y/o químicos ocurridos en un entorno, que rodean al dispositivo, a través de cambios en la reflectividad óptica, la cual también se ve afectada. La mayoría de estos sensores consisten de monocapas de partículas metálicas muy pequeñas depositadas sobre algún tipo de sustrato plano.

Por otra parte, el tener ya un modelo teórico desarrollado en este trabajo de investigación como un primer aporte, para la reflexión y transmisión de luz coherente de monocapas de partículas polidispersas, nos permite implementar, como un aporte más, un montaje experimental para su estudio detallado con distintos tipos de partículas. En nuestro caso, el estudio

teórico-experimental se centra en monocapas con partículas de alúmina y titania, como se había mencionado previamente. Más aún, nuestro interés va más allá para estudiarles a partir de sus espectros de transmitancia para un amplio rango de longitudes de onda; y ver si es plausible de esta forma, obtener más información del sistema en este particular caso de estudio. De esta manera no sólo estudiamos estos sistemas en la forma en que reflejan y transmiten la luz, sino que además analizamos su “comportamiento” para un amplio rango de longitudes de onda a incidencia normal, a través de sus espectros. Si bien es cierto que el modelo teórico propuesto no es del todo general, pues se restringe a partículas con forma esférica y a fracciones de cubierta pequeñas, la idea de corroborar teoría y experimento, nos permite abrirnos camino al desarrollo de nuevos modelos teóricos, con las bases previas ya establecidas de estos dos (caso monodisperso y polidisperso), además de implementar nuevos montajes experimentales para estudios específicos futuros, por citar un ejemplo, medir la reflexión y transmisión coherente en nuevos tipos de monocapas (látex o sílice) empleando una configuración por reflexión interna.

Como un aporte más de este trabajo de investigación, tenemos planteada una posible aplicación para el monitoreo de partículas las cuales son depositadas sobre algún sustrato plano (un portaobjetos, por ejemplo), a través de los cambios producidos en su reflectancia.<sup>6</sup> Como se vio en la Sec. 1.1, el número de partículas (aisladas) depositadas sobre la superficie del sustrato determinan la fracción de cubierta en la superficie, véase expresión 1.3, lo que permite determinar así el número de partículas que se depositan o fueron depositadas sobre la superficie del sustrato, esto con solo medir su reflectancia; o su correspondiente espectro de transmitancia, Sec. 6.1. Sin embargo esta cantidad,  $\Theta$ , es difícil de determinar por observación directa (empleando un microscopio óptico), pues su valor queda determinado para la mejor curva de ajuste de los datos experimentales. No obstante, la idea de este trabajo, finalmente, es la de elaborar un algoritmo que nos permita determinar el número de partículas depositadas sobre la superficie del sustrato, a partir de la imagen tomada por el microscopio óptico, de la monocapa; y poder así comparar su valor con el obtenido en el modelo teórico empleado para el ajuste de los datos experimentales. Nuevamente se hace hincapié que aunque las partículas de alúmina se pueden observar directamente con el microscopio óptico (partículas de  $1.5\mu m$  de radio) junto con sus respectivos agregados que se forman en la superficie del sustrato, con las partículas de titania ocurre lo contrario (partículas de  $220nm$  de radio); no es posible observarlas directamente con este instrumento. Sin embargo, es posible estudiar los aglomerados que se forman de éstas sobre la superficie del sustrato y por ende estudiar de manera aproximada la fracción de cubierta, de la monocapa, depositada sobre la superficie del sustrato.

En conclusión, las aportaciones de este trabajo se centran en tres campos del conocimiento, el aspecto teórico (desarrollo de un modelo para el caso de monocapas polidispersas), el aspecto experimental (medición de la reflectancia y transmitancia en monocapas con partículas polidispersas, incluyendo sus respectivos espectros de transmitancia) y una pequeña aplicación (diseño de *software* para determinar el número de partículas depositadas sobre el sustrato, a partir de la imagen tomada por el microscopio óptico de la monocapa).

---

<sup>6</sup>En este caso emplearemos las monocapas construidas con alúmina y titania.

## 1.4. Contenido

Los siguientes capítulos de este trabajo se clasifican en dos partes, una parte teórica desarrollada en el segundo y tercer capítulo, y una parte experimental, abordada en los capítulos posteriores. En el segundo capítulo se proporcionan las bases teóricas necesarias para poder entender y comprender de manera concisa los modelos teóricos desarrollados en el tercer capítulo. Los temas principales que se abordan en el segundo capítulo son: el campo electromagnético, las ecuaciones de Maxwell, y su aplicación de éstas en la teoría de Mie y la determinación del campo eléctrico dinámico promedio alrededor de una molécula. Por otra parte en el capítulo tres, se da un repaso de los coeficientes de reflexión y transmisión de Fresnel para dos interfases y para una capa de material con espesor  $d$ , se describen los coeficientes de reflexión y transmisión para una monocapa de partículas monodispersas soportada por una interfase plana, se deducen los coeficientes de reflexión y transmisión coherentes para una monocapa de partículas polidispersas, igualmente depositada sobre un sustrato plano, para concluir con las expresiones de reflectancia y transmitancia de este par de modelos al final del capítulo. Dentro del capítulo 4 se presenta el método experimental empleado para el depósito de monocapas sobre un portaobjetos con partículas de alúmina y titania, utilizando la técnica *dip coating*; además de dar una descripción breve de esta técnica al inicio de este capítulo. Se detalla, además, el montaje experimental empleado para medir la reflectancia y transmitancia de luz coherente en este par de monocapas, se incluye también el arreglo experimental empleado para medir los espectros de transmitancia a incidencia normal. Los resultados experimentales y su comparación con los modelo teóricos (caso monodisperso y polidisperso), para la reflexión y transmisión de luz coherente de monocapas, con partículas de alúmina y titania, se presentan en el capítulo 5, donde se incluyen también los espectros de transmitancia para este par, finalmente en este capítulo se da un análisis de los resultados experimentales obtenidos. El trabajo concluye con la discusión de las posibles aplicaciones que se podrían tener, con los dos modelos desarrollados recientemente, en monocapas con partículas monodispersas y polidispersas; así como la iniciativa de extender estos a casos más generales y por ende desarrollar nuevos montajes experimentales para su estudio particular; finalmente dentro del capítulo 6, se presentan las conclusiones generales de este trabajo de investigación.

Estimado lector, antes de empezar con la parte teórica, tomé en cuenta que el desarrollo del conocimiento científico se ha debido en gran parte a las críticas constructivas que surgen del escrutinio minucioso que se realizan en los trabajos de investigación. Por tanto, lo invito e incito a usted, con beneplácito, a dar observaciones constructivas que me permitan ampliar y mejorar el contenido de este documento; incluyendo, si es posible, conocimiento nuevo de frontera que permita el desarrollo de nueva ciencia.

# Investigación teórica



# Capítulo 2

## Fundamentos y antecedentes

El presente capítulo se divide en tres secciones principales, en la primera se da una descripción general de las ecuaciones de Maxwell, y en las dos siguientes se da una aplicación de éstas para calcular, por ejemplo, el campo eléctrico alrededor de una molécula y el campo de esparcimiento producido por una esfera cuyo radio es menor a la longitud de onda incidente. Estos ejemplos nos proporcionan herramientas y conceptos útiles para poder entender los modelos teóricos que se plantean en el capítulo posterior. Las notas que se presentan en este capítulo fueron tomadas de las siguientes referencias, [15], [27], [30], [35].

### 2.1. Ecuaciones de Maxwell

Desde la antigüedad la naturaleza intrínseca de la luz (dentro del rango correspondiente al espectro visible, de 400 a 700nm aproximadamente), ha tenido distintas interpretaciones físicas, en las que destacan hoy en día, su descripción como una onda electromagnética, como un rayo luminoso, o bien, como una partícula llamada fotón; esto dependiendo de la interacción que se tenga de la luz con la materia. En lo que respecta a este trabajo, la luz se tratará como una onda electromagnética, y el concepto de rayo luminoso se empleará de manera indirecta, siendo este un concepto que se puede derivar de la teoría electromagnética de Maxwell. Así pues, la luz puede ser tratada como una onda electromagnética que está sustentada en la teoría electromagnética de Maxwell, en la cual la interacción electromagnética es medida a través de campos que son medibles en todo punto del espacio-tiempo,  $(\vec{r}, t)$ . En regiones sin materia (en el vacío) denotaremos por  $\vec{E}(\vec{r}, t)$  y  $\vec{B}(\vec{r}, t)$ , los campos eléctricos y magnéticos, respectivamente. Todos los fenómenos electromagnéticos se pueden describir a partir de las cuatro ecuaciones de Maxwell, siguientes:

$$\nabla \cdot \vec{E}(\vec{r}, t) = \frac{\rho(\vec{r}, t)}{\epsilon_0} \quad (2.1)$$

$$\nabla \cdot \vec{B}(\vec{r}, t) = 0 \quad (2.2)$$

$$\nabla \times \vec{E}(\vec{r}, t) = -\frac{\partial \vec{B}(\vec{r}, t)}{\partial t} \quad (2.3)$$

$$\nabla \times \vec{B}(\vec{r}, t) = \mu_0 \vec{J} + \varepsilon_0 \mu_0 \frac{\partial \vec{E}(\vec{r}, t)}{\partial t} \quad (2.4)$$

En estas ecuaciones  $\rho(\vec{r}, t)$  representa la densidad de carga dependiente del tiempo y espacio.  $\vec{J}(\vec{r}, t)$  corresponde a la densidad de corriente eléctrica dependiente de la posición y del tiempo. Las constantes  $\mu_0$  y  $\varepsilon_0$ , corresponden a las permeabilidad y permitividad eléctrica en el vacío, respectivamente. Estas ecuaciones 2.1 describen propiamente la interacción clásica entre todas las cargas y corrientes eléctricas del sistema físico. Junto con las expresiones constitutivas apropiadas las cuales relacionan  $\rho$  y  $\vec{J}$  para los campos, las condiciones de frontera y las condiciones iniciales pertinentes al sistema que se este estudiando, nos determinan un sistema de ecuaciones diferenciales parciales que nos dan la solución única para el campo eléctrico y magnético.

Las ecuaciones de campo de Maxwell proveen una imagen clásica correcta de un campo y una fuente de distribución arbitraria en escalas microscópicas y macroscópicas. Sin embargo, para las sustancias macroscópicas a veces es conveniente introducir nuevos campos derivados que nos permitan representar los campos eléctricos y magnéticos en el que, en un sentido promedio, ya estén incluidas las propiedades del material. Estos campos son el campo de desplazamiento eléctrico  $\vec{D}$  y el campo de magnetización  $\vec{H}$ . En el caso más general, estos campos derivados son funciones no locales y no lineales de los campos principales  $\vec{E}$  y  $\vec{B}$ .

$$\begin{aligned} \vec{D} &= \vec{D}(\vec{r}, \vec{E}, \vec{B}, t), \\ \vec{H} &= \vec{H}(\vec{r}, \vec{E}, \vec{B}, t). \end{aligned} \quad (2.5)$$

Bajo ciertas condiciones, por ejemplo para campos de muy baja intensidad, se puede asumir que la respuesta de una sustancia es lineal, así que

$$\begin{aligned} \vec{D} &= \varepsilon(\vec{r}, t) \vec{E}, \\ \vec{H} &= \mu^{-1}(\vec{r}, t) \vec{B} \end{aligned} \quad (2.6)$$

es decir, los campos derivados son linealmente proporcionales a los campos primarios y que el campo de desplazamiento eléctrico (y campo de magnetización) sólo dependen del campo eléctrico (y magnético). Las ecuaciones de campo expresadas en términos de los campos derivados  $\vec{D}$  y  $\vec{H}$  son

$$\nabla \cdot \vec{D} = \rho(\vec{r}, t), \quad (2.7)$$

$$\nabla \cdot \vec{B} = 0, \quad (2.8)$$

$$\nabla \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \quad (2.9)$$

$$\nabla \times \vec{H} = \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} + \vec{J}(\vec{r}, t) \quad (2.10)$$

En la electrodinámica se pueden definir dos tipos de potenciales, el *potencial magnético* y el *potencial eléctrico*. De la ley de Gauss para el campo magnético, Exp. 2.2, nos dice que la divergencia de éste es siempre cero, por otro lado se sabe que la divergencia de un rotacional

es siempre cero. Entonces se puede escribir el vector magnético como el rotacional de un vector  $\vec{A}$ , el cual llamaremos *potencial magnético*,

$$\vec{B} = \nabla \times \vec{A}. \quad (2.11)$$

Sustituyendo la expresión anterior en la ley de inducción de Faraday, se obtiene

$$\nabla \times \left( \vec{E} + \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} \right) = 0. \quad (2.12)$$

Ahora, el rotacional de un gradiente es siempre cero, por lo que

$$\vec{E} + \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} = -\nabla \phi \quad (2.13)$$

donde  $\phi$  es el potencial eléctrico. Para especificar un campo vectorial en todo espacio, salvo por una constante, debemos especificar su rotacional y su divergencia en todo el espacio (notemos que en la divergencia y el rotacional juntos tenemos todas las derivadas de primer orden de las tres componentes del vector). De manera que todavía tenemos libertad de especificar la divergencia de  $\vec{A}$ . Especificar la divergencia del potencial magnético le decimos escoger una *norma*. Sustituyendo los campos  $\vec{E}$  y  $\vec{B}$  por sus expresiones en términos de  $\vec{A}$  y  $\phi$  en la ley de Ampere-Maxwell (Exp. 2.4),

$$\nabla \times \nabla \times \vec{A} = \mu_o \vec{J} + \mu_o \epsilon_o \frac{\partial}{\partial t} \left( -\nabla \phi - \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} \right), \quad (2.14)$$

Usando la expresión  $\nabla \times \nabla \times \vec{S} = \nabla(\nabla \cdot \vec{S}) - \nabla^2 \vec{S}$  y definiendo la divergencia de  $\vec{A}$  como  $\nabla \cdot \vec{A} = -\mu_o \epsilon_o \frac{\partial \phi}{\partial t}$ , en la expresión 2.14, esta se reduce a

$$\nabla^2 \vec{A} - \mu_o \epsilon_o \frac{\partial^2 \vec{A}}{\partial t^2} = \mu_o \vec{J} \quad (2.15)$$

Esta es la ecuación de onda para el potencial  $\vec{A}$ . Para obtener la ecuación de onda del potencial eléctrico  $\phi$ , sustituimos  $\vec{E} + \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} = -\nabla \phi$  en la ley de Gauss del campo eléctrico, para obtener

$$\nabla^2 \phi - \mu_o \epsilon_o \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} = -\frac{\rho}{\epsilon_o}. \quad (2.16)$$

La expresión 2.16 corresponde a la ecuación de onda para el potencial eléctrico. De los potenciales electromagnéticos  $\phi$  y  $\vec{A}$  podemos obtener el campo eléctrico como

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = -\nabla \phi(\vec{r}, t) - \frac{\partial \vec{A}(\vec{r}, t)}{\partial t} \quad (2.17)$$

Para campos monocromáticos con dependencia  $e^{(i\omega t)}$  estos potenciales satisfacen en la norma de “coulomb” las siguientes ecuaciones de Helmholtz,

$$\nabla^2 \phi - \mu_o \epsilon_o \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} = -\frac{\rho}{\epsilon_o} \quad y \quad \nabla^2 \vec{A} - \mu_o \epsilon_o \frac{\partial^2 \vec{A}}{\partial t^2} = \mu_o \vec{J},$$

y el campo eléctrico se obtiene como,

$$\vec{E}(\vec{r}) = -\nabla\phi(\vec{r}) + i\omega\vec{A}(\vec{r}). \quad (2.18)$$

De la continuidad de la carga,  $\nabla \cdot \vec{J}(\vec{r}, t) = -\frac{\partial\rho}{\partial t}$ , a frecuencia  $\omega$  obtenemos,

$$\nabla \cdot \vec{J}(\vec{r}) = -i\omega\rho(\vec{r}). \quad (2.19)$$

Entonces las ecuaciones que satisfacen los potenciales,

$$\nabla^2\phi - \mu_o\varepsilon_o\frac{\partial^2\phi}{\partial t^2} = \frac{1}{i\omega\varepsilon_o}\nabla \cdot \vec{J} \quad y \quad \nabla^2\vec{A} - \mu_o\varepsilon_o\frac{\partial^2\vec{A}}{\partial t^2} = \mu_o\vec{J}, \quad (2.20)$$

La solución a los potenciales se obtiene con la función de Green para la Ec. de Helmholtz escalar,

$$\phi(\vec{r}) = \frac{1}{i\omega\varepsilon_o} \int \left[ \frac{-e^{(ik|\vec{r}-\vec{r}'|)}}{4\pi|\vec{r}-\vec{r}'|} \right] \nabla' \cdot \vec{J}(\vec{r}') d^3r', \quad (2.21)$$

$$\vec{A}_n(\vec{r}) = \mu_o \int \left[ \frac{-e^{(ik|\vec{r}-\vec{r}'|)}}{4\pi|\vec{r}-\vec{r}'|} \right] J_n(\vec{r}') d^3r', \quad (2.22)$$

donde  $\nabla'$  es el gradiente respecto a coordenadas primadas y  $A_n$  es cualquiera de las componentes cartesianas del vector  $\vec{A}$ . Podemos entonces calcular el campo eléctrico usando la expresión 2.18, de donde se obtiene

$$\vec{E}(\vec{r}) = \int \left[ -\nabla \left( \frac{\nabla' \cdot \vec{J}(\vec{r}')}{i\omega\varepsilon_o} \right) - i\omega\mu_o\vec{J}(\vec{r}') \right] \left[ \frac{-e^{(ik|\vec{r}-\vec{r}'|)}}{4\pi|\vec{r}-\vec{r}'|} \right] d^3r'.$$

La integral anterior se puede reducir a la siguiente expresión,

$$\vec{E}(\vec{r}) = -i\omega\mu_o \int \left( \overleftrightarrow{I} + \frac{1}{\omega^2\varepsilon_o\mu_o}\nabla\nabla \right) \cdot \vec{J}(\vec{r}') \left[ \frac{-e^{(ik|\vec{r}-\vec{r}'|)}}{4\pi|\vec{r}-\vec{r}'|} \right] d^3r'$$

donde se ha sustituido  $\nabla' = -\nabla$  e  $\overleftrightarrow{I}$  es la diádica identidad,  $\overleftrightarrow{I} = \hat{a}_x\hat{a}_x + \hat{a}_y\hat{a}_y + \hat{a}_z\hat{a}_z$ . Finalmente el campo eléctrico lo podemos escribir como

$$\vec{E}(\vec{r}) = i\omega\mu_o \int \overleftrightarrow{G}(\vec{r}-\vec{r}') \cdot \vec{J}(\vec{r}') d^3r' \quad (2.23)$$

donde,

$$\overleftrightarrow{G}(\vec{r}-\vec{r}') = \left( \overleftrightarrow{I} + \frac{1}{k_o^2}\nabla\nabla \cdot \right) \quad (2.24)$$

es la diádica de Green del campo vector-eléctrico. En la ecuación anterior usamos,  $\omega^2\varepsilon_o\mu_o = k_o^2$ . se puede notar que  $\overleftrightarrow{G}(\vec{r}-\vec{r}')$  resuelve la ecuación de onda vectorial para una fuente puntual, es decir,

$$\nabla \times \nabla \overleftrightarrow{G}(\vec{r}-\vec{r}') - k_o^2\overleftrightarrow{G}(\vec{r}-\vec{r}') = \delta(\vec{r}-\vec{r}'). \quad (2.25)$$

Varios autores advierten sobre algunos cuidados que hay que tener al usar la diádica de Green. Al haber cambiado  $\nabla' = -\nabla$  puede ser que ya no se pueda cambiar el orden de la derivación y la integral. La diádica de Green tiene una singularidad que va como  $r^{-3}$  y no es integrable sobre  $\vec{r} = \vec{r}'$ .

Una de las aplicaciones interesantes de las ecuaciones de Maxwell, por ejemplo, y que es de utilidad para el aspecto didáctico en este trabajo, es el de calcular el campo eléctrico radiado por un conjunto de moléculas. Donde aquí empleamos el concepto de promedio configuracional del campo; concepto que nos permitirá entender un poco mejor la teoría desarrollada en el capítulo 3. En la siguiente sección 2.3 se expone la teoría de Mie, donde se aplican las ecuaciones de Maxwell para determinar el campo esparcido por una esfera de tamaño aproximado a la longitud de onda incidente.

## 2.2. Campo eléctrico dinámico promedio alrededor de una molécula

Como sabemos, la materia está compuesta de átomos y moléculas todos ellos, además, poseen carga eléctrica. Un átomo neutro está formado por un núcleo con cierto número de protones de carga<sup>1</sup>  $+e$  y neutrones sin carga. Alrededor del núcleo se encuentran los electrones de carga  $-e$  en igual número que los protones. La descripción del átomo se debe hacer en general usando la teoría de la mecánica cuántica. Sin embargo, en óptica no siempre es necesario tener una descripción detallada de los átomos. **Para muchos propósitos es suficiente con representar a los átomos, o a las moléculas, como una distribución de carga localizada en un volumen muy pequeño (desde unos cuantos Angströms cúbicos hasta algunos nanómetros cúbicos).** Un cuerpo u objeto en presencia de un campo eléctrico externo va a tener una respuesta a éste. La distribución de carga asociada a una molécula se puede representar en una expansión multipolar. El primer término sería la carga total del átomo ó molécula. Luego tendríamos el término dipolar, cuadrupolar, etc. Para el desarrollo de las ecuaciones de Maxwell macroscópicas es suficiente quedarnos con los dos primeros términos; el monopolar y el dipolar. NOTA: En el texto siguiente nos referiremos siempre a una molécula, pero en general podríamos referirnos a un átomo igualmente.

Imaginemos una molécula como una región definida del espacio en la cual coexisten un número  $n$  de cargas negativas (electrones) con un número  $n$  de cargas positivas (protones). Supongamos que el centro de la molécula esta en  $\vec{r}_j$  y ésta se encuentra en reposo. Supongamos que los electrones están en movimiento alrededor del centro del molécula y toda la carga positiva están en reposo localizada en  $\vec{r}_j$ . Nos referiremos a esta molécula como la  $j$ -ésima molécula. Primero tomemos una visión determinista de la carga y la corriente. La densidad de carga está dada como,

$$\rho_j(\vec{r}, t) = -e \sum_{i=1}^n \delta[\vec{r} - \vec{r}_j - \vec{r}_i(t)] + ne\delta[\vec{r} - \vec{r}_j] \quad (2.26)$$

---

<sup>1</sup> $e = 1.602 \times 10^{-19}C$ , carga fundamental del electrón en el sistema internacional.

donde  $e$  es la carga fundamental y  $\vec{r}_i$  es el vector que va del centro de la molécula a la posición de la partícula. La densidad de corriente viene dada por la siguiente expresión:

$$\vec{J}_j(\vec{r}, t) = -e \sum_{i=1}^n \delta[\vec{r} - \vec{r}_j - \vec{r}_i(t)] \frac{d\vec{r}_i(t)}{dt} \quad (2.27)$$

Nótese que:

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \vec{J}_j(\vec{r}, t) &= -e \sum_{i=1}^n \nabla \cdot \left( \delta[\vec{r} - \vec{r}_j - \vec{r}_i(t)] \frac{d\vec{r}_i(t)}{dt} \right) = \\ &= -e \sum_{i=1}^n \left( \frac{d\vec{r}_i(t)}{dt} \cdot \nabla \delta[\vec{r} - \vec{r}_j - \vec{r}_i(t)] \right), \end{aligned} \quad (2.28)$$

y por otro lado

$$\begin{aligned} \frac{d\rho_j(\vec{r}, t)}{dt} &= -e \sum_{i=1}^n \frac{d \delta[\vec{r} - \vec{r}_j - \vec{r}_i(t)]}{dt} = -e \sum_{i=1}^n \left( \frac{\partial \delta(\cdot)}{\partial x_i} \frac{dx_i}{dt} + \frac{\partial \delta(\cdot)}{\partial y_i} \frac{dy_i}{dt} + \frac{\partial \delta(\cdot)}{\partial z_i} \frac{dz_i}{dt} \right) = \\ &= \frac{d\vec{r}_i(t)}{dt} \cdot \nabla_i \delta[\vec{r} - \vec{r}_j - \vec{r}_i(t)]. \end{aligned} \quad (2.29)$$

pero  $\nabla_i \delta(\cdot) = -\nabla \delta(\cdot)$ , por lo que

$$\frac{d\rho_j(\vec{r}, t)}{dt} = e \sum_{i=1}^n \frac{d\vec{r}_i(t)}{dt} \cdot \nabla \delta[\vec{r} - \vec{r}_j - \vec{r}_i(t)] = -\nabla \cdot \vec{J}_j(\vec{r}, t) \quad (2.30)$$

que es precisamente la ecuación de continuidad de la carga.

En el caso de electrones individuales de una molécula no podemos describir la trayectoria de manera determinista. Sabemos que es necesario usar mecánica cuántica para describir el estado de un electrón. La mecánica cuántica nos proveerá solo de funciones de onda de las que podemos obtener las densidades de probabilidad para la posición y la velocidad de un electrón. Podemos obtener expresiones formales para describir el campo promedio alrededor de una molécula sin necesidad de entrar en detalles sobre la mecánica de los electrones. Por lo tanto, simplemente tomemos una visión estadística del asunto.

Escribimos el promedio configuracional de la densidad de carga como función de la posición en el espacio y el tiempo como,

$$\langle \rho_j(\vec{r}, t) \rangle = -e \sum_{i=1}^n \int d^3r_i g_j(\vec{r}_i, t) \delta(\vec{r} - \vec{r}_j - \vec{r}_i) + ne \delta(\vec{r} - \vec{r}_j), \quad (2.31)$$

donde  $g_j(\vec{r}_i, t)$  es la densidad de probabilidad de encontrar a la  $i$ -ésima carga alrededor de  $\vec{r}_i$  del centro de la  $j$ -ésima molécula al tiempo  $t$ . Tenemos que  $\int d^3r_i g_j(\vec{r}_i, t) = 1$ . De la ecuación 2.31 obtenemos

$$\langle \rho_j(\vec{r}, t) \rangle = -e \sum_{i=1}^n g_j(\vec{r} - \vec{r}_j, t) + ne \delta(\vec{r} - \vec{r}_j) \quad (2.32)$$

El primer término del lado derecho de la ecuación 2.32 es una función extendida en el espacio alrededor del centro de la molécula. Ahora usamos la ecuación de continuidad y obtenemos la divergencia del promedio configuracional de la corriente. En general obtenemos,

$$\nabla \cdot \langle J_j(\vec{r}, t) \rangle = -\frac{\partial \langle \rho_j(\vec{r}, t) \rangle}{\partial t} = e \sum_{i=1}^n \frac{\partial g_j(\vec{r} - \vec{r}_j, t)}{\partial t}. \quad (2.33)$$

Desafortunadamente, de la expresión anterior, no podemos obtener una expresión formal relativamente transparente y sencilla para la densidad de corriente por este camino. Por lo que promediamos formalmente la corriente microscópica directamente:

$$\begin{aligned} \langle J_j(\vec{r}, t) \rangle &= -e \sum_{i=1}^n s_i \langle \delta[\vec{r} - \vec{r}_j - \vec{r}_i(t)] \vec{v}_i(t) \rangle = \\ &= -e \sum_{i=1}^n s_i \int d^3 r_i d^3 v_i f_i(\vec{r}_i, \vec{v}_i, t) \delta[\vec{r} - \vec{r}_j - \vec{r}_i] \vec{v}_i, \end{aligned} \quad (2.34)$$

donde  $\vec{v}_i$  es la velocidad instantánea del electrón, la función  $\delta$  tiene dimensiones de  $(\text{volumen})^{-1}$  y  $f_i(\vec{r}_i, \vec{v}_i, t)$  es la densidad de probabilidad conjunta de que el  $i$ -ésimo electrón de la  $j$ -ésima molécula este en  $\vec{r}_i$  desde el centro de la molécula y tenga velocidad  $\vec{v}_i$  en el instante de tiempo  $t$ .  $f$  tiene dimensiones de  $(\text{volumen})^{-1} \times (\text{velocidad})^{-3}$ . Entonces,

$$\langle J_j(\vec{r}, t) \rangle = -e \sum_{i=1}^n \int d^3 v_i f_i(\vec{r} - \vec{r}_j, \vec{v}_i, t) \vec{v}_i, \quad (2.35)$$

Nuevamente vemos que esta es una función de  $\vec{r}$  extendida del espacio alrededor del centro de la molécula,  $\vec{r}_j$ . Podemos escribir,

$$\langle J_j(\vec{r}, t) \rangle = -e \sum_{i=1}^n \bar{\mathbf{v}}_i(\vec{r} - \vec{r}_j, t), \quad (2.36)$$

donde  $\bar{\mathbf{v}}_i(\vec{r} - \vec{r}_j, t) = \int d^3 v_i f_j(\vec{r} - \vec{r}_j, \vec{v}_i, t) \vec{v}_i$  y tiene dimensiones de velocidad por unidad de volumen, es decir,  $(\text{área} \times \text{tiempo})^{-1}$ . Ahora

$$\frac{\partial \langle \rho_j(\vec{r}, t) \rangle}{\partial t} = -\nabla \cdot \langle J_j(\vec{r}, t) \rangle = e \sum_{i=1}^n \nabla \cdot \bar{\mathbf{v}}_i(\vec{r} - \vec{r}_j, t). \quad (2.37)$$

En el caso monocromático en que todo oscila a frecuencia  $\omega$  podemos escribir,

$$\bar{\mathbf{v}}_i(\vec{r} - \vec{r}_j, t) = \bar{\mathbf{v}}_i(\vec{r} - \vec{r}_j) e^{-i\omega t}, \quad (2.38)$$

y

$$\frac{\partial \langle \rho_j(\vec{r}, t) \rangle}{\partial t} = -i\omega \langle \rho_j(\vec{r}) \rangle e^{-i\omega t}, \quad (2.39)$$

de donde obtenemos

$$-i\omega\langle\rho_j(\vec{r})\rangle = e\sum_{i=1}^n\nabla\cdot\vec{v}_i(\vec{r}-\vec{r}_j). \quad (2.40)$$

Podemos suponer que la dirección de la velocidad promedio de las cargas alrededor de una molécula es constante en el espacio, es decir,  $\vec{v}_i(\vec{r}-\vec{r}_j) = u_i(\vec{r}-\vec{r}_j)\hat{p}_i$ , donde  $u_i$  tiene dimensiones de  $(\text{área}\times\text{tiempo})^{-1}$ . Por lo tanto,

$$\langle J_j(\vec{r})\rangle = -e\sum_{i=1}^nu_i(\vec{r}-\vec{r}_j)\hat{p}_i \quad (2.41)$$

y

$$\langle\rho_j(\vec{r})\rangle = \frac{e}{-i\omega}\sum_{i=1}^n\hat{p}_i\cdot\nabla u_i(\vec{r}-\vec{r}_j) \quad (2.42)$$

Los potenciales electromagnéticos  $\phi$  y  $\vec{A}$  radiados por la molécula están dados por,

$$\langle\phi_j(\vec{r})\rangle = -\frac{1}{\epsilon_0}\int\frac{-e^{(ik|\vec{r}-\vec{r}'|)}}{4\pi|\vec{r}-\vec{r}'|}\langle\rho_j(\vec{r}')\rangle d^3r' \quad (2.43)$$

$$\langle\vec{A}_j(\vec{r})\rangle = \mu_0\int\frac{-e^{(ik|\vec{r}-\vec{r}'|)}}{4\pi|\vec{r}-\vec{r}'|}\langle\vec{J}_j(\vec{r}')\rangle d^3r' \quad (2.44)$$

donde  $k = \omega/c$ .

De aquí en adelante omitiremos los signos del promedio configuracional y quedará implícito que nos referimos a los promedios de las cantidades correspondientes. La ecuación para el potencial se puede re-escribir como,

$$\phi_j(\vec{r}) = -\frac{1}{\epsilon_0}\sum_{i=1}^n\frac{e}{-i\omega}\int d^3r'\left(\frac{-e^{(ik|\vec{r}-\vec{r}'|)}}{4\pi|\vec{r}-\vec{r}'|}\right)\nabla'u_i(\vec{r}'-\vec{r}_j)\cdot\hat{p}_i \quad (2.45)$$

Simplificando la expresión 2.45 al desarrollar  $\nabla'u_i(\vec{r}'-\vec{r}_j)\cdot\hat{p}_i$ , resolviendo las integrales y sustituyendo  $\nabla = -\nabla'$ , obtenemos

$$\phi_j(\vec{r}) = -\frac{1}{\epsilon_0}\sum_{i=1}^n\frac{e}{-i\omega}\int u_i(\vec{r}'-\vec{r}_j)\nabla\left(\frac{-e^{(ik|\vec{r}-\vec{r}'|)}}{4\pi|\vec{r}-\vec{r}'|}\right)d^3r'\cdot\hat{p}_i \quad (2.46)$$

Supongamos que el punto de observación está lejos de la región en que se encuentran los electrones de la  $j$ -ésima molécula. En este caso podemos aproximar como constante el término gradiente en el integrando, además también podemos reemplazar  $\vec{r}'$  por  $\vec{r}_j$  dentro del término en paréntesis. Tenemos entonces que el potencial  $\phi(\vec{r})$  aproximado es

$$\phi_j(\vec{r}) = -\frac{1}{\epsilon_0}\nabla\left(\frac{-e^{(ik|\vec{r}-\vec{r}_j|)}}{4\pi|\vec{r}-\vec{r}_j|}\right)\cdot\sum_{i=1}^n\frac{e}{-i\omega}\left(\int u_i(\vec{r}'-\vec{r}_j)d^3r'\right)\hat{p}_i. \quad (2.47)$$

Donde definimos el momento dipolar del  $i$ -ésimo electrón de la  $j$ -ésima molécula como

$$\vec{P}_i = -\frac{e}{i\omega} \left( \int u_i(\vec{r}' - \vec{r}_j) d^3r' \right) \hat{p}_i \quad (2.48)$$

y

$$\vec{P}_j = \sum_{i=1}^n \vec{P}_i \quad (2.49)$$

Dadas las dimensiones de  $u$  mencionadas arriba. vemos que las dimensiones de  $\vec{P}_j$  son las correctas (*distancia*  $\times$  *carga*). Entonces, tenemos que el potencial eléctrico alrededor de la  $j$ -ésima molécula se puede aproximar finalmente como,

$$\phi_j(\vec{r}) = -\frac{1}{\epsilon_0} \nabla \cdot \left( \frac{-e^{(ik|\vec{r}-\vec{r}_j|)}}{4\pi|\vec{r}-\vec{r}_j|} \right) \cdot \vec{P}_j. \quad (2.50)$$

El potencial  $\vec{A}_j$  está dada por, (sust. Exp. 2.41),

$$\vec{A}_j(\vec{r}) = \mu_0 \int \left( \frac{-e^{(ik|\vec{r}-\vec{r}'|)}}{4\pi|\vec{r}-\vec{r}'|} \right) \left( -e \sum_{i=1}^n u_i(\vec{r}' - \vec{r}_j) \hat{p}_i \right) d^3r'. \quad (2.51)$$

Bajo la misma aproximación que usamos para  $\phi_j$  tenemos,

$$\vec{A}_j(\vec{r}) = i\omega\mu_0 \left( \frac{-e^{(ik|\vec{r}-\vec{r}_j|)}}{4\pi|\vec{r}-\vec{r}_j|} \right) \vec{P}_j \quad (2.52)$$

El campo eléctrico, dado por la expresión  $\vec{E} = -\nabla\phi + i\omega\vec{A}$ , es entonces

$$\vec{E}_j(\vec{r}) = \nabla\nabla \cdot \left( \frac{e^{(ik|\vec{r}-\vec{r}_j|)}}{4\pi\epsilon_0|\vec{r}-\vec{r}_j|} \right) \cdot \vec{P}_j - \omega^2\mu_0 \left( \frac{-e^{(ik|\vec{r}-\vec{r}_j|)}}{4\pi|\vec{r}-\vec{r}_j|} \right) \vec{P}_j, \quad (2.53)$$

donde la diádica se puede simplificar de la siguiente manera:

$$\nabla\nabla \cdot \left( \frac{e^{(ik|\vec{r}-\vec{r}_j|)}}{4\pi\epsilon_0|\vec{r}-\vec{r}_j|} \right) \cdot \vec{P}_j - \omega^2\mu_0 \left( \frac{-e^{(ik|\vec{r}-\vec{r}_j|)}}{4\pi|\vec{r}-\vec{r}_j|} \right) \vec{P}_j = \left( \frac{1}{\epsilon_0} \nabla\nabla - \omega^2\mu_0 \overleftrightarrow{I} \right) \cdot \left( \frac{e^{(ik|\vec{r}-\vec{r}_j|)}}{4\pi|\vec{r}-\vec{r}_j|} \right) \vec{P}_j$$

Para ponerlo de manera estándar, factorizamos  $-\omega^2\mu_0$  y obtenemos,

$$\begin{aligned} \vec{E}_j(\vec{r}) &= -\omega^2\mu_0 \left( \overleftrightarrow{I} - \frac{1}{\omega^2\mu_0\epsilon_0} \nabla\nabla \right) \cdot \left( \frac{e^{(ik|\vec{r}-\vec{r}_j|)}}{4\pi|\vec{r}-\vec{r}_j|} \right) \vec{P}_j = \\ &= i\omega\mu_0 \left( \overleftrightarrow{I} - \frac{1}{k_0^2} \nabla\nabla \right) \cdot \left( \frac{-e^{(ik|\vec{r}-\vec{r}_j|)}}{4\pi|\vec{r}-\vec{r}_j|} \right) (-i\omega\vec{P}_j). \end{aligned} \quad (2.54)$$

Muy cerca de la molécula (aunque lejos en comparación con las dimensiones de la molécula) el término con  $\nabla\nabla$  domina pues tiene una dependencia en la distancia  $1/r^3$  mientras que el otro va como  $1/r$ . Lejos de la molécula domina el otro término. Esto quiere decir que el campo eléctrico cerca de la molécula puede ser descrito como un dipolo eléctrico mientras que lejos de ésta la molécula se comporta como un monopolo eléctrico.

# Homogenización de la materia en la aproximación cuasi-estática

El potencial eléctrico debido a la molécula está dado como

$$\begin{aligned}\phi_j(\vec{r}) &= \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int \frac{\rho_j(\vec{r}')}{|\vec{r}-\vec{r}'|} d^3\vec{r}' = \frac{e}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i=1}^n s_i \int \frac{\delta(\vec{r}'-\vec{r}_j-\vec{r}_i)}{|\vec{r}-\vec{r}'|} d^3\vec{r}' = \\ &= \frac{e}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i=1}^n s_i \frac{1}{|\vec{r}-\vec{r}_j-\vec{r}_i|},\end{aligned}\tag{2.55}$$

y el campo eléctrico corresponde a menos el gradiente de esta expresión. Si imaginamos que los electrones están en constante movimiento y que el arreglo particular de éstos en un instante de tiempo en las diferentes moléculas que forman un material es diferente, queda claro que nos debemos de ocupar del campo eléctrico promedio. Este se puede entender como un promedio configuracional o promedio de ensamble para un arreglo de moléculas.

Este último lo entenderemos como el campo promedio entre todas las configuraciones posibles de las cargas puntuales. Podemos definir una densidad de probabilidad de encontrar de encontrar a la partícula de carga  $i$  en  $\vec{r}_i$  como  $g_i(\vec{r}_i)$ , Entonces,

$$\langle \phi_i(\vec{r}) \rangle = \frac{s_i e}{4\pi\epsilon_0} \int \frac{g_i(\vec{r}_i)}{|\vec{r}-\vec{r}_j-\vec{r}_i|} d^3\vec{r}_i.\tag{2.56}$$

Si el punto de observación  $\vec{r}$  esta lejos de la molécula comparado con sus dimensiones interiores podemos expandir

$$\frac{1}{|\vec{r}-\vec{r}_j-\vec{r}_i|} \approx \frac{1}{|\vec{r}-\vec{r}_j|} + \vec{r}_i \cdot \nabla_j \frac{1}{|\vec{r}-\vec{r}_j|},\tag{2.57}$$

donde nos quedamos con los dos primeros términos de una expansión multipolar. Entonces la expresión 2.56 queda como

$$\langle \phi_i(\vec{r}) \rangle = \frac{s_i}{4\pi\epsilon_0} \left[ \frac{e}{|\vec{r}-\vec{r}_j|} + \vec{p}_i \cdot \nabla_j \frac{1}{|\vec{r}-\vec{r}_j|} \right],\tag{2.58}$$

donde usamos

$$\int g_i(\vec{r}_i) d^3\vec{r}_i = 1,\tag{2.59}$$

para toda  $i$  y definimos

$$\vec{p}_i = e \int \vec{r}_i g_i(\vec{r}_i) d^3\vec{r}_i.\tag{2.60}$$

El potencial eléctrico promedio debido a la molécula  $j$ -ésima, es la suma del potencial debido a todas las partículas de carga que la conforman,

$$\langle \phi_j \rangle = \sum_{i=1}^n \langle \phi_i(\vec{r}) \rangle = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \left[ \frac{q_j}{|\vec{r} - \vec{r}_j|} + \vec{p}_j \cdot \nabla_j \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}_j|} \right], \quad (2.61)$$

donde

$$q_j = (n_p - n_e)e. \quad (2.62)$$

que corresponde a la carga neta de la molécula ( $n_p$  es el número de protones y  $n_e$  el número de electrones), y

$$\vec{P}_j = \sum_{i=1}^n \vec{p}_i = e \sum_{i=1}^n s_i \int \vec{r}_i g_i(\vec{r}_i) d^3\vec{r}_i. \quad (2.63)$$

El campo eléctrico promedio debido a la molécula esta dado por

$$\langle \vec{E}_j \rangle = -\nabla \langle \phi_j \rangle = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \nabla \left[ \frac{q_j}{|\vec{r} - \vec{r}_j|} + \vec{p}_j \cdot \nabla_j \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}_j|} \right] \quad (2.64)$$

## 2.3. Teoría de Mie

Las propiedades de la luz esparcida por partículas pequeñas ha sido un tema de estudio por parte de muchos investigadores desde principios del siglo pasado. A partir de las ecuaciones de Maxwell, se han desarrollado diferentes teorías o métodos, para determinados casos particulares. Por ejemplo, si la longitud de onda de la luz incidente es mucho menor que el radio de la partícula ( $\lambda \ll a_0$ ), la luz esparcida puede ser descrita mediante métodos de la óptica geométrica. Por el contrario, cuando el tamaño de la partícula es del orden de la longitud de onda incidente, se hace uso de la teoría de Mie para describir el campo esparcido por ésta. Así pues, en el año de 1908 se desarrolló una teoría que permitió caracterizar los fenómenos de esparcimiento producidos por una partícula esférica, isótropa y homogénea cuando en ella incide una onda plana homogénea.

El método de calculo empleado en esta teoría, se basa en la descomposición de las ondas electromagnéticas incidentes dentro y fuera de la esfera esparcidora en ondas esféricas en términos de las funciones armónicas acorde a las condiciones de frontera de la partícula. El campo total esparcido, en campo lejano, se obtiene sumando las ondas parciales esféricas, de donde se consiguen dos soluciones independientes, en función de la excitación paralela o perpendicular del campo incidente.

En la figura 2.1 se muestra el campo esparcido  $\vec{E}_s$  en un punto del espacio  $\vec{r}$ , en función del campo incidente  $\vec{E}_i$ , respecto a un sistema de coordenadas esféricas. Donde la partícula se encuentra en el origen y la onda incidente plana se propaga en la dirección del eje  $z$ , con una polarización lineal respecto al plano  $XY$ . Los ángulos de esparcimiento  $\theta$  y  $\phi$ , y sus vectores unitarios  $\hat{e}_\theta$  y  $\hat{e}_\phi$  se definen respecto al plano formado por el vector que contiene la dirección de propagación y por el vector que contiene la dirección de polarización de la onda incidente. En términos de este sistema de coordenadas, el coeficiente de esparcimiento en

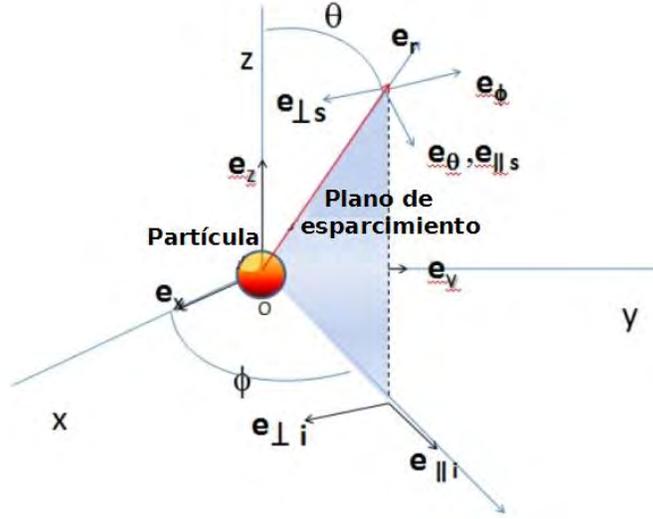


Figura 2.1: *Coordenadas utilizadas en la teoría de Mie respecto al plano de espárcimiento.*

campo lejano en la dirección determinada por los ángulos  $\theta$  y  $\phi$ , para el caso de luz incidente polarizada linealmente, es

$$\sigma(\theta, \phi) = S_1(\theta) \sin(\phi) \hat{e}_\phi + S_2(\theta) \cos(\phi) \hat{e}_\theta, \quad (2.65)$$

La radiación dispersada obtenida por Mie, se separa en dos componentes, una perpendicular y otra paralela al plano de espárcimiento, definido por el vector de propagación y la dirección de espárcimiento, denominadas funciones o coeficientes complejos de espárcimiento  $S_1(\theta)$  o  $E_\perp(\theta)$ , y  $S_2(\theta)$  o  $E_\parallel(\theta)$ , respectivamente. La relación entre las componentes perpendiculares y paralelas, del campo espárcido ( $E_{\perp s}$  y  $E_{\parallel s}$ ) y del campo incidente ( $E_{\parallel i}$  y  $E_{\perp i}$ ) es

$$\begin{pmatrix} E_{\parallel s} \\ E_{\perp s} \end{pmatrix} = \frac{e^{ik(r-z)}}{-ikr} \begin{pmatrix} S_2 & 0 \\ 0 & S_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_{\parallel i} \\ E_{\perp i} \end{pmatrix} \quad (2.66)$$

La irradiancia espárcida  $I_s$  a una distancia  $r$  del centro de la partícula al punto de observación definido por los ángulos  $(\theta, \phi)$ , en función de la intensidad incidente  $I_i$  polarizada linealmente, se puede definir como

$$I_s = I_i |\sigma(\theta, \phi)|^2 \frac{1}{k^2 r^2} \quad (2.67)$$

donde  $k = 2\pi/\lambda$  es el número de onda. Por otra parte, las intensidades dispersadas de las componentes perpendiculares y paralelas al plano de espárcimiento son

$$I_{\parallel s} = I_i \frac{I_1}{k^2 r^2} \quad (2.68)$$

$$I_{\perp s} = I_i \frac{I_2}{k^2 r^2} \quad (2.69)$$

donde  $I_1$  y  $I_2$  son las llamadas funciones de intensidad esparcidas asociadas a las componentes perpendicular y paralela respectivamente

$$I_1 = |S_1(\theta)|^2 \quad (2.70)$$

$$I_2 = |S_2(\theta)|^2 \quad (2.71)$$

Las funciones o coeficientes complejos de esparcimiento  $S_1(\theta)$  y  $S_2(\theta)$  asociadas a las componentes perpendiculares y paralelas respectivamente, se definen como

$$S_1 = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2n+1}{n(n+1)} (a_n \pi_n + b_n \tau_n) \quad (2.72)$$

$$S_2 = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2n+1}{n(n+1)} (a_n \tau_n + b_n \pi_n) \quad (2.73)$$

Estas dos expresiones se pueden determinar con el programa mostrado en el apéndice A.1. Las funciones  $\pi_n$  y  $\tau_n$  corresponden a las funciones angulares de Mie que describen la dependencia angular de la luz radiada en la dirección del ángulo de esparcimiento  $\theta$ , donde  $P_n^1$  son los polinomios de Legendre

$$\pi_n = \frac{P_n^1}{\sin(\theta)} \quad (2.74)$$

$$\tau_n = \frac{dP_n^1}{d\theta} \quad (2.75)$$

cuyas funciones de recurrencia son

$$\pi_n = \frac{2n-1}{n-1} \mu \pi_{n-1} - \frac{n}{n-1} \pi_{n-2} \quad (2.76)$$

$$\tau_n = n\mu\pi_n - (n+1)\pi_{n-1} \quad \text{donde } \mu = \cos(\theta) \quad (2.77)$$

Empezando con  $\pi_0 = 0$  y  $\tau_1 = 1$ . Por otra parte,  $\pi_n$  y  $\tau_n$  son alternativamente las funciones pares e impares de  $\mu$ . Los términos  $a_n$  y  $b_n$  corresponden a las amplitudes complejas de las ondas parciales del campo esparcido <sup>2</sup>

$$a_n = \frac{m\psi_n(mx)\psi_n'(x) - \psi_n(x)\psi_n'(mx)}{m\psi_n(mx)\xi_n'(x) - \xi_n(x)\psi_n'(mx)} \quad (2.78)$$

---

<sup>2</sup>El símbolo ' indica la derivada de la función de Riccati-Bessel en las expresiones 2.78 y 2.79. Estos coeficientes se pueden determinar con el algoritmo mostrado en el apartado A.2 y las funciones de recurrencia se calculan con el programa mostrado en la sección A.3.

$$b_n = \frac{\psi_n(mx)\psi'_n(x) - m\psi_n(x)\psi'_n(mx)}{\psi_n(mx)\xi'_n(x) - m\xi_n(x)\psi'_n(mx)} \quad (2.79)$$

donde  $m$  es el índice de refracción relativo, cociente entre el índice de refracción de la partícula  $n_p$  y el medio de propagación  $n_m$ ,  $x$  es el parámetro de tamaño de la partícula, caracterizado por el radio de ésta  $a_o$ . normalizado respecto a la longitud de onda del campo incidente en el medio  $\lambda_m$ .  $\psi_n$  y  $\xi_n$  son las funciones de Riccati-Bessel de primera y tercera especie respectivamente.

### 2.3.1. Índice de refracción relativo y parámetro de tamaño

El índice de refracción relativo y el parámetro de tamaño están dados por

$$m = \frac{n_p}{n_m} \quad (2.80)$$

$$x = \frac{2\pi n_m a_o}{\lambda_m} \quad (2.81)$$

El número mínimo  $n$  de la descomposición del campo incidente en ondas esféricas, para la convergencia de las series infinitas de las expresiones 2.72 y 2.73, dependerá del valor de tamaño normalizado de la partícula  $x$ , véase el apéndice A. Podemos concluir que la teoría de Mie nos permite calcular el esparcimiento de una partícula independientemente de su tamaño normalizado  $x$ , y la intensidad esparcida,  $I_{\parallel s}$ ,  $I_{\perp s}$ , dependerá entonces del tamaño normalizado de la partícula  $x$ , del índice de refracción relativo de la partícula respecto al medio  $m$ , la intensidad de la onda incidente  $I_i$  y del ángulo de esparcimiento  $\theta$ .

Cabe señalar que la intensidad esparcida en función del parámetro de tamaño  $x$ , se puede clasificar en tres tipos de zonas, la primera corresponde al caso en el que la partícula sea muy pequeña  $x \ll 1$ , conocida como la zona de esparcimiento de Rayleigh o esparcimiento molecular. En esta zona generalmente para cualquier ángulo de esparcimiento  $\theta$ , la intensidad es proporcional a la sexta potencia de  $x$  ( $I_s \sim x^6$ ). Aplicable principalmente para moléculas o pequeños gránulos de polvo. Por otra parte, si se tiene que  $x \gg 1$  (gotas de agua), el tamaño de la partícula es mucho mayor que la longitud de onda y la energía esparcida se puede determinar aplicando las leyes de la óptica geométrica, en este caso la intensidad será proporcional al cuadrado de  $x$ , ( $I_s \sim x^2$ ). Finalmente para el caso intermedio, esto es cuando  $x \sim 1$ , el tamaño de partícula es comparable a la longitud de onda (polvo, polen, humo), a esta zona se le denomina zona de esparcimiento de Mie. Resumiendo, cuando una onda incide sobre una partícula esférica, parte de la onda incidente será reflejada y difractada, y parte refractada dentro de la partícula. A partir de aquí, empieza a generarse un proceso continuo e infinito, de refracciones y reflexiones dentro y fuera de la partícula, incluyendo además las ondas de superficie. De esta manera, en función de los fenómenos de esparcimiento, tendremos un esparcimiento para cada caso en particular (tamaño  $x$ , índice de refracción  $m$  y ángulo de esparcimiento  $\theta$ ).

Como un ejemplo del esparcimiento en función del ángulo para una esfera, elegimos una

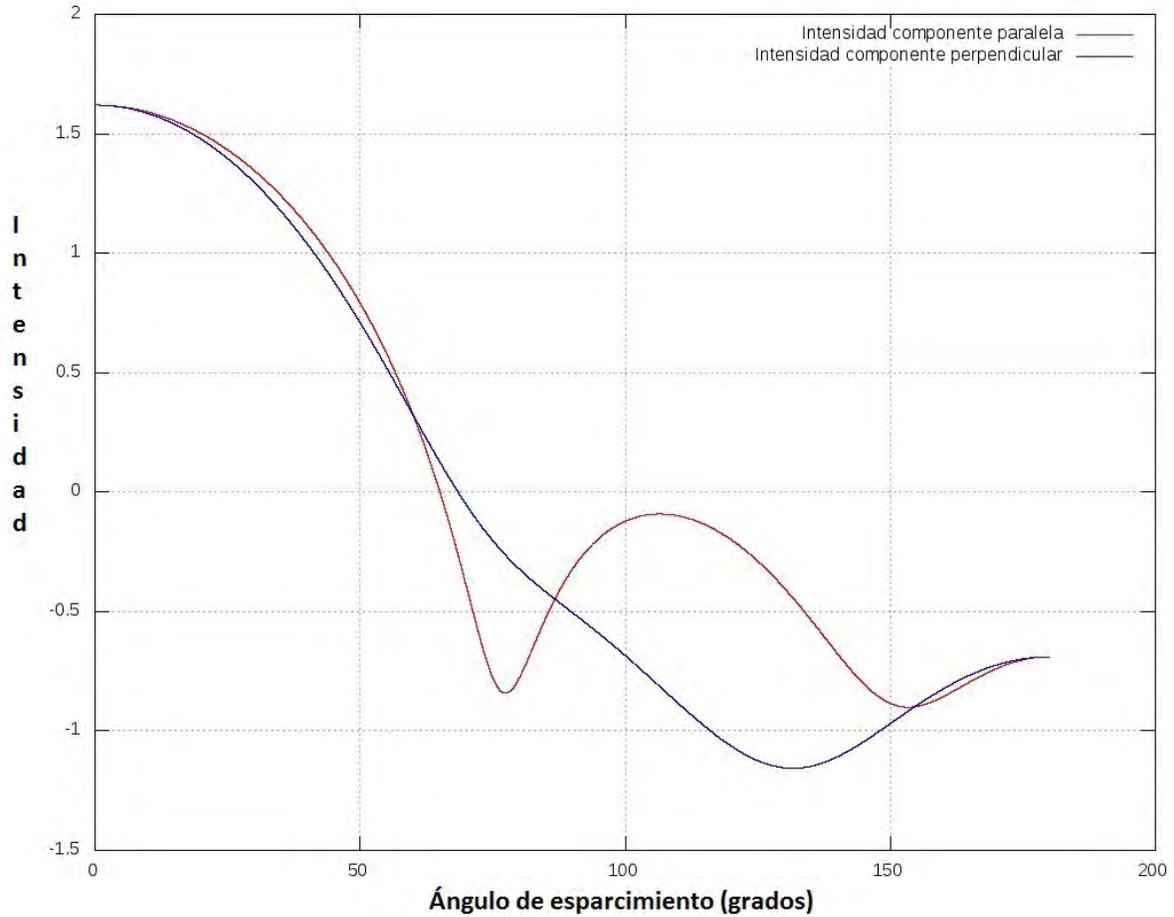


Figura 2.2: *Esparcimiento por una esfera con  $x = 3$  y  $m = 1.33 + 10^{-8}i$ .*

gota de agua con un parámetro de tamaño  $x = 3$  iluminada por un haz de luz con una longitud de onda  $\lambda = 0.55\mu m$ . A esta longitud de onda el índice de refracción del agua es complejo  $1.33 + 10^{-8}i$ . El resultado del cálculo de computo usando el programa del apéndice A, se muestra en la figura 2.2, donde se gráfica los logaritmos correspondientes a las intensidades esparcidas asociadas a las componentes perpendicular y paralela respectivamente en función del ángulo de esparcimiento  $\theta$  de  $0^\circ$  a  $180^\circ$ .



# Capítulo 3

## Modelo teórico

Ya con los fundamentos y antecedentes teóricos descritos previamente en el capítulo 2, contamos entonces con las bases teóricas necesarias para entender la segunda parte del desarrollo teórico presentado en este trabajo de investigación la cual se discute dentro de este capítulo. El propósito de éste, es la de exteriorizar los dos modelos teóricos que nos permitan determinar los coeficientes de reflexión y transmisión de luz coherente para una monocapa de partículas monodispersas y para una monocapa de partículas polidispersas; tomando en consideración, además, que este par de monocapas se depositaron sobre la superficie de un sustrato plano y están inmersas en un medio (aire en este caso). El presente capítulo se divide en cuatro secciones principales, en la primera de ellas se describe, como un repaso, los coeficientes de reflexión y transmisión de Fresnel para dos interfases y para una capa de material con espesor  $d$ . La siguiente sección contempla la descripción del primer modelo teórico para el caso de una monocapa de partículas monodispersas, seguido de su extensión a monocapas de partículas polidispersas. Finalmente en la última sección, con la teoría de múltiple reflexiones se deducen los coeficientes de reflexión y transmisión para una monocapa, de partículas monodispersas o polidispersas, depositada sobre un sustrato plano, de donde se obtienen, además, las expresiones de reflectancia- $R$  y transmitancia- $T$  para este par de modelos para un sistema: **Aire-Monocapa-Sustrato-Aire**. Las fórmulas finales de ambos modelos son relativamente simples, haciendo que sean convenientes para su uso en aplicaciones. Las notas que se presentan en este capítulo fueron tomadas de las siguientes referencias, [36], [37], [38], [39] y del artículo Ref. [1].

### 3.1. Reflexión y transmisión de ondas planas

En este apartado consideraremos la reflexión y transmisión de una interfase plana simple y posteriormente, consideraremos la reflexión y transmisión de una capa de material con espesor finito. Para ambos casos consideraremos que el medio de incidencia no tiene pérdidas, es decir, el índice de refracción es real. Se supondrá además, que tanto la permitividad eléctrica como la permeabilidad magnética son diferentes del vacío para los diferentes medios. Al final podemos hacer la permeabilidad magnética relativa de todos los medios igual a uno

y obtener así las expresiones usadas en óptica. Las ecuaciones enunciadas en la sección 2.1, nos permiten deducir las ecuaciones de Maxwell particulares para la reflexión y transmisión de ondas planas al incidir sobre una superficie plana entre dos medios isotrópicos y lineales. Para ello suponemos que no hay corrientes externas y que las corrientes inducidas vienen de la polarización, magnetización del medio y de corrientes a través de la conductividad del medio, así que

$$\vec{J} = \vec{J}_{ind} = \sigma \vec{E} + \frac{\partial \vec{P}}{\partial t} + \nabla \times \vec{M} \quad (3.1)$$

Ahora si las ondas incidentes son campos monocromáticos con dependencia  $e^{-i\omega t}$ , las derivadas parciales temporales se reemplazan por un factor de  $-i\omega$ , por lo que la ley de Ampere-Maxwell, 2.4, y sustituyendo 3.1 en ésta, se puede escribir como,

$$\nabla \times \vec{B}(\vec{r}, \omega) = \mu_o \left[ \sigma \vec{E}(\vec{r}, \omega) - i\omega \vec{P}(\vec{r}, \omega) + \nabla \times \vec{M}(\vec{r}, \omega) \right] - i\omega \varepsilon_o \mu_o \vec{E}(\vec{r}, \omega). \quad (3.2)$$

Pero el campo magnético es,

$$\vec{B} = \mu_o (\vec{H} + \vec{M}), \quad (3.3)$$

y la susceptibilidad magnética  $\chi_h(\omega)$  está dada por la expresión,

$$\vec{M} = \mu_o \chi_h(\omega) \vec{H}, \quad (3.4)$$

donde la polarizabilidad es,

$$\vec{P}(\vec{r}, \omega) = \varepsilon_o \chi_e(\omega) \vec{E}(\vec{r}, \omega). \quad (3.5)$$

Sustituyendo 3.3, 3.4 y 3.5 en la expresión 3.2, esta ecuación se puede reducir a,

$$\nabla \times \vec{H}(\vec{r}, \omega) = (\sigma - i\omega \varepsilon_o \chi_e(\omega) - i\omega \varepsilon_o) \vec{E}(\vec{r}, \omega), \quad (3.6)$$

factorizando  $-i\omega \varepsilon_o$  de la expresión anterior, podemos reescribirla como,

$$\nabla \times \vec{H}(\vec{r}, \omega) = -i\omega \varepsilon_o \left( 1 + \chi_e + i \frac{\sigma}{\omega \varepsilon_o} \right) \vec{E}(\vec{r}, \omega). \quad (3.7)$$

Si la permitividad eléctrica relativa del medio la definimos como,

$$\varepsilon_r = 1 + \chi_e + i \frac{\sigma}{\omega \varepsilon_o}, \quad (3.8)$$

entonces sustituyendo 3.8 en 3.7, se reduce la expresión a,

$$\nabla \times \vec{H}(\vec{r}, \omega) = -i\omega \varepsilon_o \varepsilon_r \vec{E}(\vec{r}, \omega) = -i\omega \varepsilon \vec{E}(\vec{r}, \omega), \quad (3.9)$$

donde  $\varepsilon = \varepsilon_o \varepsilon_r$  es la permitividad eléctrica del medio. Por otro lado, de la expresión 3.3 y 3.4, vemos que,

$$\begin{aligned}\vec{B} &= \mu_o(\vec{H} + \vec{M}) = \mu_o[\vec{H}(\vec{r}, w) + \mu_o\chi_h(w)\vec{H}(\vec{r}, w)] = \\ &= \mu_o[1 + \mu_o\chi_h(w)]\vec{H}(\vec{r}, w) = \mu_o\mu_r\vec{H}(\vec{r}, w) = \mu\vec{H}(\vec{r}, w),\end{aligned}\quad (3.10)$$

donde  $\mu = \mu_o[1 + \mu_o\chi_h(w)] = \mu_o\mu_r$  es la permeabilidad magnética del medio, siendo  $\mu_r = 1 + \mu_o\chi_h(w)$ , la permeabilidad magnética relativa del medio. Sustituyendo 3.10 en la expresión 2.2, tenemos que,

$$\nabla \cdot \vec{B}(\vec{r}, w) = \nabla \cdot \mu\vec{H}(\vec{r}, w) = 0. \quad (3.11)$$

De igual manera, sustituyendo 3.10 en la ley de inducción de Faraday 2.3, se tiene,<sup>1</sup>

$$\nabla \times \vec{E}(\vec{r}, w) = iw\vec{B}(\vec{r}, w) = iw\mu\vec{H}(\vec{r}, w). \quad (3.12)$$

Por otra parte, la ecuación de continuidad de la carga a frecuencia  $w$  la podemos escribir como,

$$\nabla \cdot \vec{J} = \nabla \cdot \left[ \sigma\vec{E}(\vec{r}, w) - iw\vec{P}(\vec{r}, w) + \nabla \times \vec{M}(\vec{r}, w) \right] = iw\rho. \quad (3.13)$$

Pero la divergencia de un rotacional es cero, además sustituyendo 3.5 en la expresión 3.13, y despejando la densidad de carga, obtenemos lo siguiente,

$$\rho = \nabla \cdot \left( \frac{\sigma}{iw} - \varepsilon_o\chi_e \right) \vec{E}(\vec{r}, w). \quad (3.14)$$

Pero de la expresión 2.1, y sustituyendo en ésta la densidad de carga 3.14, tenemos lo siguiente,

$$\nabla \cdot \vec{E}(\vec{r}, w) = \frac{\rho}{\varepsilon_o} = \frac{1}{\varepsilon_o} \nabla \cdot \left( \frac{\sigma}{iw} - \varepsilon_o\chi_e \right) \vec{E}(\vec{r}, w), \quad (3.15)$$

finalmente la expresión anterior la podemos reescribir como,

$$\nabla \cdot \varepsilon_o \left( 1 + \chi_e + \frac{i\sigma}{w\varepsilon_o} \right) \vec{E}(\vec{r}, w) = \nabla \cdot \varepsilon_o\varepsilon_r \vec{E}(\vec{r}, w) = \nabla \cdot \varepsilon \vec{E}(\vec{r}, w) = 0, \quad (3.16)$$

donde se ha utilizado la expresión 3.8 para esta última. En resumen, las ecuaciones de Maxwell para una onda plana incidente en una interfaz plana, en ausencia de densidad de carga y corriente externa son las expresiones 3.9, 3.11, 3.12 y 3.16.

Las ecuaciones de Maxwell, 3.9, 3.11, 3.12 y 3.16, definidas anteriormente sólo se aplican para regiones en el espacio dentro de los cuales las propiedades físicas del medio son continuas. Pero en la óptica existen situaciones en las cuales las propiedades cambian abruptamente a través de una o más superficies. Para ello es necesario, entonces, derivar las relaciones que describan la transición a través de una superficie discontinua. Consideremos una capa delgada  $T$ , que sustituya a nuestra superficie discontinua, dentro de la cual  $\varepsilon$  y  $\mu$  varíen abruptamente sus valores, pero de manera continua cerca de  $T$  (de un lado y de otro), ver

---

<sup>1</sup>Recordemos que al tener una onda monocromática, la derivadas parciales de tiempo se sustituyen por un factor de  $-iw$ .

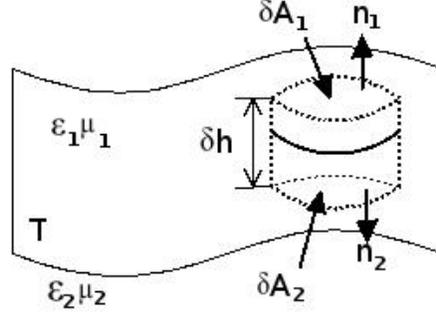


Figura 3.1: Derivación de las condiciones de frontera para las componentes normales del campo magnético y del campo eléctrico.

figura 3.1. Además, se construye un pequeño cilindro que atraviesa la capa delgada  $T$ , cuyas áreas  $\delta A_1$  y  $\delta A_2$  están en la parte superior e inferior de ésta. Ya que  $\vec{B}$  y sus derivadas pueden ser asumidas como funciones continuas a través de la superficie cilíndrica, podemos aplicar el teorema de Gauss de la divergencia de  $\vec{B}$  a través del volumen del cilindro y obtener,

$$\int \nabla \cdot \vec{B} dV = \int \vec{B} \cdot \hat{n} dS = 0, \quad (3.17)$$

donde la segunda integral es tomada de la superficie del cilindro, y  $\hat{n}$  es el vector unitario normal a esta.

Ya que  $\delta A_1$  y  $\delta A_2$  son muy pequeñas, entonces  $\vec{B}$  se considera constante de ambos lados de la capa delgada sobre estas superficies, por lo que la integral, 3.17, puede ser reemplazada por,

$$\vec{B}^{(1)} \cdot \hat{n}_1 \delta A_1 + \vec{B}^{(2)} \cdot \hat{n}_2 \delta A_2 + \text{contribuciones de las paredes} = 0. \quad (3.18)$$

De la figura 3.1, si la altura,  $\delta h$ , tiende a cero, entonces las contribuciones del campo magnético en las paredes se hacen cero, además las áreas de las tapas del cilindro tienen la misma superficie, entonces  $\delta A_1 = \delta A_2 = \delta A$ ; así la expresión 3.18 se reduce a,

$$[\vec{B}^{(1)} \cdot \hat{n}_1 + \vec{B}^{(2)} \cdot \hat{n}_2] \delta A = 0, \quad (3.19)$$

pero  $\hat{n}_1 = -\hat{n}_2 = \hat{n}_{12}$ , simplificado la expresión anterior tenemos finalmente,

$$\hat{n}_{12} \cdot [\vec{B}^{(2)} - \vec{B}^{(1)}] = 0, \quad (3.20)$$

es decir, *la componente normal del campo magnético es continua a través de la superficie discontinua.*

El campo eléctrico puede ser tratado de manera similar, al aplicar el teorema de Gauss para el campo eléctrico, 3.16, tenemos,

$$\int \nabla \cdot \vec{E} dV = \int \vec{E} \cdot \hat{n} dS = \frac{1}{\epsilon} \int \rho dV. \quad (3.21)$$

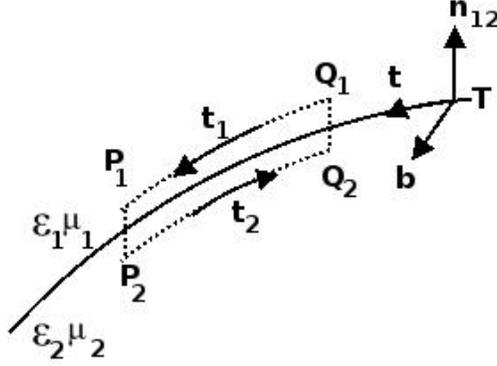


Figura 3.2: Derivación de las condiciones de frontera para las componentes tangenciales del campo magnético y del campo eléctrico.

Dado que las áreas  $\delta A_1$  y  $\delta A_2$  son muy pequeñas y próximas entre si (pues  $\delta h \rightarrow 0$ ), la carga total permanece finita, por lo que la densidad de carga volumétrica llega a ser infinita, en otras palabras se tiene que

$$\lim_{\delta h \rightarrow 0} \int \rho dV = \int \hat{\rho} dA, \quad (3.22)$$

sustituyendo 3.22 en la expresión 3.21, y simplificando ésta se obtiene lo siguiente,

$$\vec{E}^{(1)} \cdot \hat{n}_1 \delta A_1 + \vec{E}^{(2)} \cdot \hat{n}_2 \delta A_2 = \frac{1}{\varepsilon} \hat{\rho} \delta A, \quad (3.23)$$

pero  $\hat{n}_1 = -\hat{n}_2 = \hat{n}_{12}$ , simplificado la expresión anterior tenemos finalmente,

$$\hat{n}_{12} \cdot [\vec{E}^{(2)} - \vec{E}^{(1)}] = \hat{\rho}/\varepsilon, \quad (3.24)$$

es decir, *en presencia de carga superficial sobre la capa delgada, la componente normal del campo eléctrico cambia abruptamente a través de la superficie, por una cantidad igual a  $\hat{\rho}/\varepsilon$ .*

Respecto a las componentes tangenciales, consideremos una curva rectangular con lados paralelos y perpendiculares a una capa delgada  $T$ , que sustituye a nuestra superficie discontinua, como se muestra en la Fig. 3.2. Sea  $\hat{b}$  un vector unitario perpendicular al plano del rectángulo. Al aplicar el teorema de Stokes a la ley de inducción de Faraday (3.12), tenemos la siguiente expresión,

$$\int \nabla \times \vec{E} \cdot \hat{b} dS = \int \vec{E} \cdot d\vec{l} = i\omega\mu \int \vec{H} \cdot \hat{b} dS. \quad (3.25)$$

De la figura 3.2, si las longitudes  $P_1Q_1 = \delta s_1$  y  $P_2Q_2 = \delta s_2$  son pequeñas, el campo eléctrico  $\vec{E}$  puede ser reemplazado por valores constantes  $\vec{E}^{(1)}$  y  $\vec{E}^{(2)}$  a lo largo de estos segmentos. Por otra parte,  $dS = \delta l \delta h$ , y en efecto, cuando  $\delta h \rightarrow 0$ , la tercera integral de 3.25 se hace cero, además  $\delta s_1 = \delta s_2 = \delta s$  es el elemento de línea que intersecta a la superficie cuando la altura del rectángulo tiende a cero. Por lo que tenemos finalmente,

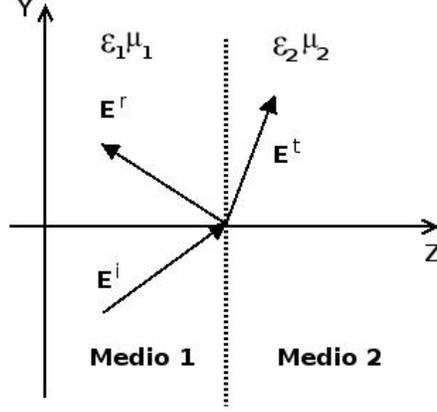


Figura 3.3: Geometría específica para la deducción de los coeficientes de reflexión y transmisión de Fresnel para una interfase plana simple.

$$\vec{E}^{(1)} \cdot \hat{t}_1 \delta s_1 + \vec{E}^{(2)} \cdot \hat{t}_2 \delta s_2 = [\vec{E}^{(1)} \cdot \hat{t}_1 + \vec{E}^{(2)} \cdot \hat{t}_2] \delta s = 0. \quad (3.26)$$

Si  $\hat{t}$  es el vector tangente unitario a lo largo de la superficie, entonces (véase figura 3.2)  $\hat{t}_1 = -\hat{t} = -\hat{b} \times \hat{n}_{12}$ ,  $\hat{t}_2 = \hat{t} = \hat{b} \times \hat{n}_{12}$ , sustituyendo esto en 3.26 obtenemos,

$$\hat{b} \cdot [\hat{n}_{12} \times (\vec{E}^{(2)} - \vec{E}^{(1)})] = 0. \quad (3.27)$$

Ya que la orientación del rectángulo y consecuentemente el vector unitario  $\hat{b}$  son arbitrarios, se sigue que,

$$\hat{n}_{12} \times [\vec{E}^{(2)} - \vec{E}^{(1)}] = 0, \quad (3.28)$$

es decir, *la componente tangencial del campo eléctrico es continuo a través de la superficie.*

Finalmente, para la componente tangencial del vector magnético  $\vec{H}$ , aplicando el mismo procedimiento anterior se tiene que,

$$\hat{n}_{12} \times [\vec{H}^{(2)} - \vec{H}^{(1)}] = \mu \hat{j} \quad (3.29)$$

La expresión 3.29 *menciona que la presencia de una densidad de corriente superficial  $\hat{j}$ , origina cambios abruptos del campo magnético  $\vec{H}$ .*

Abordando el tema de los coeficientes de reflexión y transmisión de Fresnel para una interfase plana, consideremos una onda viajando en el plano  $YZ$ , como se muestra en la figura 3.3, y supongamos que ésta incide sobre una interfase en  $(z = z_1)$  a un ángulo de  $\theta_i$  (respecto a la normal). El vector del campo eléctrico incidente está dado como,

$$\vec{E}^i = E_o e^{ik_y^i y + ik_z^i z} \hat{e}_i, \quad (3.30)$$

el vector de onda tiene componentes  $k_y^i = k_1 \sin \theta_i = k_1 \cos \theta_i$ , donde  $k_1 = n_1 k_o$ , con  $n = (\epsilon)^{1/2}$ . Es claro que la onda eléctrica incidente es acompañada por una onda electromagnética dada por,

$$\vec{H}^i = H_o e^{ik_y^i y + ik_z^i z} \hat{h}_i. \quad (3.31)$$

De donde se puede constatar que  $\hat{e}_i \times \hat{h}_i = \hat{k}_i$  y  $H_o = \sqrt{\varepsilon_1/\mu_1} E_o$ . Las ecuaciones de onda dadas por 3.30 y 3.31 satisfacen la ecuación de Helmholtz en el medio 1, pero no la satisfacen en el medio 2. Por lo tanto, no podemos extender la onda (1) y (2) en el interior del medio (2), pues ésta no satisface la ecuación de Helmholtz en dicho medio. Por lo que, debemos suponer una onda transmitida en el medio dos distinta a la onda incidente. No es difícil darse cuenta que entonces debemos suponer una onda reflejada en el medio 1 de manera que se puedan satisfacer las condiciones a la frontera en la interfase. Los campos reflejado y transmitido deben a su vez ser ondas planas para poder satisfacer las condiciones de frontera todo a lo largo de la interfase. Tenemos:

$$\vec{E}^r = r E_o e^{ik_y^{(1)} y - ik_z^{(1)} z} \hat{e}_r, \quad (3.32)$$

$$\vec{E}^t = t E_o e^{ik_y^t y + ik_z^t z} \hat{e}_t. \quad (3.33)$$

Trabajaremos el caso de polarización  $TE$  asumiendo que tanto la permitividad eléctrica como la permeabilidad magnética son diferentes en ambos medios. Una vez teniendo este resultado es fácil obtener el otro por simetría en las ecuaciones. En nuestra geometría, ver figura 3.3, el vector eléctrico es en dirección  $\hat{e}_i = \hat{e}_r = \hat{e}_t = \hat{e}_x$ , por lo que las expresiones 3.30, 3.32 y 3.33 se pueden reescribir como

$$\vec{E}^i = E_o e^{ik_y^{(1)} y + ik_z^{(1)} z} \hat{e}_x, \quad (3.34)$$

$$\vec{E}^r = r E_o e^{ik_y^{(1)} y - ik_z^{(1)} z} \hat{e}_x, \quad (3.35)$$

$$\vec{E}^t = t E_o e^{ik_y^t y + ik_z^t z} \hat{e}_x. \quad (3.36)$$

De estas expresiones es necesario deducir los coeficientes  $r$  y  $t$ . Para ello aplicamos las condiciones a la frontera Exps. 3.28 y 3.20. Para satisfacer estas expresiones a lo largo de la interfase y todo momento del tiempo es necesario que los campos tengan la misma dependencia sobre las variables  $x$  y  $y$ ; esto implica:  $k_y^i = k_y^r = k_y^t$ . Así pues, de la primera condición, 3.28, obtenemos  $(\vec{E}^i + \vec{E}^r)_{z=z_1} = (\vec{E}^t)_{z=z_1}$ , expresión que se reduce a,

$$1 + r e^{-2ik_z^i z_1} = t. \quad (3.37)$$

Para aplicar la segunda condición a la frontera, calculamos la componente tangencial de  $\vec{H}$ , es decir,  $H_y$  en términos del campo eléctrico usando la tercera ecuación de Maxwell 3.12,  $\nabla \times \vec{E} = -\mu \frac{\partial \vec{H}}{\partial t} = iw\mu \vec{H}$ . De donde se obtiene

$$H_y = \frac{i}{w\mu} \frac{\partial E_x}{\partial z}. \quad (3.38)$$

Dado que  $H_y$  es continua a través de la interfase (y  $\omega$  es igual de ambos lados de la interfase), tenemos que

$$\left(\frac{1}{\mu} \frac{\partial E_x}{\partial z}\right)_{z=z_1^-} = \left(\frac{1}{\mu} \frac{\partial E_x}{\partial z}\right)_{z=z_1^+}. \quad (3.39)$$

Aplicando esta ecuación a 3.34, 3.35, y 3.36, se obtiene

$$\frac{k_z^i}{\mu_1} - r \frac{k_z^i}{\mu_1} e^{-2ik_z^i z_1} = t \frac{k_z^t}{\mu_2}. \quad (3.40)$$

Resolviendo el sistema de ecuaciones 3.37 y 3.40 obtenemos

$$r e^{-2ik_z^i z_1} = \frac{\mu_2 k_z^i - \mu_1 k_z^t}{\mu_2 k_z^i + \mu_1 k_z^t} \quad (3.41)$$

$$t = \frac{2\mu_2 k_z^i}{\mu_2 k_z^i + \mu_1 k_z^t} \quad (3.42)$$

Estos son los coeficientes de reflexión y transmisión de Fresnel para la polarización  $TE$ . El factor de fase que aparece en nuestro resultado, Exp. 3.41, generalmente no aparece en el coeficiente de reflexión de Fresnel en la mayoría de los textos. Generalmente se supone que el origen de coordenadas esta en la interfase, es decir,  $z_1 = 0$ , lo que haría que el factor de fase  $e^{-2ik_z^i z_1} = 1$ . Finalmente los coeficientes de reflexión y transmisión para una interfase plana simple para la polarización  $TE$ , en  $z_1 = 0$ , son respectivamente

$$r_{12}^{TE} = \frac{\mu_2 k_z^i - \mu_1 k_z^t}{\mu_2 k_z^i + \mu_1 k_z^t}, \quad (3.43)$$

y

$$t_{12}^{TE} = \frac{2\mu_2 k_z^i}{\mu_2 k_z^i + \mu_1 k_z^t}. \quad (3.44)$$

Para obtener los resultados con polarización  $TM$ , podríamos repetir toda el álgebra hecha hasta ahora, pero ahora trabajando con el vector magnético  $\vec{H}$ , el cual en este caso tiene sólo componente en la dirección  $x$ . Para aplicar la condición a la frontera sobre la continuidad de la componente tangencial del campo eléctrico 3.20, usaríamos la primera ecuación de Maxwell, 3.9,  $\nabla \times \vec{H}(\vec{r}, w) = -iw\epsilon \vec{E}(\vec{r}, w)$ . Lo cual nos daría la condición a la frontera,

$$\left(\frac{1}{\epsilon} \frac{\partial H_x}{\partial z}\right)_{z=z_1^-} = \left(\frac{1}{\epsilon} \frac{\partial H_x}{\partial z}\right)_{z=z_1^+} \quad (3.45)$$

No es difícil darse cuenta que toda el álgebra es la misma pero intercambiando  $E_x$  por  $-H_x$  y  $\epsilon_n$  por  $\mu_n$  ( $n=1$  o  $2$ ). En este caso encontramos el coeficiente de reflexión y transmisión para el campo magnético. El coeficiente de reflexión para el campo magnético y para el campo eléctrico es el mismo porque que la relación entre la amplitud de la onda eléctrica y magnética

es la misma para la onda incidente y reflejada ya que están en el mismo medio. Su expresión es

$$r_{12}^{TM} = \frac{\varepsilon_2 k_z^i - \varepsilon_1 k_z^t}{\varepsilon_2 k_z^i + \varepsilon_1 k_z^t} \quad (3.46)$$

No es el caso para el coeficiente de transmisión. Generalmente el coeficiente de transmisión lo referimos al campo eléctrico y tenemos que tomar en cuenta que la relación entre la magnitud del campo magnético y el campo eléctrico en una onda plana es distinto en diferentes medios. En general tenemos:  $E_o = (\mu/\varepsilon)^{1/2} H_o$ . De manera que tenemos que,

$$t_E = \frac{E_t}{E_o} = \frac{\left[ \left( \frac{\mu_1}{\varepsilon_1} \right)^{1/2} H_t \right]}{\left[ \left( \frac{\mu_2}{\varepsilon_2} \right)^{1/2} H_o \right]} = \left( \frac{\mu_1 \varepsilon_2}{\mu_2 \varepsilon_1} \right)^{1/2} t_H$$

es decir,

$$t_{E_{12}}^{TM} = \sqrt{\frac{\mu_1 \varepsilon_2}{\mu_2 \varepsilon_1}} t_H^M = \sqrt{\frac{\mu_1 \varepsilon_2}{\mu_2 \varepsilon_1}} \frac{2\varepsilon_2 k_z^i}{\varepsilon_2 k_z^i + \varepsilon_1 k_z^t} \quad (3.47)$$

donde los coeficientes dan la relación entre la amplitud de la onda eléctrica reflejada y transmitida a la amplitud de la onda eléctrica incidente y,

$$k_z^t = k_o \sqrt{\varepsilon_2 \mu_2 - \varepsilon_1 \sin^2 \theta_i} \quad y \quad k_z^i = k_o n_1 \cos \theta_i \quad (3.48)$$

En caso de que el medio 2 sea conductor usamos

$$\varepsilon_2 \rightarrow \varepsilon_2 + i \frac{\sigma}{\varepsilon_o \omega}$$

Consideremos una onda eléctrica viajando en el plano  $YZ$ , como se muestra en la figura 3.4, y supongamos que ésta incide sobre un material de espesor  $d$  en ( $z = z_1$ ) a un ángulo de  $\theta_i$  (respecto a la normal). El vector del campo eléctrico incidente está dado como,

$$\vec{E}^i = E_o e^{ik_y^i y + ik_z^i z} \hat{e}_i, \quad (3.49)$$

y el vector del campo magnético incidente es,

$$\vec{H}^i = H_o e^{ik_y^i y + ik_z^i z} \hat{h}_i. \quad (3.50)$$

donde  $\hat{e}_i \times \hat{h}_i = \hat{k}^i$  y  $H_o = \sqrt{\varepsilon_1/\mu_1} E_o$ . Los campos en los medios 1, 2 y 3 satisfacen la ecuación de Helmholtz correspondiente a las constantes del medio. Pero no podemos extender el campo incidente en el interior del medio 2 y 3, pues éste no satisface la ecuación de Helmholtz en dichos medios. Dado que no hay dependencia en  $x$  en el campo incidente, no la puede haber en los otros campos. Nuevamente consideraremos el caso de polarización  $TE$  en detalle y sólo daremos el resultado final para la polarización  $TM$ . Podemos postular los siguientes campos eléctricos en los tres medios,

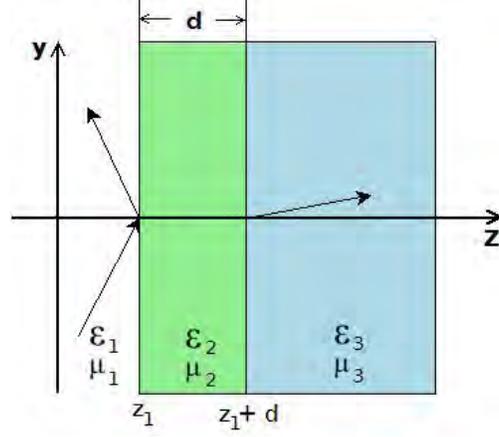


Figura 3.4: Geometría específica para la deducción de los coeficientes de reflexión y transmisión de Fresnel para una capa de material de espesor  $d$ .

$$\vec{E}^i = E_o e^{ik_y^{(1)}y + ik_z^{(1)}z} \hat{e}_x, \quad (3.51)$$

$$\vec{E}^r = r E_o e^{ik_y^{(1)}y - ik_z^{(1)}z} \hat{e}_x, \quad (3.52)$$

$$\vec{E}^a = a E_o e^{ik_y^{(2)}y + ik_z^{(2)}z} \hat{e}_x, \quad (3.53)$$

$$\vec{E}^b = b E_o e^{ik_y^{(2)}y - ik_z^{(2)}z} \hat{e}_x, \quad (3.54)$$

$$\vec{E}^t = t E_o e^{ik_y^t y + ik_z^t z} \hat{e}_x. \quad (3.55)$$

$\vec{E}^i$  y  $\vec{E}^r$  son el campo incidente y reflejado y al igual que antes se encuentran en el medio 1.  $\vec{E}^a$  y  $\vec{E}^b$  son los campos en el interior de la capa de material (medio 2). La fase de  $\vec{E}^a$  viaja en la dirección  $+z$ , y la fase de  $\vec{E}^b$  en dirección  $-z$ .  $\vec{E}^t$  es el campo transmitido al medio 3. Los coeficientes de amplitud relativa al campo incidente,  $r$ ,  $a$ ,  $b$ , y  $t$ , son constantes a determinar como función del ángulo de incidencia y las constantes de los medios  $r$  y  $t$  son los coeficientes de reflexión y transmisión que queremos resolver.

Debemos de aplicar las condiciones a la frontera en  $z = z_1$  y en  $z_2 = z_1 + d$ . Las componentes tangenciales de los campos eléctrico y magnético son continuas a través de las dos interfases. Nuevamente, para que se satisfagan las condiciones de frontera a lo largo de todas las interfases, requerimos que la dependencia en el plano  $XY$  sea la misma para todos los campos. Por lo tanto,  $k_y^{(1)} = k_y^{(2)} = k_y^{(3)}$ . Por otra parte, la continuidad de la componente tangencial del campo eléctrico da,

$$(E_x^i + E_x^r)_{z=z_1} = (E_x^a + E_x^b)_{z=z_1}, \quad (3.56)$$

$$(E_x^a + E_x^b)_{z=z_1} = (E_x^t)_{z=z_2}, \quad (3.57)$$

ya que todo el campo eléctrico es tangencial (en dirección  $x$ ). La continuidad de la componente tangencial del campo magnético resulta en que el producto  $\frac{1}{\mu} \frac{\partial E_x}{\partial z}$ , es continuo a través de las dos interfaces; entonces,

$$\frac{1}{\mu_1} \left( \frac{\partial E_x^i}{\partial z} + \frac{\partial E_x^r}{\partial z} \right)_{z=z_1} = \frac{1}{\mu_2} \left( \frac{\partial E_x^a}{\partial z} + \frac{\partial E_x^b}{\partial z} \right)_{z=z_1} \quad (3.58)$$

$$\frac{1}{\mu_2} \left( \frac{\partial E_x^a}{\partial z} + \frac{\partial E_x^b}{\partial z} \right)_{z=z_1+d} = \frac{1}{\mu_3} \left( \frac{\partial E_x^t}{\partial z} \right)_{z=z_1+d} \quad (3.59)$$

Sustituyendo las Exps. 3.52-3.55 en las Exps. 3.56-3.59, obtenemos

$$e^{ik_{z1}z_1} + re^{-ik_{z1}z_1} = ae^{ik_{z2}z_1} + be^{-ik_{z2}z_1} \quad (3.60)$$

$$ae^{ik_{z2}(z_1+d)} + be^{-ik_{z2}(z_1+d)} = te^{ik_{z3}(z_1+d)} \quad (3.61)$$

$$\frac{k_{z1}}{\mu_1} [re^{-ik_{z1}z_1} - e^{ik_{z1}z_1}] = \frac{k_{z2}}{\mu_2} [be^{-ik_{z2}z_1} - ae^{ik_{z2}z_1}] \quad (3.62)$$

$$\frac{k_{z2}}{\mu_2} [be^{-ik_{z2}(z_1+d)} - ae^{ik_{z2}(z_1+d)}] = -\frac{k_{z3}}{\mu_3} te^{ik_{z3}(z_1+d)} \quad (3.63)$$

Podemos resolver el sistema de ecuaciones 3.60-3.63 sin mucha dificultad por simple substitución de una ecuación en otra. De donde se obtiene,

$$r = e^{2ik_{z1}z_1} \frac{r_{12} + r_{23}e^{2ik_{z2}d}}{1 + r_{12}r_{23}e^{2ik_{z2}d}}. \quad (3.64)$$

Esta expresión es el coeficiente de reflexión compuesto para la capa de espesor  $d$  para un campo con polarización  $TE$ . El factor de fase puede ser omitido, si el origen del sistema se establece en  $z = z_1$ . De esta expresión,

$$r_{12} = \left( \frac{\mu_2 k_{z1} - \mu_1 k_{z2}}{\mu_2 k_{z1} + \mu_1 k_{z2}} \right),$$

$$r_{23} = \left( \frac{\mu_3 k_{z2} - \mu_2 k_{z3}}{\mu_3 k_{z2} + \mu_2 k_{z3}} \right).$$

Estas dos últimas expresiones corresponden a los coeficientes de reflexión de Fresnel en polarización  $TE$  para las interfaces 1-2 y 2-3, respectivamente. De la igual forma con este sistema de ecuaciones 3.60-3.63, obtenemos el coeficiente de transmisión compuesto para la capa de espesor  $d$ , dado por

$$t = \left[ \frac{(1 + r_{23})(1 + re^{-2ik_{z1}z_1})}{1 + r_{23}e^{2ik_{z2}d}} \right] e^{i(k_{z1}-k_{z3})z_1} e^{i(k_{z2}-k_{z3})d} \quad (3.65)$$

donde  $r_{12}$  y  $r_{13}$  están dados arriba como los coeficientes de reflexión de Fresnel de las interfaces 1-2 y 2-3 respectivamente, ambos para la polarización TE. Además,  $k_{z1} = k_o n_1 \cos \theta_i$ ,  $k_{z2} = k_o \sqrt{\varepsilon_2 \mu_2 - \varepsilon_1 \sin^2 \theta_i}$ , y  $k_{z3} = k_o \sqrt{\varepsilon_3 \mu_3 - \varepsilon_1 \sin^2 \theta_i}$ . Para la polarización TM se pueden seguir los mismos pasos pero trabajando con la onda magnética, ya que en esta polarización el vector magnético sólo tiene componente en  $x$ . Así obtenemos los mismos resultados salvo que los coeficientes de reflexión  $r_{12}$  y  $r_{23}$  corresponden a la polarización TM, al igual que con el coeficiente de transmisión para la onda magnética,  $t_H^{TM}$ . Si deseamos obtener la reflectancia  $R$  para este par de sistemas con polarización TE, basta con sustituir el coeficiente de reflexión en la siguiente expresión,

$$R^{TE} = |r_E^{TE}|^2, \quad (3.66)$$

y la transmitancia del sistema, para polarización TE es,

$$T^{TE} = |t_E^{TE}|^2 \frac{\mu_1}{k_z^i} \operatorname{Re} \left( \frac{k_z^t}{\mu_t} \right). \quad (3.67)$$

Para el caso en que se trabaje con polarización TM, la reflectancia y transmitancia respectiva es,

$$R^{TM} = |r_H^{TM}|^2, \quad (3.68)$$

y

$$T^{TM} = |t_H^{TM}|^2 \frac{\varepsilon_1}{k_z^i} \operatorname{Re} \left( \frac{k_z^t}{\varepsilon_t} \right). \quad (3.69)$$

## 3.2. Modelo teórico para los coeficientes de reflexión y transmisión de una monocapa de partículas monodispersas soportadas por una interfase plana

En esta sección describiremos las expresiones de forma cerrada para los coeficientes de reflexión y transmisión coherentes de una onda plana electromagnética monocromática incidiendo sobre un arreglo, en dos dimensiones, de partículas esféricas con posiciones aleatorias depositadas en un sustrato plano e inmersas en un medio. La deducción de este modelo se omitirá para este trabajo, pero en el siguiente artículo [1], se puede hallar la demostración de este modelo teórico, cuyo calculo se basa en la aproximación cuasi-cristalina (QCA). En la figura 3.5, se muestra el “esquema” de una monocapa de partículas monodispersas de índice de refracción  $n_p$  montadas sobre una superficie plana, de donde un haz monocromático se hace incidir a un ángulo  $\theta_i$  en una superficie plana entre el medio 1 y 2 con índices de

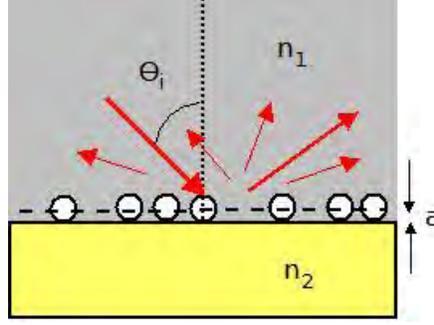


Figura 3.5: Ilustración de una monocapa montada sobre una superficie plana, en este caso las partículas están embebidas en el medio 1 con índice de refracción  $n_1$ . El plano de la monocapa se indica con la línea discontinua paralela a la interfase y separada por las partículas de radio  $a$ .

refracción  $n_1$  y  $n_2$ , respectivamente. Es claro, véase fig. 3.5, que las partículas se encuentra embebidas en el medio 1 y montadas sobre la superficie plana en el medio de incidencia. En este caso el coeficiente de reflexión debido a las múltiples reflexiones de la onda coherente entre el plano de la monocapa y la interfase plana está dado por la expresión

$$\begin{aligned}
 r_m(\theta_i) = & r_{coh}(\theta_i) + r_{12}(\theta_i)t_{coh}^2(\theta_i)e^{\beta_1} + \\
 & + r_{coh}(\theta_i)r_{12}^2(\theta_i)t_{coh}^2(\theta_i)e^{2\beta_1} + \\
 & + r_{coh}^2(\theta_i)r_{12}^3(\theta_i)t_{coh}^2(\theta_i)e^{3\beta_1} + \dots ,
 \end{aligned}$$

El subíndice  $m$  indica que se trata del caso monodisperso. La suma anterior se puede simplificar a

$$r_m(\theta_i) = r_{coh}(\theta_i) + \frac{r_{12}(\theta_i)t_{coh}^2(\theta_i)e^{\beta_1}}{1 - r_{12}(\theta_i)r_{coh}(\theta_i)e^{\beta_1}}. \quad (3.70)$$

Para el coeficiente de transmisión correspondiente a las múltiples transmisiones de la onda coherente entre el plano de la monocapa y la interfase plana viene dado por la expresión

$$\begin{aligned}
 t_m(\theta_i) = & t_{coh}(\theta_i)t_{12}(\theta_i)e^{\beta_0} + \\
 & + r_{coh}(\theta_i)t_{coh}(\theta_i)r_{12}(\theta_i)t_{12}(\theta_i)e^{\beta_0}e^{\beta_1} + \\
 & + r_{coh}^2(\theta_i)t_{coh}(\theta_i)r_{12}^2(\theta_i)t_{12}(\theta_i)e^{\beta_0}e^{2\beta_1} + \dots ,
 \end{aligned}$$

Expresión que se puede simplifica a

$$t_m(\theta_i) = \frac{t_{coh}(\theta_i)t_{12}(\theta_i)e^{\beta_0}}{1 - r_{12}(\theta_i)r_{coh}(\theta_i)e^{\beta_1}}. \quad (3.71)$$

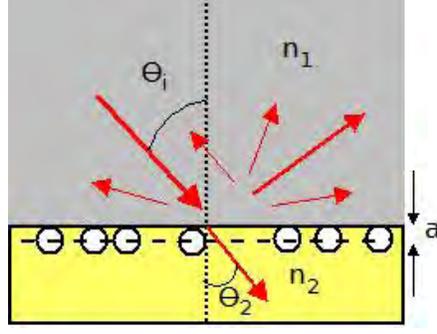


Figura 3.6: Ilustración de una monocapa absorbida en el medio 2, con índice de refracción  $n_2$ . Note que, el ángulo de incidencia para el plano de la monocapa es  $\theta_2$  y está relacionado con  $\theta_i$  por la ley de Snell entre el medio 1 y medio 2. El plano de la monocapa se indica con la línea discontinua paralela a la interfase y separada por las partículas de radio  $a$ .

De las expresiones 3.70 y 3.71, tenemos que  $r_{12}$  es el coeficiente de reflexión de Fresnel para la interfase entre los índices de refracción  $n_1$  y  $n_2$  evaluados a un ángulo de incidencia  $\theta_i$ ,  $\beta_1 = 2ik_oan_1 \cos \theta_i$ ,  $\beta_o = 0.5\beta_1$ ,  $r_{coh}$  y  $t_{coh}$  son los coeficientes de reflexión y transmisión coherentes de la monocapa aislada e independiente con las partículas embebidas en el medio 1, sus expresiones correspondientes son

$$r_{coh} = \frac{-\alpha S_j(\pi - 2\theta_i)}{1 + \alpha S(0) + \frac{\alpha^2}{4}[S^2(0) - S_j^2(\pi - 2\theta_i)]} \quad (3.72)$$

y

$$t_{coh} = \frac{1 - \frac{\alpha^2}{4}[S^2(0) - S_j^2(\pi - 2\theta_i)]}{1 + \alpha S(0) + \frac{\alpha^2}{4}[S^2(0) - S_j^2(\pi - 2\theta_i)]} \quad (3.73)$$

siendo,  $S(0)$ ,  $S_{j,a}(\pi - 2\theta_i)$  los coeficientes de la matriz de esparcimiento de Mie, con  $j = 1$  para polarización TE o,  $j = 2$  para polarización TM (véase la Sec. 2.3), y la expresión para  $\alpha$  es,

$$\alpha = \frac{2\Theta}{x_m^2 \cos \theta_i}, \quad (3.74)$$

Con  $\Theta$  como la fracción de cubierta de las partículas en la superficie del sustrato y  $x_m = k_m a = k_o n_1 a$ , es lo que llamamos parámetro de tamaño de la partícula, siendo  $a$  el radio de la partícula.

Como nota adicional de este trabajo, un caso interesante es el de tener a las partículas absorbidas en el medio 2 con un índice de refracción  $n_2$ , o mejor dicho incrustadas en este, como se puede observar en la figura 3.6. De igual manera que en el caso anterior, tenemos un haz monocromático incidiendo con un ángulo  $\theta_i$ , pero dado que las partículas se encuentran inmersas en el medio 2, la luz se ve refractada antes de incidir en la monocapa, por lo que el ángulo de incidencia para las partículas está dada por la ley de Snell como  $\theta_2 = \sin^{-1}[(n_1/n_2) \sin \theta_i]$ . Para este sistema el coeficiente de reflexión está dado por la expresión

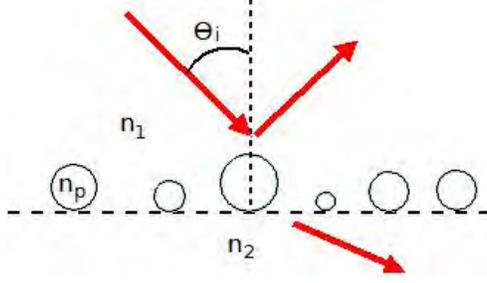


Figura 3.7: Ilustración de la vista lateral de una monocapa de partículas polidispersas montadas sobre una superficie imaginaria y embebidas en el medio 1 de índice de refracción  $n_1$ .

$$r(\theta_i) = \frac{r_{12}(\theta_i) + r_{coh}(\theta_2)e^{\beta_2}}{1 + r_{12}(\theta_i)r_{coh}(\theta_2)e^{\beta_2}}, \quad (3.75)$$

donde  $\beta_2 = 2ik_oan_2 \cos \theta_2$  y  $r_{coh}(\theta_2)$  es el coeficiente de reflexión coherente de una monocapa libre e independiente embebida en el medio 2, Exp. 3.72 evaluada en  $\theta_2$ .

### 3.3. Modelo teórico para los coeficientes de reflexión y transmisión de una monocapa de partículas polidispersas soportadas por una interfase plana

La idea de este apartado es extender el modelo presentado previamente para el caso de una monocapa constituida por partículas polidispersas depositadas sobre un sustrato plano y embebidas en un medio con índice de refracción  $n_1$ . Cabe señalar que este modelo es un caso general del caso monodisperso, pues en este se considera una función del tipo **log-normal** para la distribución de tamaños asociado a las partículas, y cuando el ancho de esta función tiende a cero, se reduce al caso monodisperso. El objetivo principal de este capítulo es el de deducir las expresiones matemáticas correspondientes a los coeficientes de reflexión y transmisión de luz coherente para una monocapa aleatoria de partículas polidispersas soportada por una superficie plana.

Como en el modelo previamente mencionado, vamos a considerar una monocapa independiente y aislada de partículas polidispersas, para después considerar los efectos de múltiple esparcimiento al ser depositada ésta sobre un sustrato plano. Por una monocapa independiente de partículas se quiere decir un ensamble de partículas embebidas en un medio homogéneo de índice de refracción  $n_m = n_1$ , localizadas al azar sobre un plano imaginario como se muestra en la figura 3.7. Nuestro análisis se restringe a partículas esféricas y se asume que todas ellas poseen el mismo índice de refracción,  $n_p$ . Supongamos que una onda plana incide sobre el sistema de partículas, cuya expresión viene dada por

$$\vec{E}^i(\vec{r}, t) = E_0 e^{(i\vec{k}^i \cdot \vec{r} - i\omega t)} \hat{e}_i, \quad (3.76)$$

donde  $\vec{K}^i = k_y^i \hat{a}_y + k_z^i \hat{a}_z$  con  $k_y^i = k_m \sin \theta_i$ ,  $k_z^i = k_m \cos \theta_i$  y,  $k_m = 2\pi n_m / \lambda$ , siendo  $\lambda$  la longitud de onda en el vacío y  $n_m$  el índice de refracción del medio donde se hallan depositadas las partículas, en este caso un medio homogéneo y no magnético. Los vectores  $\hat{a}_x$ ,  $\hat{a}_y$  y  $\hat{a}_z$  denotan los vectores unitarios a lo largo de los ejes cartesianos  $x$ ,  $y$  y  $z$ , respectivamente.

Recordemos que en el caso monodisperso, para el sistema de partículas, el centro de éstas estaba alineado con un plano imaginario, usualmente se hace referencia a este plano como el *plano de la monocapa*. En el caso de un sistema polidisperso, se asume que todas las partículas “tocan” un plano específico, pero ya que estas partículas tienen diferente tamaño (diferentes radios), sus centros no están alineados con el plano de la monocapa. En la Fig. 3.7 se indica el origen del sistema coordenado con una línea segmentada ( $z = 0$ ), que corresponde al plano de la monocapa para este sistema. El campo esparcido por cualquiera de las partículas, dicho de otra forma por la  $n$ -ésima partícula, puede ser escrito como

$$\vec{E}^s(\vec{r}) = \int d^3r' d^3r'' \overleftrightarrow{G}(\vec{r}, \vec{r}') \cdot \overleftrightarrow{T}_a(\vec{r}' - \vec{r}_n, \vec{r}'' - \vec{r}_n) \cdot \vec{E}_n^{exc}(\vec{r}''), \quad (3.77)$$

donde  $\vec{r}_n$  es el vector de posición de la  $n$ -ésima partícula respecto a su centro,  $\vec{E}_n^{exc}$  es el campo que excita a la  $n$ -ésima partícula,  $\overleftrightarrow{G}(\vec{r}, \vec{r}')$  es la diádica de la función de Green,  $\overleftrightarrow{T}_a(\vec{r}' - \vec{r}_n, \vec{r}'' - \vec{r}_n)$  es el operador de transición (usado en la teoría de esparcimiento, Ref. [18]). Esta última relación sirve para conectar la aproximación del medio efectivo, centrado en el cálculo de una conductividad efectiva, con la aproximación de múltiple esparcimiento.

Para una colección de  $N$  partículas nosotros simplemente sumamos el campo esparcido por todas ellas, es decir

$$\vec{E}(\vec{r}) = \vec{E}^i(\vec{r}) + \sum_{n=1}^N \int d^3r' d^3r'' \overleftrightarrow{G}(\vec{r}, \vec{r}') \cdot \overleftrightarrow{T}_a(\vec{r}' - \vec{r}_n, \vec{r}'' - \vec{r}_n) \cdot \vec{E}_n^{exc}(\vec{r}''). \quad (3.78)$$

Los campos coherentes, reflejado y transmitido, corresponden al promedio configuracional del campo esparcido por las partículas en cualquier lado de la monocapa. Ya que en este caso se asume que las partículas poseen posiciones aleatorias y que poseen además una distribución de tamaños, nosotros debemos tomar el promedio sobre las posiciones en las partículas y sobre su tamaño. Si suponemos que no hay correlación entre la posición y tamaño de partícula entonces podemos escribir al promedio configuracional del campo eléctrico como,

$$\begin{aligned} \langle \vec{E}(\vec{r}) \rangle &= \vec{E}^i(\vec{r}) + \\ &+ \int_0^\infty da \rho(a) \int d^3r_n p_n(\vec{r}_n) \int d^3r' \overleftrightarrow{G}(\vec{r}, \vec{r}') \int d^3r'' \overleftrightarrow{T}_a(\vec{r}' - \vec{r}_n, \vec{r}'' - \vec{r}_n) \cdot \langle \vec{E}_n^{exc} \rangle_n(\vec{r}'', \vec{r}_n) \end{aligned} \quad (3.79)$$

donde  $\rho(a)$  es la densidad de probabilidad de que una partícula posea un radio  $a$ ,  $p_n(\vec{r}_n)$  es la densidad de probabilidad de encontrar la  $n$ -ésima partícula de radio  $a_n$  en la posición  $\vec{r}_n$ ,

y como se mencionó,  $\langle \vec{E}_n^{exc} \rangle_n$  es el promedio configuracional del campo excitando la  $n$ -ésima partícula mientras mantiene su posición fija en  $\vec{r}_n$ . Recordemos que todas las partículas están depositadas sobre el plano en  $z = 0$ , por lo que una partícula de radio  $a$  está localizada en  $z = -a$ , véase Fig. 3.7. Por lo que, la densidad de probabilidad,  $p_n(\vec{r}_n)$ , depende del radio de la partícula. La densidad de probabilidad es uniforme sobre el área del plano-XY cubierto por la monocapa y sólo depende de una delta de Dirac, dada por  $\delta(z_n - a_n)$ .

Como en el caso para monocapas monodispersas, vea Ref. [1], emplearemos la aproximación cuasi-cristalina (a lo denotamos como QCA), para establecer la ecuación integral del campo que excita a cualquiera de las partículas. La diferencia aquí, respecto a la publicación anterior, es que ahora se considera también el promedio sobre la distribución de tamaño en las partículas. De aquí la ecuación integral puede ser escrita como

$$\begin{aligned} \vec{E}_j^{exc}(\vec{r}, \vec{r}_j) = & \vec{E}^i(\vec{r}) + \\ & + \int_0^\infty da \rho(a) \int d^3 r_n \int d^3 r' \overleftrightarrow{G}(\vec{r}, \vec{r}') \cdot \int d^3 r'' p(\vec{r}_n | \vec{r}_j) \overleftrightarrow{T}_a(\vec{r}' - \vec{r}_n, \vec{r}'' - \vec{r}_n) \cdot \vec{E}_n^{exc}(\vec{r}'', \vec{r}_n), \end{aligned} \quad (3.80)$$

donde  $d\rho(a)$  es la densidad en número de las partículas con radios entre  $a$  y  $a + da$ ,  $\overleftrightarrow{T}_a$  es el operador de transición para una partícula de radio  $a$ ,  $p(\vec{r}_n | \vec{r}_j)$  es la densidad condicional de probabilidad de encontrar la  $n$ -ésima partícula en torno a  $\vec{r}_n$ , dado que la  $j$ -ésima partícula está alrededor de  $\vec{r}_j$ .  $p(\vec{r}_n | \vec{r}_j)$  depende de los radios de la  $j$ -ésima y  $n$ -ésima partícula. Claramente esta debe ser cero cuando  $|\vec{r}_n - \vec{r}_j| < l$ , donde  $l$  corresponde a la suma de los radios de la  $n$ -ésima y  $j$ -ésima partícula; y debería ser aproximadamente la unidad cuando las partículas estén muy separadas una de otra.

Para obtener una solución aproximada de la ecuación integral 3.80, es necesario reemplazar la densidad condicional de probabilidad  $p(\vec{r}_n | \vec{r}_j)$ , por  $p(\vec{r}_j)$  la cual asumimos que está dada por la expresión  $A^{-1} \delta(z_n - a_n)$ , donde  $A$  es el área extendida por la monocapa sobre el plano-XY y  $a_n$  es el radio de la partícula  $n$ -ésima. Más aún, se asume que el campo excitante tiene la forma de dos ondas planas efectivas, una viajando en la dirección de incidencia y la otra en la dirección especular. Se supone además que todas las partículas, independientemente de su tamaño, ven el mismo campo efectivo. Esta aproximación puede considerarse como el equivalente a la aproximación del campo efectivo usada en la reflexión coherente de luz de un semi-espacio para una distribución aleatoria de partículas. Esto debería ser una buena aproximación para una superficie de cubierta baja. De aquí que podamos escribir al campo excitador como

$$\vec{E}_p^{exc}(\vec{r}, \vec{r}_p) = E_1 e^{(i\vec{k}^i \cdot \vec{r})} \hat{e}_i + E_2 e^{(i\vec{k}^r \cdot \vec{r})} \hat{e}_r, \quad (3.81)$$

donde  $\vec{k}^i = k_x^i \hat{a}_x + k_y^i \hat{a}_y + k_z^i \hat{a}_z$ ,  $\vec{k}^r = k_x^i \hat{a}_x + k_y^i \hat{a}_y - k_z^i \hat{a}_z$ ,  $\hat{e}_i$  y  $\hat{e}_r$  son los vectores de polarización unitarios.  $E_1$  y  $E_2$  son las amplitudes de las ondas planas efectivas, las cuales deben resolverse con requerimientos consistentes.

Sustituyendo la ecuación 3.81, en la parte derecha de la ecuación integral QCA y usando la representación del momento para el operador de transición y con la expansión apropiada de

la onda plana para la diádica de la función de Green, como se hizo en el caso monodisperso, Ref. [1], e ignorado todas las integrales de los campos evanescentes, la solución de la integral sobre el espacio  $d^3r_n$  en diferentes porciones de la monocapa, es

$$\begin{aligned} \vec{E}_j^{ind}(\vec{r}, \vec{r}_j) \approx & -\frac{\eta}{2} E_1 \int_0^\infty da \rho(a) \left[ \mathbf{S}_a(\vec{k}^i, \vec{k}^i) e^{(\vec{k}^i \cdot \vec{r})} + \mathbf{S}_a(\vec{k}^r, \vec{k}^i) e^{(-2ik_z^i a)} e^{(i\vec{k}^r \cdot \vec{r})} \right] - \\ & -\frac{\eta}{2} E_2 \int_0^\infty da \rho(a) \left[ \mathbf{S}_a(\vec{k}^i, \vec{k}^r) e^{(2ik_z^i a)} e^{(\vec{k}^i \cdot \vec{r})} + \mathbf{S}_a(\vec{k}^r, \vec{k}^r) e^{(i\vec{k}^r \cdot \vec{r})} \right], \end{aligned} \quad (3.82)$$

donde los factores de fase,  $e^{(2ik_z^i a)}$  y  $e^{-(2ik_z^i a)}$ , toman en cuenta que el centro de las partículas de radio  $a$  están en  $z = -a$  (y no en el origen). Las variables,  $\eta$  y  $\mathbf{S}_a(\vec{q}, \vec{p})$ , están dadas por las siguientes expresiones

$$\eta = \frac{2\pi}{k_m^2 \cos \theta_i}, \quad (3.83)$$

$$\mathbf{S}_a(\vec{q}, \vec{p}) \equiv \frac{k_m}{4\pi i} (\overleftrightarrow{T} - \hat{q}\hat{q}) \cdot \overleftrightarrow{T}_a(\vec{q}, \vec{p}) \cdot \hat{e}_p. \quad (3.84)$$

Se ha añadido el subíndice  $a$  para el operador de transición y para el vector  $\mathbf{S}$ , esto con el fin de indicar que son funciones que dependen del radio de la partícula. Es importante hacer notar que para obtener la expresión 3.82, fue necesario ignorar los términos que provienen de la integración del campo evanescente. Bajo esta aproximación la forma exacta de las funciones de distribución no es importante.

Si se toma como condición necesaria la igualdad de lado derecho de la ecuación 3.80 con la expresión 3.81, se obtienen dos expresiones consistentes, desde las cuales se pueden resolver las amplitudes correspondientes a la ondas planas efectivas (excitadoras), es decir

$$E_1 \hat{e}_i = E_i \hat{e}_i - \frac{\eta}{2} E_1 \int_0^\infty da \rho(a) \mathbf{S}_a(\vec{k}^i, \vec{k}^i) - \frac{\eta}{2} E_2 \int_0^\infty da \rho(a) \mathbf{S}_a(\vec{k}^i, \vec{k}^r) e^{(2ik_z^i a)}, \quad (3.85)$$

y

$$E_2 \hat{e}_r = -\frac{\eta}{2} E_1 \int_0^\infty da \rho(a) \mathbf{S}_a(\vec{k}^r, \vec{k}^i) e^{-(2ik_z^i a)} - \frac{\eta}{2} E_2 \int_0^\infty da \rho(a) \mathbf{S}_a(\vec{k}^r, \vec{k}^r). \quad (3.86)$$

Los vectores  $\mathbf{S}_a(\vec{k}^r, \vec{k}^i)$  y  $\mathbf{S}_a(\vec{k}^r, \vec{k}^r)$  están relacionados con los elementos de la matriz de amplitud de esparcimiento de una partícula aislada y estos pueden ser deducidos de la expresión 3.84. Donde se puede mostrar que,

$$\begin{aligned} \mathbf{S}_a(\vec{k}^i, \vec{k}^i) &= S_a(0) \hat{e}_i, \\ \mathbf{S}_a(\vec{k}^r, \vec{k}^r) &= S_a(0) \hat{e}_r, \\ \mathbf{S}_a(\vec{k}^r, \vec{k}^i) &= S_{j, a}(\pi - 2\theta_i) \hat{e}_r, \\ \mathbf{S}_a(\vec{k}^i, \vec{k}^r) &= S_{j, a}(\pi - 2\theta_i) \hat{e}_i. \end{aligned} \quad (3.87)$$

De estas dos últimas expresiones el subíndice  $j$  toma el valor de 1 o 2 cuando la onda incidente en la monocapa tiene polarización  $TE$  o  $TM$ , respectivamente.  $S_{1,a}(\theta)$  y  $S_{2,a}(\theta)$  son los elementos de la amplitud de la matriz de esparcimiento de una partícula esférica aislada de radio  $a$ .  $S(0) = S_{1,a}(0) = S_{2,a}(0)$ , es la llamada amplitud de esparcimiento directa de la partícula, (véase la Sec. 2.3).

Para determinar  $E_1$  y  $E_2$  de las expresiones 3.85 y 3.86 utilizamos las identidades (Exps. 3.87), para posteriormente tomar el producto escalar de ambos lados, de la primera y segunda ecuación, con  $\hat{e}_i$  e  $\hat{e}_r$ , respectivamente. Las soluciones algebraicas obtenidas para las amplitudes de los campos  $E_1$  y  $E_2$ , son

$$E_1 = E_i \frac{1 + \frac{1}{2}\beta_F}{1 + \beta_F + \frac{1}{4}(\beta_F^2 - \beta_C\beta_B)}, \quad (3.88)$$

y

$$E_2 = E_i \frac{\frac{1}{2}\beta_C}{1 + \beta_F + \frac{1}{4}(\beta_F^2 - \beta_C\beta_B)}, \quad (3.89)$$

donde

$$\begin{aligned} \beta_F &= \eta \int_0^\infty da \rho(a) S(0), \\ \beta_B &= \eta \int_0^\infty da \rho(a) S_{j,a}(\pi - 2\theta_i) e^{2ik_z^i a}, \\ \beta_C &= \eta \int_0^\infty da \rho(a) S_{j,a}(\pi - 2\theta_i) e^{-2ik_z^i a}. \end{aligned} \quad (3.90)$$

Los campos reflejado y transmitido por una monocapa de partículas polidispersas libre y aislada son,

$$E_r \hat{e}_r = -\eta E_1 \int_0^\infty da \rho(a) \mathbf{S}_a(\vec{k}^r, \vec{k}^i) e^{-(2ik_z^i a)} - \eta E_2 \int_0^\infty da \rho(a) \mathbf{S}_a(\vec{k}^r, \vec{k}^r), \quad (3.91)$$

$$E_t \hat{e}_i = E_i \hat{e}_i - \eta E_1 \int_0^\infty da \rho(a) \mathbf{S}_a(\vec{k}^i, \vec{k}^i) - \eta E_2 \int_0^\infty da \rho(a) \mathbf{S}_a(\vec{k}^i, \vec{k}^r) e^{(2ik_z^i a)}. \quad (3.92)$$

Realizamos el producto interior de la expresión 3.91 con el vector unitario  $\hat{e}_r$ , y de la expresión 3.92 con el vector  $\hat{e}_i$ , para obtener las siguientes expresiones simplificadas,

$$E_t = E_i - E_1 \beta_F - E_2 \beta_B \quad (3.93)$$

$$E_r = -E_1 \beta_C - E_2 \beta_F$$

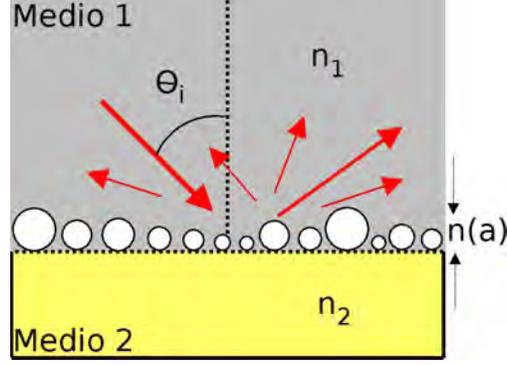


Figura 3.8: Ilustración de la vista lateral de una monocapa de partículas polidispersas depositada sobre un sustrato plano con índice de refracción  $n_2$  y embebidas en el medio 1 de índice de refracción  $n_1$ . La línea segmentada nos indica el plano de la monocapa.

Finalmente los coeficientes de reflexión y transmisión coherentes para una monocapa aleatoria de partículas polidispersas libre y aislada son,

$$r_{coh_p} = \frac{E_r}{E_i} = \frac{-\beta_C}{1 + \beta_F + \frac{1}{4}(\beta_F^2 - \beta_C\beta_B)}, \quad (3.94)$$

$$t_{coh_p} = \frac{E_t}{E_i} = \frac{1 - \frac{1}{4}(\beta_F^2 - \beta_C\beta_B)}{1 + \beta_F + \frac{1}{4}(\beta_F^2 - \beta_C\beta_B)} \quad (3.95)$$

Donde el subíndice  $p$  nos indica que es el coeficiente de reflexión (o transmisión) para una monocapa de partículas polidispersas, y así diferenciarlo, de los coeficientes para el caso monodisperso (Exps. 3.72 y 3.73). Las funciones integrales  $\beta$  's se determinan a partir de las expresiones 3.90, la cuales se calculan de manera numérica (véase la subrutina B.1 del apéndice B).

Finalmente, supongamos que la monocapa de partículas polidispersas es soportada por una interfase plana y ésta se encuentra embebida en el medio 1 con índice de refracción  $n_1$ , como se muestra en la figura 3.8. Supongamos que se hace incidir un haz coherente monocromático, a un ángulo  $\theta_i$ , en la interfase plana entre el medio 1 y 2 con índices de refracción  $n_1$  y  $n_2$ , respectivamente (ver Fig. 3.8). Si suponemos que el índice de refracción para  $z > \delta$  es  $n_2$  y es diferente a la del medio incidente (medio 1) para el caso  $z < \delta$ , entonces de las múltiples reflexiones de la onda coherente entre la monocapa y la interfase en  $z = \delta$ , y haciendo  $\delta \rightarrow 0$ , se tiene que el coeficiente de reflexión de una monocapa de partículas polidispersas soportada por una interfase plana es,

$$r_p(\theta_i) = r_{coh_p}(\theta_i) + \frac{r_{12}(\theta_i)t_{coh_p}^2(\theta_i)}{1 - r_{12}(\theta_i)r_{coh_p}(\theta_i)}. \quad (3.96)$$

El subíndice  $p$  nos indica que se trata del caso polidisperso. De esta misma manera el coeficiente de transmisión es,

$$t_p(\theta_i) = \frac{t_{coh_p}(\theta_i)t_{12}(\theta_i)}{1 - r_{12}(\theta_i)r_{coh_p}(\theta_i)}. \quad (3.97)$$

En este caso,  $r_{12}$  y  $t_{12}$ , son los coeficientes de reflexión y transmisión de Fresnel para la interfase entre los índices de refracción  $n_1$  y  $n_2$  evaluados a un ángulo de incidencia  $\theta_i$  (véase sección 3.1),  $r_{coh_p}$  y  $t_{coh_p}$  son los coeficientes de reflexión y transmisión coherentes de una monocapa libre e independiente de partículas polidispersas embebidas en el medio 1, (Exps. 3.94 y 3.95, respectivamente). Recordemos que las expresiones 3.94 y 3.95 requieren de la evaluación numérica de las funciones integrales  $\beta$ 's, Exps. 3.90, de donde  $k_z^i = k_o n_1 \cos \theta_i = \frac{2\pi}{\lambda} n_1 \cos \theta_i$ ,  $\rho(a) = \rho_{sT} n(a)$  corresponde a la densidad en número de la distribución de tamaño,  $\rho_{sT}$  es la densidad de superficie en número de las partículas independientemente de su radio y  $n(a)$  es la función para la distribución de tamaño asociado a las partículas de la monocapa;<sup>2</sup> que en este caso se ha tomado una función del tipo **log-normal**, su expresión es entonces,

$$n(a) = \frac{1}{a\sqrt{2\pi \ln \sigma}} e^{\left[-\frac{\ln^2(a/a_o)}{2 \ln^2 \sigma}\right]}. \quad (3.98)$$

donde  $a_o$  corresponde al radio promedio de la partícula proporcionada por el fabricante y  $\sigma$  es el ancho de la distribución de tamaños para cierto tipo de partícula. Nótese que al integrar la distribución de tamaños  $n(a)$ , de 0 a  $\infty$ , y haciendo un cambio de variable de  $u = \ln(a/a_o) = \ln a - \ln a_o$ , para que  $du = \frac{da}{a}$ , la integral tiene un valor de,

$$\int_0^{\infty} n(a) da = \int_0^{\infty} da \frac{1}{a\sqrt{2\pi \ln \sigma}} e^{\left(-\frac{\ln^2(a/a_o)}{2 \ln^2 \sigma}\right)} = \frac{1}{\sqrt{2\pi \ln \sigma}} \int_0^{\infty} du e^{-\frac{u^2}{2 \ln^2 \sigma}} = \frac{1}{\sqrt{2\pi \ln \sigma}} \sqrt{2\pi \ln^2 \sigma} = 1$$

La densidad de superficie en número,  $\rho_{sT}$ , se puede determinar a partir de la fracción de cubierta de la monocapa sobre la superficie del sustrato plano,  $\Theta$ , es decir,

$$\Theta = \rho_{sT} \int_0^{\infty} n(a) (\pi a^2) da = \frac{N}{V} \int_0^{\infty} da \frac{(\pi a^2)}{a\sqrt{2\pi \ln \sigma}} e^{\left(-\frac{\ln^2(a/a_o)}{2 \ln^2 \sigma}\right)} = \rho_{sT} \pi (a_o)^2 e^{(2 \ln^2 \sigma)}$$

donde  $N$  es el número total de partículas y  $V$  corresponde al volumen de todas la partículas depositadas sobre el sustrato. Del desarrollo anterior, despejando  $\rho_{sT}$ , se obtiene finalmente

$$\rho_{sT} = \frac{\Theta}{\pi a_o^2} e^{-2 \ln^2 \sigma}, \quad (3.99)$$

Para obtener los limites de integración en las funciones integrales  $\beta$ 's, basta con sustituir el factor de la exponencial, para la función de la distribución de tamaños 3.98, con la cantidad 3, pues es donde la función  $n(a) \approx 0$ , esto es

---

<sup>2</sup>Su evaluación numérica se da en la subrutina B.2 del apéndice B.

$$\frac{\ln^2(a/a_o)}{2 \ln^2 \sigma} = (3)^2$$

que es equivalente a tener

$$\frac{\ln(a/a_o)}{\sqrt{2} \ln \sigma} = \pm 3$$

por lo tanto, las funciones integrales Exps. 3.90, se se pueden evaluar numéricamente como función de  $a$ , con los límites de integración dadas por las siguientes expresiones:

$$\begin{aligned} a_{sup} &= \sigma^{+\sqrt{18}} a_o, \\ a_{inf} &= \sigma^{-\sqrt{18}} a_o. \end{aligned} \tag{3.100}$$

### 3.4. Monocapa soportada por una interfase plana

Los dos modelos teóricos presentados previamente, que describen la reflexión y transmisión de luz coherente tanto para una monocapa de partículas monodispersas como una de partículas polidispersas, poseen expresiones muy sencillas 3.70, 3.71, 3.96 y 3.97, esto permite que se puedan aplicar de manera experimental, como es en este caso, para medir la reflectividad y transmitividad óptica en sistemas con depósito de monocapas para baja densidad en número de partículas. En estos modelos se asumió que la onda electromagnética incidente (el campo excitador) es la única onda que incide sobre todas las partículas ignorando todos los múltiples esparcimientos sobre éstas. Podríamos ya trabajar con estos coeficientes de reflexión y transmisión para el caso monodisperso y polidisperso (para una monocapa depositada sobre un sustrato plano). Sin embargo, es prudente examinar primero nuestros arreglos experimentales a emplear. De los esquemas experimentales mostrados en las figuras 4.4 y 4.7, nos percatamos de que tenemos un sistema óptico real para el haz incidente: **aire-monocapa-sustrato-aire**. Es decir, comparándolo con los dos modelos anteriores, el haz incide primeramente en el medio 1 (aire), luego pasa por el sistema de partículas soportado por el sustrato (la monocapa), para posteriormente incidir en el medio 2 (el sustrato); pero dado que el detector se encuentra, en nuestro montaje experimental, posterior al sustrato (ver Fig. 4.7); para el caso de la transmitancia, el haz debe pasar por el aire nuevamente (medio 1). Por tanto, se debe tomar en cuenta la transmisión del haz para el medio **sustrato-aire**. Incluso para la medición de la reflectancia, es necesario considerar el primer término de la reflexión correspondiente al haz reflejado en la frontera del medio **sustrato-aire**. Es importante remarcar que esta última reflexión y transmisión no se tomó en cuenta para la deducción de los coeficientes de reflexión y transmisión de las monocapas depositadas sobre un sustrato plano en los dos anteriores modelos, pero en esta sección se contemplan estos esparcimientos.

En la figura 3.9 se muestra un esquema del sistema óptico correspondiente a nuestro arreglo experimental: **aire-monocapa-sustrato-aire**, al cual se le hace incidir una onda

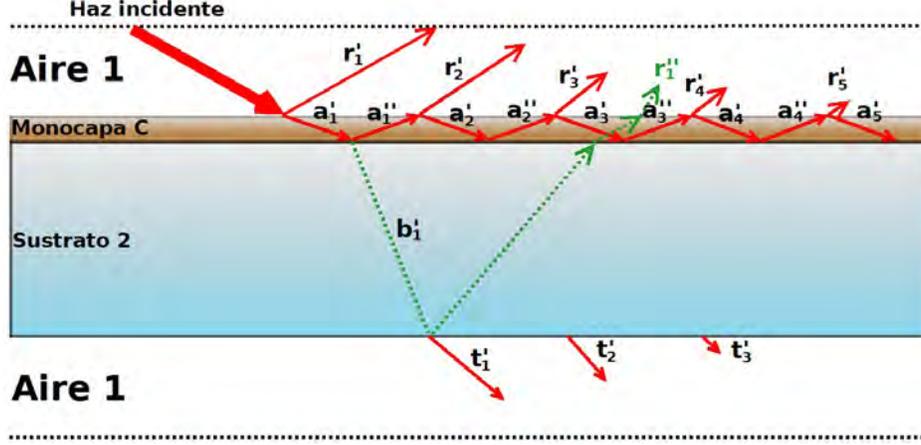


Figura 3.9: Trayectorias de un haz monocromático que incide en una monocapa de partículas inmersas en un medio 1, con índice de refracción  $n_1$ , depositada sobre un sustrato plano con índice de refracción  $n_2$ .

electromagnética monocromática con un ángulo  $\theta_i$ . De nuestro montaje: el medio 1 corresponde al aire con un índice de refracción  $n_1$  y el medio 2 corresponde al sustrato de índice de refracción  $n_2$ . De aquí podemos deducir que las múltiples reflexiones de la onda coherente entre el plano de la monocapa y la dos interfases están dadas por

$$r_{MSM}(\theta_i) = r'_1(\theta_i) + r'_2(\theta_i) + r'_3(\theta_i) + r'_4(\theta_i) + \dots + r''_1 \quad (3.101)$$

y las múltiples transmisiones de la onda coherente entre el plano de la monocapa y las dos interfases tiene una expresión

$$t_{MSM}(\theta_i) = t'_1(\theta_i) + t'_2(\theta_i) + t'_3(\theta_i) + t'_4(\theta_i) + \dots \quad (3.102)$$

Los coeficientes de la figura 3.9, para el caso monodisperso, tienen las siguientes expresiones:

$$\begin{aligned} a'_1(\theta_i) &= t_{coh}(\theta_i), \quad a''_1(\theta_i) = r_{coh}(\theta_i)r_{12}(\theta_i), \quad a'_2(\theta_i) = r_{coh}(\theta_i)t_{coh}(\theta_i)r_{12}(\theta_i), \\ a''_2(\theta_i) &= r_{coh}(\theta_i)t_{coh}(\theta_i)r_{12}^2(\theta_i), \quad a'_3(\theta_i) = r_{coh}^2(\theta_i)t_{coh}(\theta_i)r_{12}^2(\theta_i), \\ a''_3(\theta_i) &= r_{coh}^2(\theta_i)t_{coh}(\theta_i)r_{12}^3(\theta_i), \quad a'_4(\theta_i) = r_{coh}^3(\theta_i)t_{coh}(\theta_i)r_{12}^3(\theta_i), \dots \end{aligned} \quad (3.103)$$

De los coeficientes 3.103 se deducen los siguientes coeficientes de reflexión (caso monodisperso):

$$\begin{aligned} r'_1(\theta_i) &= r_{coh}(\theta_i), \quad r'_2(\theta_i) = r_{12}(\theta_i)t_{coh}^2(\theta_i)e^{\beta_1}, \quad r'_3(\theta_i) = r_{coh}(\theta_i)t_{coh}^2(\theta_i)r_{12}^2(\theta_i)e^{2\beta_1}, \\ r'_4(\theta_i) &= r_{coh}^2(\theta_i)t_{coh}^2(\theta_i)r_{12}^3(\theta_i)e^{3\beta_1}, \quad \dots, \quad r''_1(\theta_i) \approx t_{coh}^2(\theta_i)r_{21}(\theta_i)t_{12}(\theta_i)t_{21}(\theta_i), \end{aligned} \quad (3.104)$$

De los coeficientes 3.103 se deducen los siguientes:

$$b'_1(\theta_i) = t_{coh}(\theta_i)t_{12}(\theta_i), \quad b'_2(\theta_i) = r_{coh}(\theta_i)t_{coh}(\theta_i)r_{12}(\theta_i)t_{12}(\theta_i), \quad (3.105)$$

$$b'_3(\theta_i) = r_{coh}^2(\theta_i)t_{coh}(\theta_i)r_{12}^2(\theta_i)t_{12}(\theta_i), \quad b'_4(\theta_i) = r_{coh}^3(\theta_i)t_{coh}(\theta_i)r_{12}^3(\theta_i)t_{12}(\theta_i), \dots,$$

De los coeficientes 3.105 se deducen los siguientes coeficientes de transmisión (caso monodisperso):

$$t'_1(\theta_i) = t_{coh}(\theta_i)t_{12}(\theta_i)t_{21}(\theta_i)e^{\beta_0},$$

$$t'_2(\theta_i) = r_{coh}(\theta_i)t_{coh}(\theta_i)r_{12}(\theta_i)t_{12}(\theta_i)t_{21}(\theta_i)e^{\beta_0}e^{\beta_1}, \quad (3.106)$$

$$t'_3(\theta_i) = r_{coh}^2(\theta_i)t_{coh}(\theta_i)r_{12}^2(\theta_i)t_{12}(\theta_i)t_{21}(\theta_i)e^{\beta_0}e^{\beta_1},$$

$$t'_4(\theta_i) = r_{coh}^3(\theta_i)t_{coh}(\theta_i)r_{12}^3(\theta_i)t_{12}(\theta_i)t_{21}(\theta_i)e^{\beta_0}e^{\beta_1}, \dots,$$

Donde  $r_{21}(\theta_i)$  y  $t_{21}(\theta_i)$  son los coeficientes de reflexión y transmisión de Fresnel para la interfase entre los índices de refracción  $n_2$  y  $n_1$  evaluados a un ángulo de incidencia  $\theta_i$ , y las funciones  $\beta_0$ ,  $\beta_1$ ,  $r_{coh}(\theta_i)$ ,  $t_{coh}(\theta_i)$ ,  $r_{12}(\theta_i)$  y  $t_{12}(\theta_i)$  son las mismas que se definieron para el caso monodisperso, sección 3.2. Sustituyendo los coeficientes de reflexión para el caso monodisperso, Exps. 3.104, en la fórmula 3.101, se obtiene finalmente el coeficiente de reflexión para nuestro sistema **aire-monocapa-sustrato-aire**:

$$\begin{aligned} r_{MSM}(\theta_i) &\approx r_{coh}(\theta_i) + \frac{r_{12}(\theta_i)t_{coh}^2(\theta_i)e^{\beta_1}}{1-r_{12}(\theta_i)r_{coh}(\theta_i)e^{\beta_1}} + t_{coh}^2(\theta_i)r_{21}(\theta_i)t_{12}(\theta_i)t_{21}(\theta_i) = \\ &= r_m + t_{coh}^2(\theta_i)r_{21}(\theta_i)t_{12}(\theta_i)t_{21}(\theta_i). \end{aligned} \quad (3.107)$$

De esta expresión se deduce que la reflectancia, para el caso monodisperso, es:

$$R(\theta_i) \approx |r_m(\theta_i)|^2 + |t_{coh}(\theta_i)|^4(|r_{21}(\theta_i)||t_{12}(\theta_i)||t_{21}(\theta_i)|)^2. \quad (3.108)$$

Por otra parte, sustituyendo los coeficientes de transmisión para el caso monodisperso, Exps. 3.106, en la fórmula 3.102, se obtiene finalmente el coeficiente de transmisión para nuestro sistema **aire-monocapa-sustrato-aire**:

$$\begin{aligned} t_{MSM}(\theta_i) &\approx \left[ \frac{t_{coh}(\theta_i)t_{12}(\theta_i)e^{\beta_0}}{1-r_{12}(\theta_i)r_{coh}(\theta_i)e^{\beta_1}} \right] t_{21}(\theta_i) = \\ &= t_m(\theta_i)t_{21}(\theta_i). \end{aligned} \quad (3.109)$$

De esta expresión se deduce que la transmitancia, para el caso monodisperso, es:

$$T(\theta_i) \approx (|t_m(\theta_i)|^2)(|t_{21}(\theta_i)|^2). \quad (3.110)$$

Nótese la diferencia entre las expresiones 3.107 y 3.109 respecto a las obtenidas previamente para el caso monodisperso, Exps. 3.70 y 3.71. Siguiendo el mismo procedimiento para el caso polidisperso se obtienen las siguientes expresiones correspondientes a la reflectancia y transmitancia, respectivamente

$$R(\theta_i) \approx |r_p(\theta_i)|^2 + |t_{coh_p}(\theta_i)|^4 (|r_{21}(\theta_i)||t_{12}(\theta_i)||t_{21}(\theta_i)|)^2. \quad (3.111)$$

y

$$T(\theta_i) \approx (|t_p(\theta_i)|^2)(|t_{21}(\theta_i)|^2). \quad (3.112)$$

Las expresiones aquí descritas 3.108, 3.110, 3.111 y 3.112 son las que finalmente se utilizaron para obtener las curvas teóricas de reflectancia y transmitancia, las cuales se compararon con las curvas experimentales de reflectancia y transmitancia obtenidas para el par de monocapas, alúmina y titanía, depositadas sobre un sustrato plano. La simulación numérica y comparación para este par de modelos se puede revisar en el apéndice B.



# Investigación experimental



# Capítulo 4

## Preparación de muestras y arreglos experimentales

Dentro de la primera y segunda sección, del correspondiente capítulo, se da una descripción detallada de la técnica *dip coating* así como del procedimiento experimental llevado a cabo para la manufactura de las monocapas de alúmina y titania depositadas, respectivamente, sobre la superficie de un portaobjetos. En las secciones posteriores se detallan los procedimientos y arreglos experimentales, por configuración externa, realizados para la medición de las reflectancias y transmitancias de luz coherente, como función del ángulo de incidencia  $\theta_i$ , correspondientes a este par de monocapas con distintas superficies de cubierta,  $\Theta$ . Además, se describe el arreglo experimental para medir los espectros de transmitancia, a incidencia normal, para estas dos monocapas de partículas polidispersas. Cabe señalar que resultó imposible medir el espectro de reflectancia de estas dos monocapas, pues la intensidad luminosa, correspondiente a la componente coherente del haz reflejado, tenía tan baja intensidad que ésta se combinaba con el ruido electrónico del propio espectrofotómetro, esto es debido a la mayor parte del haz incidente es transmitido. Sin embargo, se muestran los espectros de reflectancia obtenidos con el modelo teórico donde se corrobora su baja intensidad.

### 4.1. Técnica *dip coating*

Previo a describir la técnica *dip coating*, es conveniente mencionar que esta técnica igualmente se puede aplicar para fabricar películas delgadas con partículas del orden de nanómetros, o bien, para fabricar monocapas con partículas del orden de micrómetros. La teoría que se detalla en esta sección parte desde el punto de vista del depósito de una película delgada. Muchas de las etapas de este proceso se pueden aplicar igualmente para describir el depósito de una monocapa de partículas sobre un sustrato plano. La técnica *dip coating* o *immersion coating*<sup>1</sup> se puede describir como un proceso en el cual se sumerge un sustrato a un líquido,

---

<sup>1</sup>La traducción al español sería **recubrimiento por inmersión**.

con velocidad constante, en el que se desea recubrir o depositar una película delgada uniforme de partículas, para después ser retirado con una velocidad, temperatura y condiciones atmosféricas bien controladas. La estabilidad del flujo y el espesor de la película es fijado por la competencia entre la viscosidad, capilaridad (tensión superficial) y la fuerza de gravedad. Esto quiere decir, que el espesor del recubrimiento se define principalmente por la velocidad de extracción, por el contenido de sólidos y por la viscosidad del líquido. El espesor y la uniformidad pueden ser susceptibles a las condiciones del flujo en el baño líquido y en el gas suspendido. Cuanto más rápido se retira el sustrato, la película depositada es más gruesa. Esto puede ser contrarrestado mediante el uso de solutos volátiles y combinándolo con un secado rápido. Sin embargo, la física para estimar el espesor de la película delgada se hace más complicada [40]. Por otra parte, sí la velocidad de extracción se elige de tal manera que la tasa de cizallamiento se mantenga en el régimen newtoniano, el espesor de la película puede ser calculada por la ecuación de Landau-Levich [40, 41]:

$$h = 0.94 \frac{(\eta v)^{2/3}}{\gamma_{LV}^{1/6} (\rho g)^{1/2}} \quad (4.1)$$

donde:  $h$  corresponde al espesor de la película,  $\eta$  es la viscosidad,  $v$  la velocidad de inmersión,  $\gamma_{LV}$  es la tensión superficial del líquido-vapor,  $\rho$  la densidad y  $g$  la gravedad.

Como se puede notar del párrafo anterior, una parte muy importante de la técnica *dip coating* es la solución misma a emplear para el recubrimiento del sustrato con la película delgada; pues en ella se encuentran inmersas las partículas que serán depositadas sobre toda la superficie de éste, dando así origen a la película de partículas deseada. Un método común y muy usado dentro de la técnica *dip coating*, es el proceso conocido como **sol-gel**, donde se emplea una suspensión coloidal. Es importante recalcar que el sol-gel es una técnica de síntesis y que no es la técnica que fue utilizada para elaborar las monocapas de titania y alúmina empleadas en este estudio. Brevemente se describe el método sol-gel, utilizando la técnica *dip coating*, con fines puramente didácticos dentro de este trabajo. Por tanto, es cierto que el método sol gel no es utilizado para la fabricación de estas monocapas, pero la técnica *dip coating* nos permite realizar el depósito de las partículas de alúmina y titania sobre nuestro sustrato como una monocapa. Un **sol** es una suspensión coloidal de partículas sólidas en una fase líquida<sup>2</sup>, donde las partículas dispersas son lo suficientemente pequeñas para permanecer suspendidas por el movimiento browniano. Entre las partículas coloidales más usadas, tanto en la industria como en los laboratorios, se encuentran: el dióxido de titanio o también conocido como titania- $TiO_2$ , el dióxido de silicio o sílice- $SiO_2$ , el dióxido de zirconio o zirconia- $ZrO_2$ , el óxido de aluminio o alúmina- $Al_2O_3$ , etc. Una vez que se ha preparado el sol, el sustrato (previamente tratado para asegurar una buena adherencia) es sumergido a velocidad constante en la solución coloidal para posteriormente ser retirado de manera uniforme de la misma; es en esta etapa donde ocurre el proceso de *gelación*. En contraste con sol, un **gel** es una red de material sólido conteniendo un componente líquida. Finalmente, el poco solvente que ha quedado entre las partículas se evapora, dejándonos

---

<sup>2</sup>Usualmente se emplea algún solvente como la parte líquida en la preparación del sol, por ejemplo, se puede usar algún tipo de alcohol.

únicamente las partículas depositadas sobre el sustrato.

Cabe señalar que sí se elige algún sistema reactivo para los recubrimientos, como es el

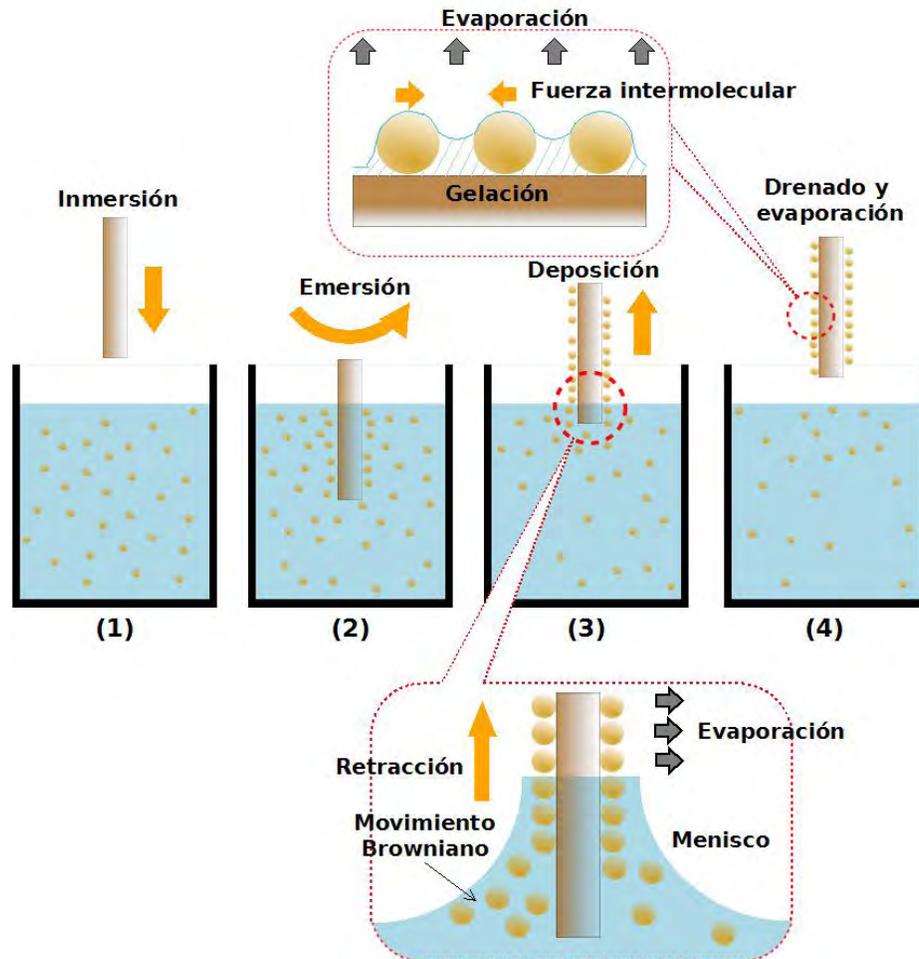


Figura 4.1: *Etapas del proceso dip coating: (1) Inmersión del sustrato, (2) Emersión del sustrato, (3) Deposición de la capa delgada, (4) Drenado y evaporación (gelación).*

caso de utilizar algún tipo de sol-gel, el control de la atmósfera se hace indispensable; ya que así, de manera indirecta, el control de ésta nos permite manipular la evaporación del disolvente, lo cual nos conduce a un mejor proceso de gelificación y por ende, a la formación de una película delgada constituida solamente por estas partículas. La técnica *dip coating* es útil para aplicaciones en el que los sustratos u objetos poseen un área grande y una geometría irregular. En la Fig. 4.1 se muestran las etapas de proceso para la formación de una película delgada a través de la técnica *dip coating*, estas son:

- **Inmersión:** El sustrato es inmerso, a velocidad constante, en la solución que contiene el material para su depósito de éste sobre la superficie del sustrato. Véase Fig. 4.1 - (1).

- **Emersión:** El sustrato se ha mantenido dentro de la solución por un breve tiempo; siguiendo después la extracción. Véase Fig. 4.1 - (2).
- **Deposición:** Una vez que empieza la extracción del sustrato, a velocidad constante y controlada, se deposita sobre éste, una pequeña capa húmeda. Véase Fig. 4.1 - (3).
- **Drenaje:** Una vez que el objeto se ha retirado de la solución, el exceso de líquido drenará a través de la superficie. Véase Figs. 4.1 - (3) y (4).
- **Evaporación:** Para los disolventes volátiles, tales como alcoholes, la evaporación empieza durante las etapas de deposición y drenaje. Por lo que, una vez evaporado se tiene a lugar la formación de la película delgada de partículas sobre la superficie del sustrato. Véase Fig. 4.1 - (4).

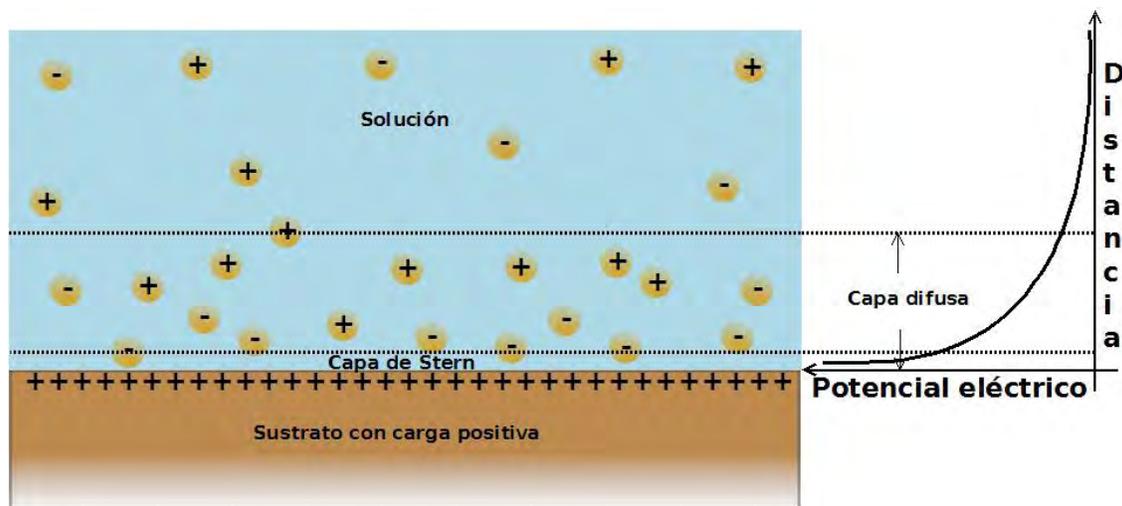


Figura 4.2: *Potencial de Stern.*

De manera muy general se ha descrito la técnica *dip coating* para el depósito de películas delgadas sobre algún tipo de sustrato utilizando el proceso sol-gel. Pero, ¿Cuál es la física que hay dentro de este proceso complejo? Bien, cuando se extrae el sustrato de la solución coloidal, véase Fig. 4.1; las partículas que se encuentran dentro de ésta con movimiento browniano son estabilizadas por las cargas superficiales del sustrato (todas ellas con carga positiva, véase Fig. 4.2), esto bajo la consideración del potencial de Stern. Como se sabe, dentro de la suspensión coloidal existen iones con carga positiva y negativa [28], como se ilustra en la Fig. 4.2. De acuerdo a la teoría de Stern, existe un proceso para el cual hay una adsorción iónica específica la cual da origen a una capa compacta de contra-iones o cargas opuestas que se adhieren a la superficie por fuerzas electrostáticas y por fuerzas de Van der Waals, con la fuerza suficiente como para compensar la agitación térmica. El proceso de gelación se puede explicar por la cercanía entre las partículas cargadas de igual y opuesto signo a distancias por debajo del potencial de repulsión, esto produce una doble capa, una

de ellas compacta (capa de Stern) y una capa difusa en la que el potencial disminuye muy rápidamente hasta caer a cero (Fig. 4.2). Por otra parte, el flujo de energía que surge de la fuerza capilar y de la evaporación del solvente actúan para re-organizar de manera uniforme las partículas inmersas en el solvente o solución, y producir así, la cubierta de éstas sobre la superficie del sustrato. Es decir, el arreglo de partículas se produce por el flujo del solvente desde la evaporación y de la fuerzas entre partículas creada por la tensión superficial (fuerza intermolecular). En ocasiones es necesario un tratamiento térmico para la densificación de la película resultante.

Entre las ventajas que se hallan al utilizar la técnica *dip coating* como proceso en la fabricación de películas delgadas se encuentran siguientes:

- **Costo-eficacia.** La principal ventaja de esta técnica es su bajo costo y su fácil empleo para el recubrimiento con películas delgadas de cualquier sustrato.
- **Doble recubrimiento.** Ambas partes del sustrato pueden ser recubiertas en un solo proceso.
- **Aplicabilidad.** La facilidad de introducir nuevos elementos al sol, ya sea para realizar nuevos recubrimientos, o bien, para modificar la matriz donde se hallan inmersas las partículas.
- **Ahorro de material.** La cantidad de líquido utilizado para el recubrimiento de películas delgadas, por esta técnica, es mucho menor que las técnicas Spin-Coating y Spray-Coating.
- **Compatibilidad.** La técnica *dip coating* permite realizar recubrimientos independientemente de la forma que posea el sustrato u objeto.

Por otra parte, un punto crítico en la elaboración de estos recubrimientos, por la técnica *dip coating*, es el espesor; que es controlado por la velocidad de extracción del sustrato. Al aumentar el espesor de la película, se corre el riesgo de incrementar el número de defectos durante la etapa de gelación (densificación del líquido), ya que los cambios volumétricos asociados son mucho mayores. La incorporación de compuestos orgánicos en estos recubrimientos permite aumentar los espesores de las capas y permiten disminuir las temperaturas necesarias para que se dé la densificación del recubrimiento, pero se ve afectada la adherencia entre el recubrimiento y el sustrato. No obstante, para este trabajo se tiene contemplado la elaboración de una monocapa lo cual implica que el ancho de la película corresponda al diámetro de la partícula, por lo que se le puede considerar como una película delgada y no se corre el riesgo aquí descrito; en conclusión está técnica juega a nuestro favor para la fabricación de éstas con partículas polidispersas.

## 4.2. Procedimiento experimental para el depósito de monocapas sobre un sustrato plano

Antes de presentar los arreglos experimentales, es pertinente describir el procedimiento experimental previo que se realizó para el depósito de las monocapas, con partículas de alúmina y titania, sobre nuestros sustratos planos. Como se mencionó, los sustratos empleados para el depósito de éstas fueron portaobjetos de la marca *Corning* de  $27 \times 75\text{mm}$ , los cuales se lavaron perfectamente con jabón líquido, acetona, alcohol isopropílico, y agua tridestilada, para retirar así, polvo, grasa, resinas y otros agentes que impidan el depósito adecuado de las partículas sobre la superficie del cristal, además de evitar con ello mediciones experimentales erróneas y la contaminación de la suspensión con alguna partícula depositada sobre la superficie del sustrato. Es importante hacer notar que si se desea obtener una mejor adherencia entre las partículas de alúmina, o titania, con el sustrato, es necesario contar con una superficie perfectamente limpia y libre de residuos. Una vez realizada la limpieza de los portaobjetos, se procedió a la preparación de las suspensiones de alúmina y titania. La primera consistió de, alcohol isopropílico ( $39\text{ml}$ ) mezclado con polvo de alúmina<sup>3</sup> ( $1.74\text{g}$ ), la segunda fue una mezcla de alcohol isopropílico ( $36\text{ml}$ ) y de slurry preparado con titania o dióxido de titanio<sup>4</sup>,  $9\text{ml}$  de  $TiO_2$ , con una fracción de llenado del 4.8%. Nótese que estas dos suspensiones poseen una baja concentración de partículas, lo cual nos garantiza una fracción de cubierta,  $\Theta$ , baja.

Siguiendo con el procedimiento, ambas suspensiones fueron inmersas en un baño ultrasónico durante  $5\text{min}$  para eliminar conglomerados de partículas, y evitar así, aglomeraciones de éstas durante su depósito sobre la superficie del portaobjetos. En otras palabras, el baño ultrasónico nos permite homogeneizar ambas suspensiones, además de inducir cargas eléctricas, producidas por la fricción, en las partículas, esto último originado por la agitación a la que se somete la suspensión de partículas. Con esto garantizamos un depósito de partículas aisladas y con posiciones aleatorias sobre la superficie del sustrato plano. Finalmente se procedió a realizar el depósito de las partículas de alúmina sobre la superficie del portaobjetos. Para ello el portaobjetos se sumergió y se extrajo a velocidad<sup>5</sup> constante dentro de la primera mezcla (alcohol isopropílico con alúmina), siempre con un ángulo de inclinación mayor a los  $80^\circ$  y hasta cubrir un 90% de la superficie del portaobjetos; véase Fig. 4.3-(a). Como se mencionó en la sección previa, dentro de estos coloides existen partículas de alúmina con carga positiva y negativa, de tal forma que al introducir el portaobjetos, con carga superficial positiva, dentro de la mezcla, se induce un potencial de Stern muy próximo a su superficie, dando origen a una adsorción de contra-iones, por fuerzas electrostáticas y por fuerzas de Van der Waals, para dar así forma a la capa de Stern constituida por partículas de alúmina, la mayoría de éstas de carga negativa, (ver Fig. 4.2). Cuando se extrae al portaob-

---

<sup>3</sup>Se utilizó alúmina de la marca Buehler No. 40-6603-030-080.

<sup>4</sup>Para la monocapa con dióxido de titanio se utilizó slurry preparado, esto es, una mezcla de agua desionizada ( $999.0\text{g}$ ), con dispersante ( $0.99\text{g}$ ), y de dióxido de titanio ( $50.0\text{g}$ ), lo cual nos da una fracción de llenado del 4.8%.

<sup>5</sup>En este caso dependiendo de la velocidad con la que se extrae al sustrato, de la mezcla, está determinará la superficie de cubierta- $\Theta$  de la monocapa sobre la superficie (véase sección 4.1).

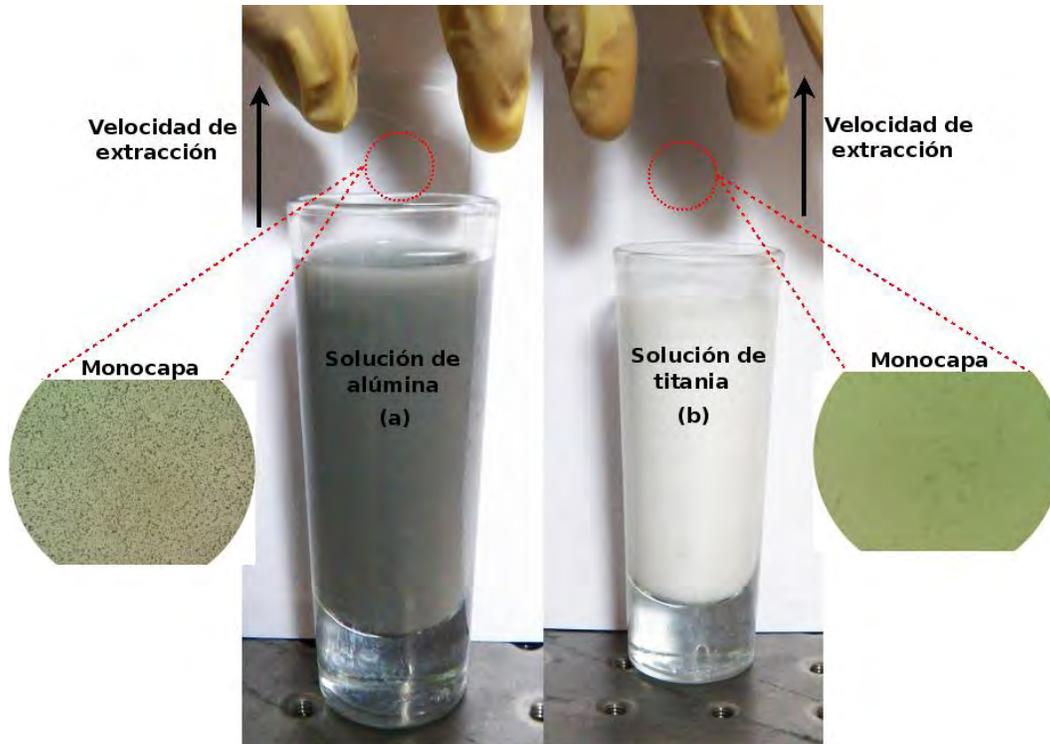


Figura 4.3: (a) Depósito de partículas de alúmina sobre la superficie de un portaobjetos (monocapa de alúmina). (b) Depósito de partículas de titanía sobre la superficie de un portaobjetos (monocapa de titanía). En ambas imágenes se muestran fotografías, tomadas por un microscopio óptico de la marca Leica, de la superficie del portaobjetos con la monocapa de partículas depositada.

jetos de la mezcla, se producen fuerzas intermoleculares y fuerzas de retracción, ocasionadas por la evaporación y drenado del solvente, que permiten la adherencia y el re-acomodo de las partículas de alúmina sobre la superficie del sustrato. Una vez que se ha evaporado y drenado todo el solvente restante de la superficie del portaobjetos, nos queda finalmente, la monocapa de partículas de alúmina por ambos lados del sustrato. Por último, basta con limpiar uno de ellos, con acetona y agua tridestilada, para obtener así la monocapa de partículas deseada en sólo una cara del sustrato.

El procedimiento descrito previamente, para el coloide de alúmina, se aplicó para tres portaobjetos, donde la inmersión y extracción de cada sustrato se realizó manualmente, Fig. 4.3; en cierta manera esto nos impidió estimar ambas velocidades. Sin embargo, los tiempos de inmersión y extracción se mantuvieron fijos para así garantizar una velocidad invariable, siendo éstos de 5s, 3s y 1s, para cada uno de ellos. Con esto se consiguieron tres monocapas de partículas de alúmina con su respectiva superficie de cubierta, todas ellas distintas entre sí. Por comodidad se ha tomado como nomenclatura, en este trabajo de investigación, para las tres monocapas de alúmina la siguiente: *AluM1*, *AluM2* y *AluM3*; cuyos resultados para la transmisión y reflexión de luz coherente se presentarán en el siguiente capítulo. El

mismo procedimiento descrito aquí se repitió, con parámetros idénticos, para la suspensión con partículas de titanía, donde se obtuvieron tres monocapas con sus respectivas superficies de cubierta, véase figura 4.3-(b). Para estas tres monocapas se utilizará la siguiente nomenclatura: *TitM1*, *TitM2* y *TitM3*.

Es importante recalcar que en este par de monocapas que se han depositado sobre el sustrato, tanto con partículas de alúmina como con partículas de titanía (con superficies de cubierta variable), no poseen una radio constante o tamaño fijo, por ende se ha tomado como hipótesis una función **log-normal** para la distribución de tamaño de éstas alrededor de un radio probable,  $a_o$ . Se sabe que las partículas de titanía poseen una distribución de tamaño log-normal (ver Ref. [42]), pero se desconoce, o no existe referencia, de la función correspondiente para la distribución de tamaño en partículas de alúmina. No obstante, se ha tomado como hipótesis una función *log-normal* para la distribución de tamaño en las partículas de alúmina, la misma función de distribución de tamaños que fue utilizada para elaborar el modelo teórico de reflexión y transmisión de luz coherente para monocapas de partículas polidispersas (ver Sec. 3.3), de aquí la importancia de aplicar este modelo en monocapas de partículas de alúmina. El radio probable utilizado en las partículas de alúmina fue de  $a_o = 1.5\mu m$ , y para las partículas de titanía fue de  $a_o = 220nm$ ; ambos proporcionados por el fabricante. **NOTA:** Estos valores fueron utilizados para generar las funciones correspondientes a las distribuciones de tamaño de estas dos monocapas. Donde el ancho de éstas utilizado en el ajuste teórico-experimental, fue de 1.3 y 1.4, para alúmina y titanía, respectivamente.

### 4.3. Arreglos experimentales para medir reflectancia y transmitancia en monocapas de partículas de alúmina y titanía

Previo a la descripción del arreglo experimental que fue utilizado para medir el haz coherente transmitido y reflejado para cada monocapa de partículas polidispersas en este trabajo, es pertinente detallar el tipo de configuración geométrica que se utilizó en este tipo de estudio. Si recordamos en el capítulo de introducción, 1.1, se describió el montaje experimental que se usó para medir la reflectancia, alrededor del ángulo crítico, de una monocapa de partículas de látex depositada sobre la base plana de un prisma de vidrio semicilíndrico inmerso en agua, véase Ref. [26]. Donde se hizo incidir un haz de láser desde la parte externa del prisma, hasta el interior de la base (con la monocapa absorbida) rodeada por el líquido. En este caso, el haz pasa de un índice de refracción mayor (prisma) a uno menor (agua). Cuando esto ocurre se dice que se está empleando una *configuración por reflexión interna*. En otras palabras, cuando un haz de luz atraviesa a un medio de índice de refracción menor se dice que se está empleando una configuración por reflexión interna. En contraste, cuando un haz de luz pasa a un medio con un índice de refracción mayor, se está empleando entonces una *configuración por reflexión externa*.

En el caso que nos concierne se empleó un arreglo experimental con una configuración

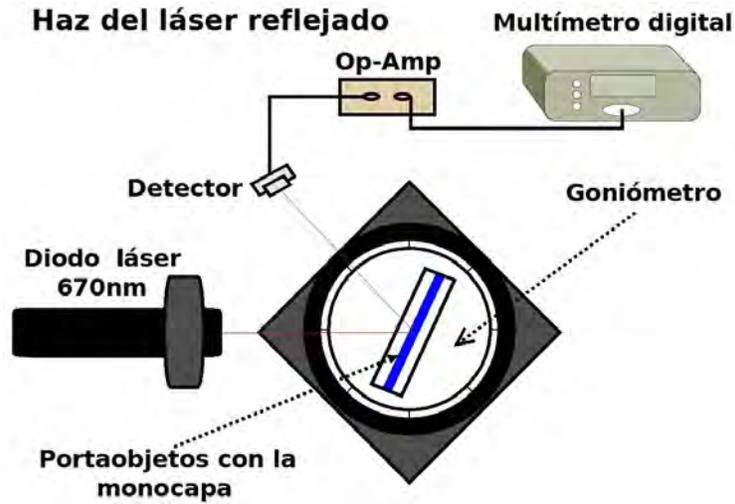


Figura 4.4: Esquema del arreglo experimental utilizado para medir la reflectancia de una monocapa de partículas polidispersas (alúmina y titanía).

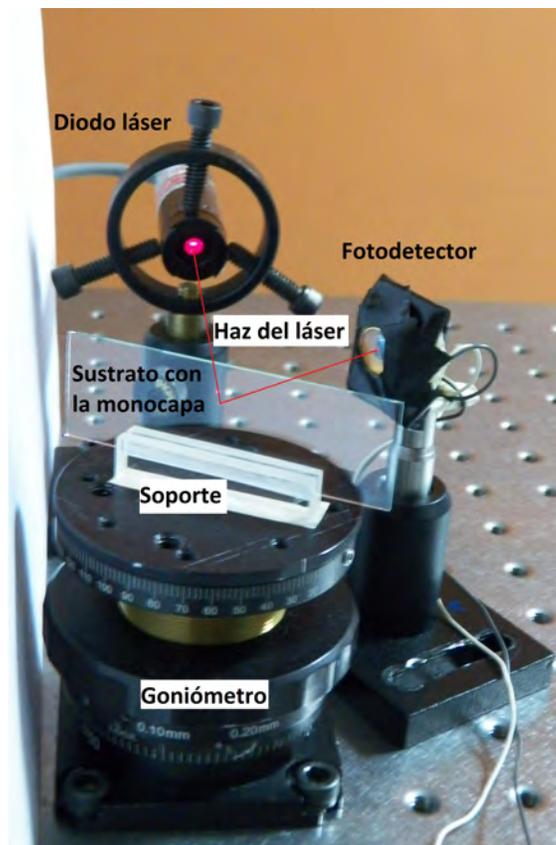


Figura 4.5: Fotografía del montaje experimental utilizado para medir la reflectancia de una monocapa de partículas polidispersas (alúmina y titanía).

por reflexión externa, donde el haz de láser se hace incidir primeramente en aire ( $n_1 = 1.00$ ), hasta llegar al sustrato de vidrio con índice de refracción  $n_2 = 1.50$ , para el cual se encuentra depositada, en éste, la monocapa de partículas polidispersas. El esquema del arreglo experimental empleado para medir el haz coherente reflejado para este par de monocapas de partículas polidispersas se muestra en la Fig. 4.4. Es importante, para evitar errores de medición, que el spot de láser incida siempre sobre la misma zona de la monocapa, esto independientemente del cambio que se haga en el ángulo de incidencia con el goniómetro. De aquí que se tuviera especial cuidado en la alineación óptica entre el láser y el portaobjetos, esto es que la monocapa del portaobjetos coincida con el eje de rotación del goniómetro, y que justamente, el haz del láser incida en el centro de este eje de rotación. Además, se usó un soporte que permitió mantener fijo y perpendicular al portaobjetos con la base del goniómetro, véase el arreglo experimental en la figura 4.5. Para este montaje experimental se utilizó un diodo láser de  $670nm$  en polarización  $TE$  marca *Lasiris*, un goniómetro *Thorlabs* para controlar y medir el ángulo de incidencia del haz,  $(\theta_i)$ . Cabe señalar, que el giro del goniómetro se ajustó de manera manual, y se midió para cada grado, de  $0^\circ$  hasta  $90^\circ$ , la intensidad de haz reflejado. La intensidad del haz reflejado como función del ángulo de incidencia se midió con un fotodetector de silicio *Edmund NT54034*, el cual se conectó a un circuito Op-Amp, para convertir la señal de corriente, del fotodetector, en una señal de voltaje. Este circuito se muestra en la Fig. 4.6. El voltaje de salida  $V_o$ , en función de la corriente del fotodetector,  $i_p$ , está dado por la expresión

$$V_o = i_p(r_1 + r_2), \quad (4.2)$$

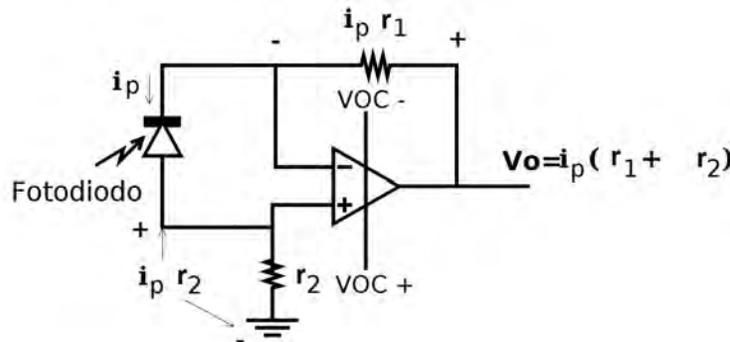


Figura 4.6: Circuito que muestra la conexión entre un fotodiodo y un amplificador operacional (amplificador de transimpedancia), que permite convertir la corriente generada por el fotodiodo en una señal de voltaje a la salida de éste.

En este circuito se empleó un amplificador operacional *TL082CP* y dos resistencias de  $1k\Omega$ , denotadas como  $r_1$  y  $r_2$ . La importancia de emplear este circuito operacional estriba en mantener un comportamiento lineal sobre la señal del voltaje cuando existe una variación en la corriente del fotodetector, que es ocasionada por la variación de la intensidad del haz que incide sobre el fotodetector, [43]. Finalmente el voltaje de salida  $V_o$  se midió con un multímetro digital *Agilent 34401A*, como se muestra en la Fig. 4.4. Todo el arreglo experimental se

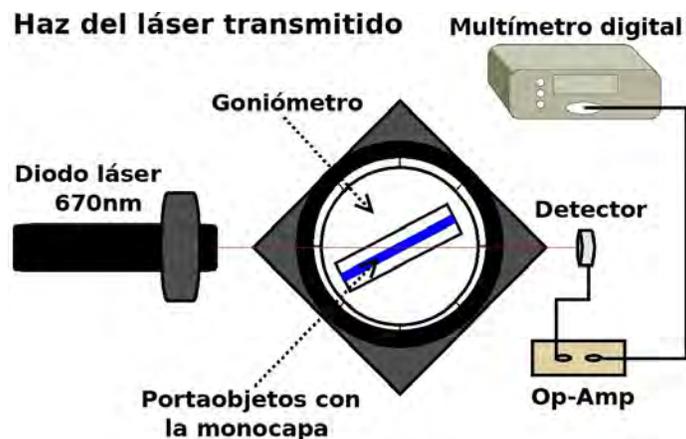


Figura 4.7: Esquema del arreglo experimental utilizado para medir la transmitancia de una monocapa de partículas polidispersas (alúmina y titanía).

montó sobre una mesa óptica, para reducir así las vibraciones mecánicas. El procedimiento aquí descrito se repitió para cada monocapa con su respectiva superficie de cubierta.

El segundo montaje experimental empleado para medir la transmitancia de luz coherente para este par de monocapas, alúmina y titanía, soportadas por un sustrato plano (portaobjetos), se muestra en la figura 4.7. Como se puede notar de esta figura, el esquema experimental es muy similar al mostrado previamente, ver Fig. 4.4; salvo que en este caso se medirá el haz transmitido coherente para cada monocapa en la misma región donde se midió el haz reflejado coherente, ello conlleva a que el fotodetector sea colocado posterior a la monocapa. La transmitancia se midió en un rango, para el ángulo de incidencia, que va de  $0^\circ$  hasta  $90^\circ$ . El equipo y material empleado en este montaje es el mismo al que se utilizó para medir la reflectancia, incluyendo también las monocapas. El arreglo experimental, para la medición de transmitancia, se muestra en la figura 4.8. Como se puede percibir de ambos montajes experimentales, figuras 4.5 y 4.8, el arreglo es relativamente sencillo y simple; esto nos permite, en sí, que éste sea altamente viable y factible para poder reproducirlo en cualquier otro laboratorio del mundo.

Por último como se había indicado previamente, las monocapas de alúmina y titanía que se han empleado para su respectivo estudio en la forma en que reflejan y transmiten la luz coherente, están constituidas por partículas cuyo tamaño es mayor a la longitud de onda incidente ( $670nm$ ), para el caso de monocapas con partículas de alúmina, y con partículas cuyo tamaño es menor pero comparable a la longitud de onda incidente, para las monocapas constituidas por partículas de titanía. Por tanto, la luz reflejada (y transmitida) de ambas monocapas, tendrá una *componente difusa* y una *componente coherente*, ver figura 4.9. La componente coherente viaja en una sola dirección y su amplitud es independiente de la ubicación aleatoria de las partículas sobre el sustrato, mientras que la componente difusa viaja en muchas direcciones con amplitudes que dependen de la posición específica de la partícula. Por lo tanto si uno toma el promedio del ensamble sobre las ubicaciones aleatorias de las partículas, sólo la componente coherente quedará, y por esta razón la componente coherente

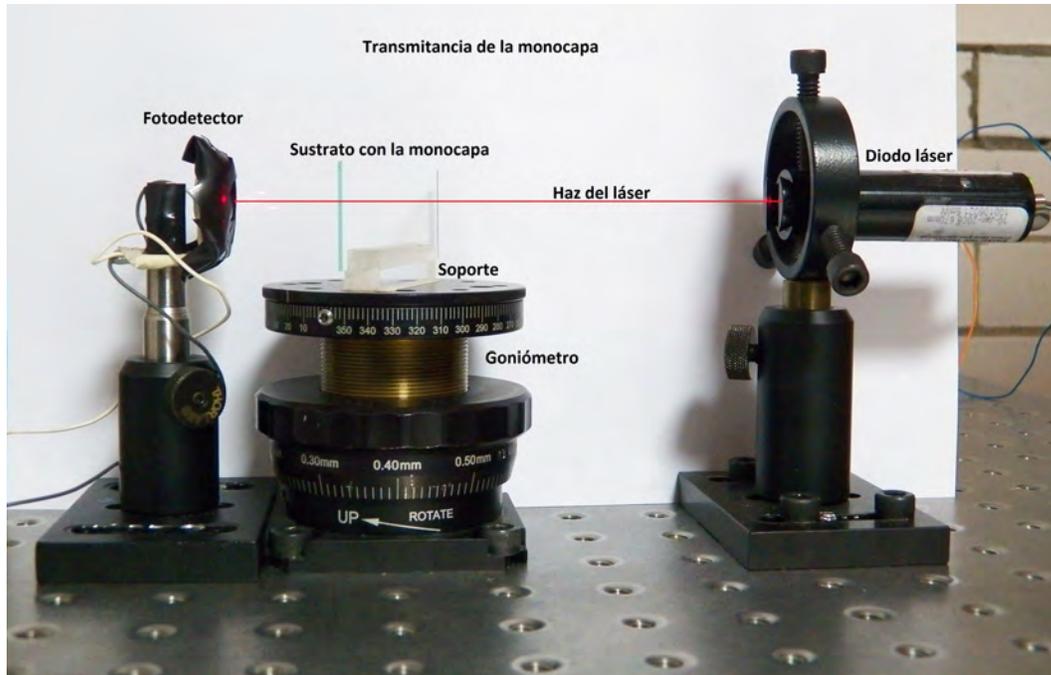


Figura 4.8: Fotografía del montaje experimental utilizado para medir la transmitancia de una monocapa de partículas polidispersas (alúmina y titanía).

es también llamada *campo promedio*, mientras que a la componente difusa se le conoce con el nombre de *campo fluctuante*. Es de vital importancia aclarar entonces que la componente coherente, que es la que se mide con el fotodetector para cierto ángulo de incidencia, del haz reflejado o transmitido de la monocapa, contiene también parte de la componente difusa, por lo que se procedió a medir la intensidad de esta componente para posteriormente restarla de la componente coherente. Para ello se desplazó al fotodetector fuera de la componente coherente, donde se midió el valor de su intensidad, tomando esta cantidad como una constante fija independientemente del ángulo de incidencia.<sup>6</sup> Por lo tanto, el valor normalizado de la transmitancia experimental corresponde a la resta entre la intensidad de la componente coherente y de la componente difusa, cantidad que se divide por la intensidad del spot del láser. De esta misma manera, la reflectancia experimental normalizada, corresponde a la diferencia entre la componente coherente y la componente difusa, ambas para el haz reflejado, dividida por la intensidad del haz de láser.<sup>7</sup> Esto repitió para cada ángulo de incidencia en todas las monocapas. Los resultados experimentales, para la reflectancia y transmitancia, de este par de monocapas se muestran en las secciones 5.1 y 5.2.

<sup>6</sup>Cabe señalar que esto no es del todo cierto, pero para fines de nuestro experimento se ha tomado como constante la intensidad de la componente difusa.

<sup>7</sup>A la respectiva intensidad del láser se le ha restado el ruido electrónico presente en el fotodetector, a lo que se le suele denominar corriente oscura. Este valor es de muy baja intensidad en comparación al valor de componente difusa, el cual es de  $518\mu V$ .

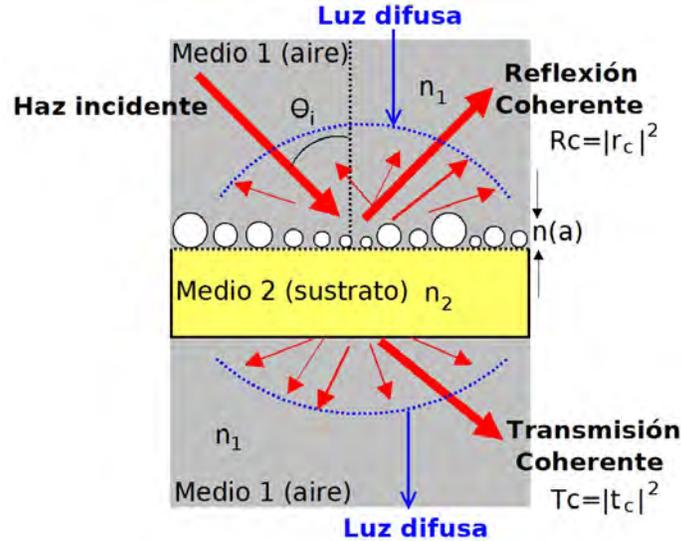


Figura 4.9: *Componente coherente y componente difusa para un haz de luz reflejado y transmitido por una monocapa de partículas polidispersas. Nótese las múltiples direcciones que posee la componente difusa, esto tanto para el haz reflejado como para el haz transmitido.*

#### 4.4. Arreglo experimental para medir el espectro de transmitancia en monocapas de partículas de alúmina y titanía

En este trabajo de investigación se han descrito dos modelos teóricos para determinar la reflectancia y transmitancia en monocapas con partículas monodispersas y polidispersas soportadas por una interfase plana transparente en función del ángulo de incidencia. Por tanto, para poder estudiar estos sistemas de manera experimental es necesario, como se ha descrito previamente, medir sus curvas de reflectancia y transmitancia en función del ángulo de incidencia y compararlas con los dos modelos teóricos desarrollados en la sección 3.2 y 3.3. Por otra parte, no es la única forma de analizar estos sistemas de manera teórica y experimental. Otro método óptico planteado en esta tesis es la de estudiar sus espectros de transmitancia y reflectancia, empleando la técnica de espectrometría (para el caso experimental); y comparar estos con los modelos teóricos, pero ahora, en función de la longitud de onda incidente para un ángulo fijo (en nuestro caso a  $0^\circ$ , o mejor dicho, a incidencia normal).

La técnica de espectrometría consiste en caracterizar la luz proveniente de un objeto de acuerdo a sus longitudes de onda que le componen, esto con ayuda de un instrumento llamado *espectrofotómetro*. El resultado de la espectrometría es una curva de intensidad contra longitud de onda, llamada comúnmente *espectro*, véase figura 4.11. La longitud de onda de la luz emitida o absorbida por un cuerpo depende esencialmente de las interacciones entre los niveles de energía en los electrones orbitales externos, de los átomos que componen al cuerpo, y de la energía de la onda electromagnética incidente. En nuestro caso tenemos la

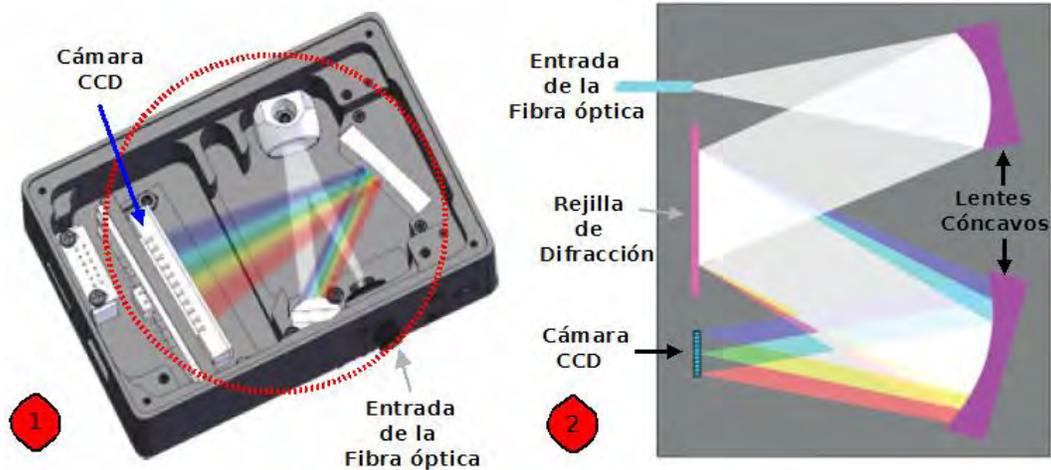


Figura 4.10: (1) Esquema interno de un espectrofotómetro con rejilla de difracción. (2) Componentes internos principales de un espectrofotómetro con rejilla de difracción.

interacción entre la onda electromagnética incidente y las partículas de alúmina (o titania) soportadas por un sustrato plano de vidrio, véase los capítulos 2 y 3.

Sin duda, un instrumento que ha sido fundamental para el desarrollo de la ciencia ha sido el *espectrofotómetro*. Gracias a él se han podido analizar los espectros de luz emitidos por fuentes luminosas de todo tipo. Con el estudio de estos espectros se ha podido determinar la estructura del átomo y de las moléculas, además de la constitución química de todo tipo de fuentes luminosas, entre las que se encuentran los cuerpos celestes como las estrellas y las nebulosas. El funcionamiento del espectrofotómetro está basado en la descomposición de la luz, que le llega de los objetos o fuentes luminosas, en las diferentes longitudes de onda que la componen, a partir del fenómeno de refracción que sucede en un prisma (para un espectrofotómetro con prisma), o a partir del fenómeno de difracción de la luz que se produce en una rejilla de difracción (espectrofotómetro con rejilla de difracción). Cabe mencionar que estos espectros de emisión o absorción son el equivalente a la “huella digital” del objeto que se está analizando, pues su espectro es único. Los componentes básicos de un espectrofotómetro son:

- **Entrada.** El espectrofotómetro tiene un puerto de entrada de fibra óptica, donde se induce la radiación electromagnética proveniente de la fuente u objeto, Fig. 4.10.
- **Colimador.** Este sistema óptico nos permite producir un haz de luz paralela a partir de un haz divergente, es decir, se homogeneizan las trayectorias que, emitidos por una fuente, poseen múltiples direcciones para obtener así un conjunto de rayos con las mismas propiedades ópticas (la misma dirección de convergencia).
- **Prisma.** Su función estriba en dispersar la luz incidente en sus diferentes longitudes de onda. Las dimensiones, la forma y el tipo de vidrio, determinan la medida de la dispersión del haz incidente.

- **Rejilla de difracción.** Este componente desempeña la misma función que la del prisma, dispersar la luz en sus diferentes longitudes de onda; pero utilizando otra propiedad óptica, difracción de la luz [Ref. [39]]. Esta rejilla consiste de una serie de líneas muy delgadas paralelas entre si y muy cerca una de otra sobre una superficie plana que puede ser transparente o reflectora. La fabricación de ésta es compleja, pues se tienen que grabar las hendiduras en una placa de aluminio con una punta de diamante, donde pueden haber hasta 1200 líneas en un milímetro. La distancia, profundidad, y paralelismo entre ellas determinan el rango espectral y su resolución óptica.
- **Lentes cóncavos.** Su función es la de re-direccionar la luz proveniente del colimador hacia el prisma o rejilla, así como la del propio espectro de luz, producido por éstos, hacia el sensor CCD.
- **Sensor CCD.** Este dispositivo permite convertir el espectro luminoso en una señal eléctrica. El sensor CCD está compuesto por píxeles individuales, de tal manera que cuando el espectro (la dispersión cromática del haz) incide sobre estos, cada píxel representa una porción del espectro en una señal eléctrica que se puede traducir y visualizar con una intensidad dada utilizando el *software* de una computadora personal, como se puede percibir en la figura 4.13. Este avance ha permitido que los espectrómetros o espectrofotómetros carezcan de partes móviles, y por tanto su tamaño se vea reducido así como el consumo de energía.

En la actualidad los espectrofotómetros de prisma son obsoletos, pues tienen muchas limitaciones, entre ellas la dispersión cromática de la luz, en éstos, no es lineal, sin mencionar que ésta depende mucho del tipo de vidrio y de la forma geométrica que se emplea para su fabricación, lo que conlleva a la elevación de costos para su manufactura. Otra desventaja es su baja sensibilidad para longitudes de onda corta (azul y UV), pues son fácilmente absorbidas por el vidrio, además de que recorren la mayor distancia dentro del prisma provocando una baja resolución. En la actualidad la mayoría de los espectrofotómetros emplean una rejilla de difracción para obtener el espectro de una fuente u objeto. En la figura 4.10, se muestra el esquema de los componentes internos principales de un espectrofotómetro con rejilla de difracción, muy similar al empleado para estudiar los espectros de transmitancia en las monocapas de alúmina y titanía de este trabajo.

A diferencia de los dos montajes experimentales utilizados previamente en el que la longitud de onda es fija y el ángulo de incidencia es variable. En este caso tenemos un arreglo experimental donde la longitud de onda es “variable” pero el ángulo de incidencia es fijo; se entiende por una longitud de onda variable un rango o ancho continuo de longitudes de onda incidiendo todas a la vez, a incidencia normal, sobre la monocapa depositada en el portaobjetos . Una fuente de luz que es capaz de proporcionarnos un rango amplio con distintas longitudes de onda es la *luz blanca*. En este arreglo experimental se usó como fuente de luz un *LED XR-C* de la marca *CREE*, con un rango espectral de  $450nm$  a  $700nm$ ; cuyo espectro se muestra en la figura 4.11. La luz blanca de este LED se colimó con un diafragma óptico, para reducir así el ancho del spot y tener un frente de onda lo suficientemente plano,

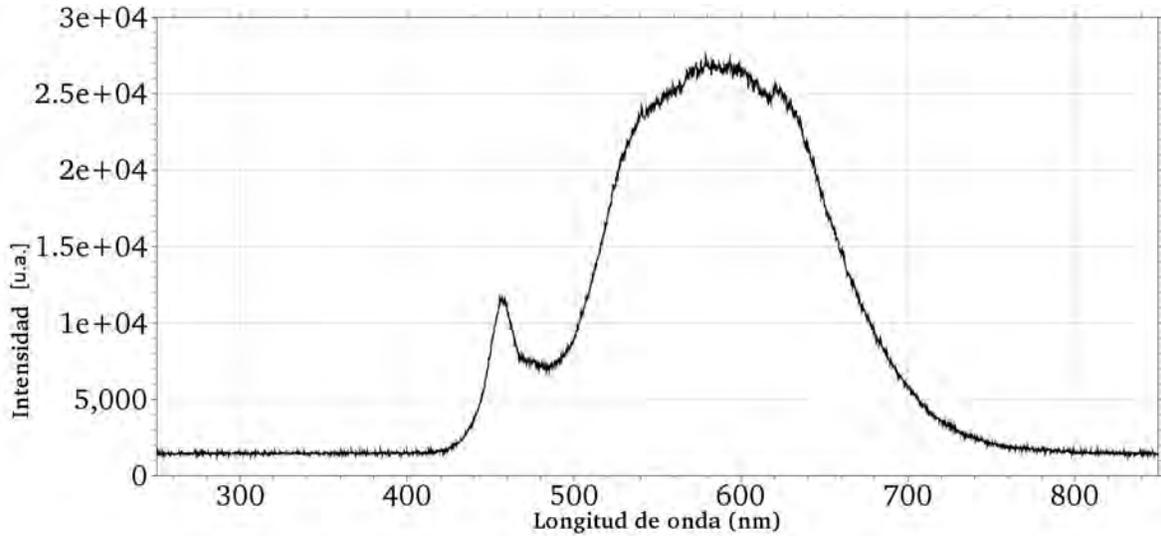


Figura 4.11: *Espectro de emisión del fotodiodo usado para iluminar la monocapa.*

de tal manera que éste incida de manera paralela a la normal del plano de la monocapa, sobre las partículas polidispersas en la misma zona o región donde se midieron las curvas de reflectancia y transmitancia, esto sólo para las monocapas denotadas como *AluM1* y *TitM2*. El haz de luz transmitido, por el sistema monocapa-sustrato-aire, es enviado a través de una fibra óptica de  $600\mu m$  hasta la entrada del espectrofotómetro<sup>8</sup>. El esquema del arreglo experimental utilizado para medir el espectro de transmitancia de la monocapa con partículas alúmina (o titania) se muestra en la figura 4.12.

El uso de otros dispositivos para llevar a cabo la medición, implicó un nuevo arreglo experimental, ver Fig. 4.12, y por tanto, de la misma manera que los arreglos anteriores, el alineamiento óptico en este experimento fue crucial. Lo que implicó que el spot colimado de luz blanca debiese estar alineado con el eje de rotación de la monocapa y del mismo goniómetro, además de incidir en la misma zona de donde se midieron las curvas de reflectancia y transmitancia para este par de monocapas; para tal propósito se empleó un micrómetro que nos permitió mover, en el plano  $XY$ , al portaobjetos con la monocapa y poder realizar adecuadamente el alineamiento del sistema óptico experimental, como se puede notar en la figura 4.13.

Siguiendo con el análisis experimental, cuando el haz colimado de luz blanca con intensidad  $I_o$  incide sobre el portaobjetos (con la monocapa), parte de esta radiación se absorberá  $I_a$ , cierta cantidad de luz será transmitida, con intensidad  $I_t$ , y una parte será reflejada  $I_r$ , de forma que  $I_o = I_a + I_t + I_r$ . La transmitancia que se mida del sustrato con la monocapa es la relación entre la cantidad de luz transmitida que llega al detector (la fibra óptica), cuando atraviesa al sistema,  $I_t$ , y la cantidad de luz que incidió sobre ella,  $I_o$ . De aquí que se midiera

<sup>8</sup>Para medir los espectros transmitancia se empleó un espectrofotómetro de la marca *Ocean Optics USB4000*.

## Espectro de Transmitancia

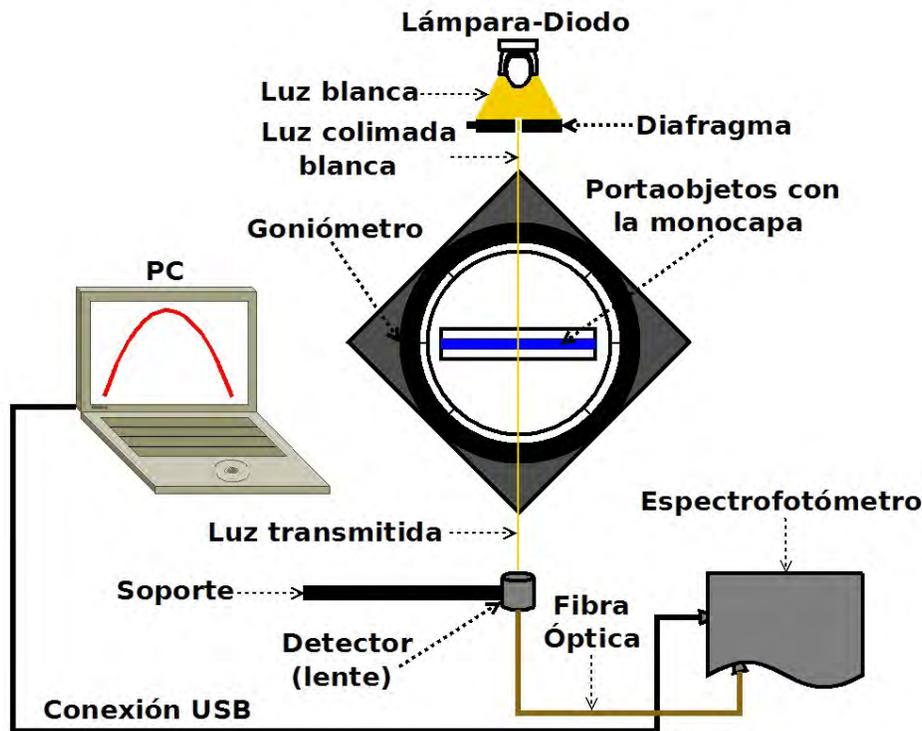


Figura 4.12: Esquema del arreglo experimental empleado para medir el espectro de transmitancia de una monocapa de partículas polidispersas (alúmina y titanía).

la intensidad<sup>9</sup> del espectro solamente para el LED (sin el sustrato con la monocapa), para posteriormente medir la intensidad del espectro que atraviesa al sustrato con la monocapa, y así con el *software* del espectrofotómetro obtener el espectro de transmitancia para las muestras. El espectro de transmitancia nos proporciona una medida física de la relación entre la intensidad incidente y la intensidad transmitida por la muestra para un amplio rango de longitudes de onda. Por último, dada la baja intensidad, en magnitud, del espectro reflejado no resultó posible, con este arreglo experimental, medir el espectro reflejado para cada monocapa. Esta baja intensidad se pudo corroborar con el modelo teórico correspondiente al espectro. Los resultados experimentales, para los espectros de transmitancia, de este par de monocapas *AluM1* y *TitM2*, se muestran en la sección 5.1 y 5.2.

De manera concluyente en este capítulo se han mostrado los arreglos experimentales utilizados para medir la reflectancia y transmitancia coherente en función del ángulo de incidencia para dos tipos de monocapas, alúmina y titanía, para distintas fracciones de cubierta. De igual forma se ha mostrado el arreglo experimental empleado para medir el espectro de transmitancia en dos muestras de monocapas, alúmina y titanía, a incidencia normal.

<sup>9</sup>Con ayuda del *software* que controla al espectrofotómetro, se ha eliminado el ruido de fondo para el espectro de incidencia, conocido como *dark noise*.

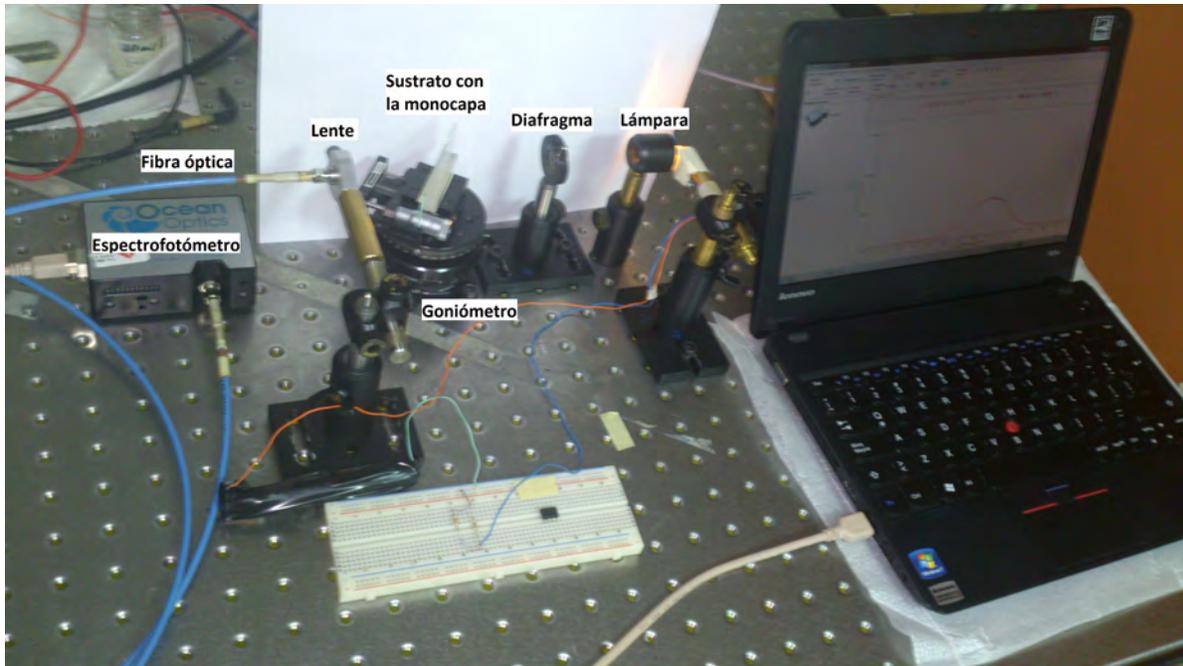


Figura 4.13: *Fotografía del montaje experimental utilizado para medir el espectro de transmitancia de una monocapa de partículas polidispersas (alúmina y titania).*

Los resultados correspondientes a estos arreglos experimentales se muestran en el siguiente capítulo.

# Capítulo 5

## Resultados experimentales

En las secciones 3.2, 3.3 y 3.4 se discutieron los modelos teóricos para la reflexión y transmisión de luz coherente desde una monocapa constituida por partículas monodispersas y polidispersas depositadas sobre un sustrato plano. Las curvas experimentales para la reflectancia y transmitancia, correspondientes a las monocapas con partículas de alúmina (depositadas sobre un portaobjetos), que se obtuvieron con los arreglos experimentales propuestos en este trabajo (sección 4.3), se muestran en la primera sección de este capítulo. Junto a éstas se presentan también las curvas teóricas correspondientes a cada muestra de esta monocapa. Esto nos permite un análisis de comparación sencillo entre los dos modelos teóricos (caso monodisperso y polidisperso) y los datos experimentales que se midieron. Además se anexa, en esta primera sección, los espectros de transmitancia a incidencia normal, tanto para el caso experimental como teórico, para una muestra elegida de la monocapa de partículas de alúmina. De la misma manera, en la segunda parte de este capítulo, se exponen los resultados teóricos-experimentales para la reflectancia y transmitancia correspondientes a la monocapa de partículas de dióxido de titanio, así como su correspondiente espectro de transmitancia experimental y teórico. En la última sección del presente capítulo, se da un análisis conciso de todos los resultados experimentales obtenidos para este par de monocapas.

### 5.1. Resultados experimentales para la monocapa de alúmina

Antes de mostrar los resultados experimentales es pertinente describir de forma muy breve qué es lo que diferencia a una muestra de otra. Recordemos que se obtuvieron tres muestras para la monocapa de alúmina y tres más para la monocapa de titania, por medio de la técnica *dip-coating* (véase la sección 4.1 y 4.2). Podemos decir que cada tipo de muestra (alúmina o titania) posee los mismos parámetros como: índice de refracción de la partícula, índice de refracción para el sustrato, el mismo índice de refracción del medio al cual están inmersas (aire en este caso), la función y ancho para la distribución de tamaños, y el mismo radio promedio para la partícula. Todos estos parámetros son comunes entre cada tipo de

muestra<sup>1</sup> excepto en un parámetro y es en la **fracción de cubierta**,  $\Theta$ . En breve, la fracción de cubierta es lo que diferencia a cada muestra de la monocapa correspondiente, y cada una de ellas se denota para este trabajo como: *AluM1*, *AluM2* y *AluM3* para las monocapas con partículas de alúmina. Para las monocapas con partículas de titania las denotamos como: *TitM1*, *TitM2* y *TitM3*.

En esta primera parte se muestran los resultados correspondientes a las monocapas de alúmina depositadas sobre un portaobjetos. Como se mencionó en la sección previa, en donde se describieron los montajes experimentales, Sec. 4.3, estos datos corresponden a la reflectancia y transmitancia de luz coherente que se midieron para cada muestra a diferentes ángulos de incidencia,  $\theta_i$ . Recordemos también que este tipo de montaje experimental posee una geometría por configuración externa, de donde se tiene un sistema óptico: aire-monocapa-sustrato-aire. De aquí la importancia de ajustar los valores experimentales con las expresiones correctas deducidas para este sistema específico, Exps. 3.108, 3.110, 3.111 y 3.112, las dos primeras correspondientes al caso monodisperso y las dos siguientes al polidisperso. Además, es importante mencionar que los parámetros, correspondientes a cada muestra, utilizados para el ajuste teórico-experimental, es decir, el ajuste entre las curvas teóricas y los datos experimentales, se muestran en las tablas 5.1, 5.2 y 5.3. Los parámetros específicos de estas tablas se utilizaron en el programa descrito en el apéndice B, el cual nos permitió obtener las curvas teóricas y compararlas con los “datos experimentales” para cada muestra. Algunos de los parámetros de estas tablas fueron proporcionadas por el fabricante, como es el tamaño promedio de las partículas; mientras que otros se obtuvieron de tablas tomadas de algunas bibliografías, como es el índice de refracción del vidrio, por ejemplo.

Como primer resultado de este trabajo se quiso corroborar que las curvas teóricas de reflectancia y transmitancia con una superficie de cubierta nula,  $\Theta = 0$ , se ajustaran a las curvas de reflectancia y transmitancia de un portaobjetos sin monocapa alguna depositada en éste, es decir un portaobjetos totalmente limpio, esto para un ángulo de incidencia de  $0^\circ$  a  $90^\circ$ . Para ello simplemente en el programa del apéndice B, se iguala la fracción de cubierta  $\Theta$  con el valor cero. En la figura 5.1 se muestran las curvas teóricas correspondientes a la reflectancia y transmitancia (curvas roja y azul, respectivamente) del portaobjetos con una superficie de cubierta nula, y los datos experimentales para la reflectancia y transmitancia del portaobjetos (cuadrados y círculos respectivamente).

De esta gráfica podemos ver que los datos experimentales se ajustan bastante bien a la forma de las curvas teóricas obtenidas de las expresiones 3.111 y 3.112, para el caso polidisperso, de donde se ha tomado una superficie de cubierta,  $\Theta = 0$  (lo que equivale a tener un sustrato sin monocapa depositada). Para este caso en particular se hizo incidir un haz de láser con polarización *TE* directamente en la superficie del portaobjetos de donde se midió su transmitancia y reflectancia del haz coherente. Sin embargo, aunque la forma de las curvas se ajusta de manera adecuada a los datos experimentales, podemos observar que algunos de estos datos se alejan un poco de las líneas teóricas, sobretudo en ángulos rasantes.

---

<sup>1</sup>Es importante hacer notar que estos parámetros son totalmente distintos de monocapa a monocapa, pues cada una de ellas fue elaborada con una partícula específica, en este caso alúmina (o titania). Donde cada una de éstas tiene su propio índice de refracción y tamaño de partícula específico.

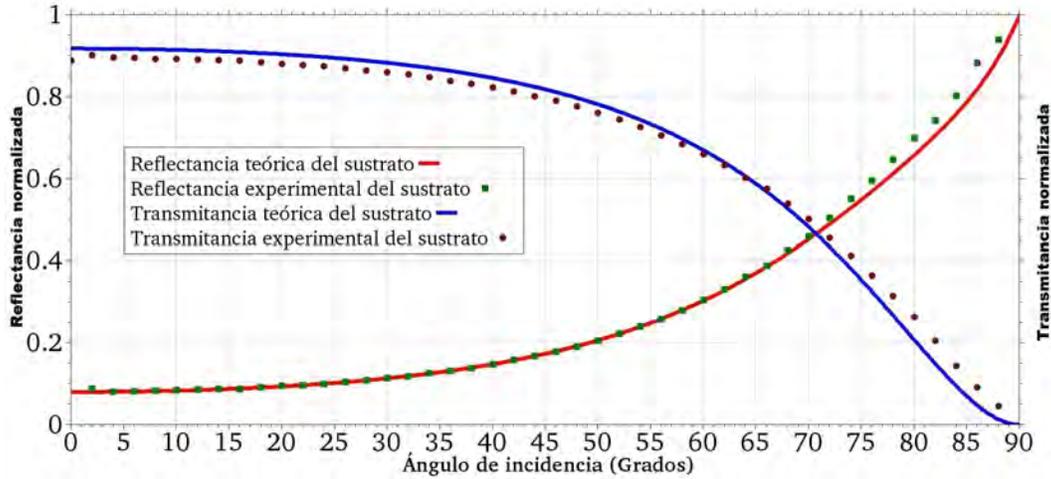


Figura 5.1: *Reflectancia y transmitancia teórica-experimental de un portaobjetos sin monocapa depositada.*

Una posible explicación de esta discrepancia es que la superficie del portaobjetos no sea del todo plana, sin mencionar que la forma geométrica del haz se ve afectada cuando existe una variación del ángulo de incidencia en el sistema óptico (giro del goniómetro junto con el sustrato), sobre todo para ángulos de incidencia mayores a  $70^\circ$ , que es donde se observa que el spot del haz empieza a deformarse sobre la superficie del portaobjetos (perceptible a simple vista), además corresponde al rango donde se evidencia la divergencia entre los datos experimentales y los modelos teóricos. Es importante destacar que este modelo no se planteo para describir perfectamente este tipo de situación, sin embargo se puede ver que es consistente en reproducir la forma de los datos experimentales cuando en él se dan las condiciones que se tienen del sistema experimental.

Una vez que se ha corroborado el ajuste adecuado entre el modelo teórico (para el caso polidisperso), y las curvas correspondientes a la reflectancia y transmitancia del portaobjetos, el siguiente paso es presentar las curvas teórico-experimentales para cada muestra correspondientes a la monocapa de partículas de alúmina. Como se mencionó, las curvas teóricas se obtuvieron de los parámetros mostrados de sus respectivas tablas. En las figuras 5.2, 5.4 y 5.6 se exhiben las curvas de reflectancia de luz coherente para las monocapas de partículas de alúmina correspondientes a las muestras *AluM1*, *AluM2* y *AluM3*, respectivamente. Donde los círculos rojos corresponden a los datos experimentales, la línea azul corresponde al caso monodisperso y la línea negra corresponde al caso polidisperso. Observe de estas curvas las oscilaciones que se presentan para el caso monodisperso, estas debidas a resonancias de Mie presentes para aquellas partículas cuyo tamaño es uniforme y mayor a la longitud de onda incidente. Sin embargo, como se puede constatar estas oscilaciones se suprimen para el caso polidisperso, en el que se ha considerado una distribución de tamaños asociado a las partículas de alúmina del tipo log-normal. Además, en este caso el ajuste es mucho mejor entre el modelo, para el caso polidisperso, y los datos experimentales. Nótese la peculiaridad de la forma que poseen estas curvas, existe una cresta que se forma entre un rango que va

de los  $50^\circ$  hasta los  $80^\circ$ , esto para las tres muestras. De donde a mayor concentración de partículas en la superficie del portaobjetos menor es el tamaño de ésta, contrario a esto, a menor fracción de cubierta mayor tamaño de la cresta.

En las figuras 5.3, 5.5 y 5.7 se presentan las curvas de transmitancia de luz coherente para las monocapas de partículas de alúmina correspondientes a las muestras *AluM1*, *AluM2* y *AluM3*, respectivamente. En cada una de estas gráficas se han empleado los mismos parámetros que fueron utilizados para generar las curvas teóricas correspondientes a la reflectancia, salvo que en este caso se utilizaron las expresiones 3.110 y 3.112, para generar estas curvas (monodisperso y polidisperso). En estas curvas los círculos rojos representan los datos experimentales, la línea azul corresponde al caso monodisperso y la línea negra al modelo polidisperso. Note de estas curvas teóricas que no hay mucha diferencia entre el caso monodisperso y polidisperso, apenas son perceptibles pequeñas oscilaciones presentes en el caso monodisperso. Por último, los únicos parámetros que se tomaron de forma tal que nos permitieran un empalme adecuado entre la valores experimentales y las curvas teóricas (en las curvas reflectancia y transmitancia) fueron el ancho para la distribución de tamaños en las partículas de alúmina, el cual se consideró con un valor de  $\sigma = 1.3$ , y la fracción de cubierta respectiva para cada par de ellas.

Como se había mencionado previamente, el modelo para el caso monodisperso y polidisperso pueden estar en función del ángulo de incidencia  $\theta_i$  para una longitud de onda específica, o bien, como función de la longitud de onda,  $\lambda$ , para un ángulo de incidencia fijo. En este último caso, es necesario por tanto tener una fuente luminosa que nos proporcione un ancho espectral de forma que éste incida directamente en la monocapa depositada sobre el sustrato, en nuestro caso un diodo emisor de luz blanca, véase sección 4.3. Sin duda, los espectros transmitancia y reflectancia, de una monocapa, son otra forma de poder estudiarlas. En la figura 5.8 se muestran los espectros de transmitancia, a incidencia normal, para una monocapa de partículas de alúmina correspondiente a la muestra *AluM1*, esto para un ancho espectral de  $450nm$  a  $700nm$ . Los círculos azules corresponden al caso monodisperso, los cuadrados negros al caso polidisperso y la línea continua es el espectro de transmitancia experimental de la monocapa. Observe el buen ajuste entre el caso polidisperso y el espectro experimental para dicha muestra, una línea horizontal; no obstante para el caso monodisperso se observan pequeñas oscilaciones de muy baja intensidad (apenas perceptibles). Los parámetros que fueron utilizados para determinar este par de espectros teóricos se obtuvieron de la tabla 5.1 (incluida también la superficie de cubierta  $\Theta$ ), los cuales se sustituyeron en el algoritmo mostrado en el apéndice C. Por lo que se concluye que la superficie de cubierta,  $\Theta$ , para esta muestra, debe ser la correcta.<sup>2</sup> Finalmente, en la figura 5.9 se muestran los espectros de reflectancia teóricos obtenidos con los parámetros de la tabla 5.1 (muestra *AluM1*), donde se observa la baja intensidad del espectro, de aquí que se pueda entender por qué nos resultó imposible medir este espectro con nuestro arreglo experimental. En este par de espectros es muy apreciable la forma única que poseen cada uno de ellos.

---

<sup>2</sup>Véase la sección 6.1 en el que se describe otro método para determinar esta cantidad.

Parámetro de ajuste	Superficie de cubierta	Radio $a_o$	Ancho de la gaussiana	Índice de refracción de la partícula $n_p$	Índice de refracción del aire $n_1$	Índice de refracción del sustrato $n_2$
Valor	0.057	$1.5\mu m$	1.3	1.76463	1.0002761	1.515

Cuadro 5.1: Parámetros de ajuste para la monocapa de partículas de alúmina correspondientes a la muestra, *AluM1*.

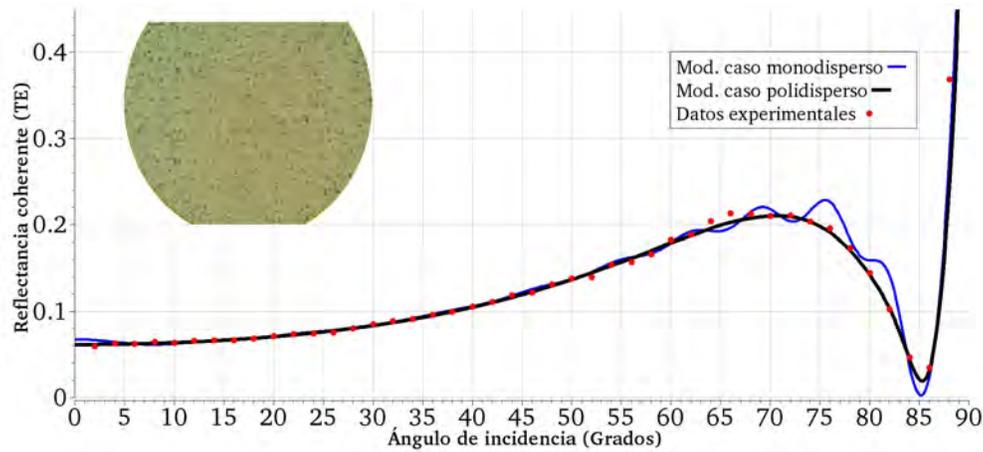


Figura 5.2: *Reflectancia coherente para la monocapa de partículas de alúmina (muestra AluM1). En la parte superior izquierda se exhibe una micrografía de la monocapa correspondiente a esta muestra.*

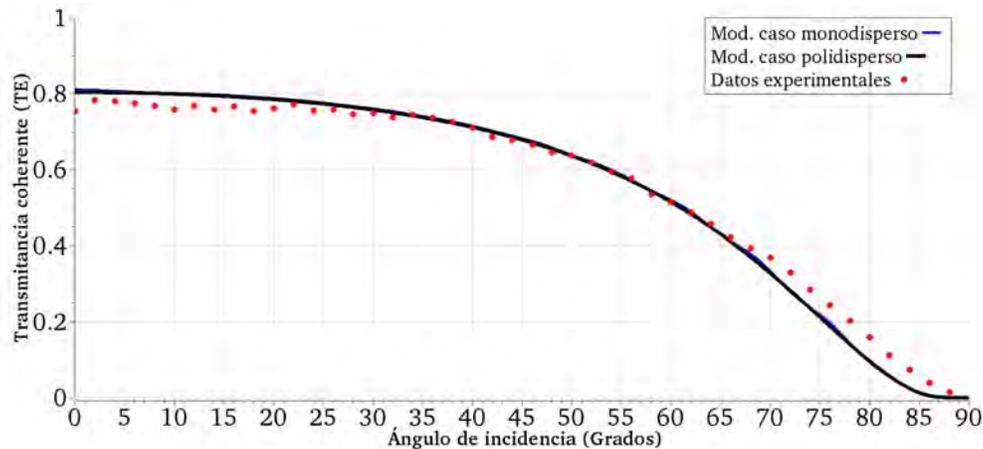


Figura 5.3: *Transmitancia coherente para la monocapa de partículas de alúmina (muestra AluM1).*

Parámetro de ajuste	Superficie de cubierta	Radio $a_o$	Ancho de la gaussiana	Índice de refracción de la partícula $n_p$	Índice de refracción del aire $n_1$	Índice de refracción del sustrato $n_2$
Valor	0.038	$1.5\mu m$	1.3	1.76463	1.0002761	1.515

Cuadro 5.2: Parámetros de ajuste para la monocapa de partículas de alúmina correspondientes a la muestra, *AluM2*.

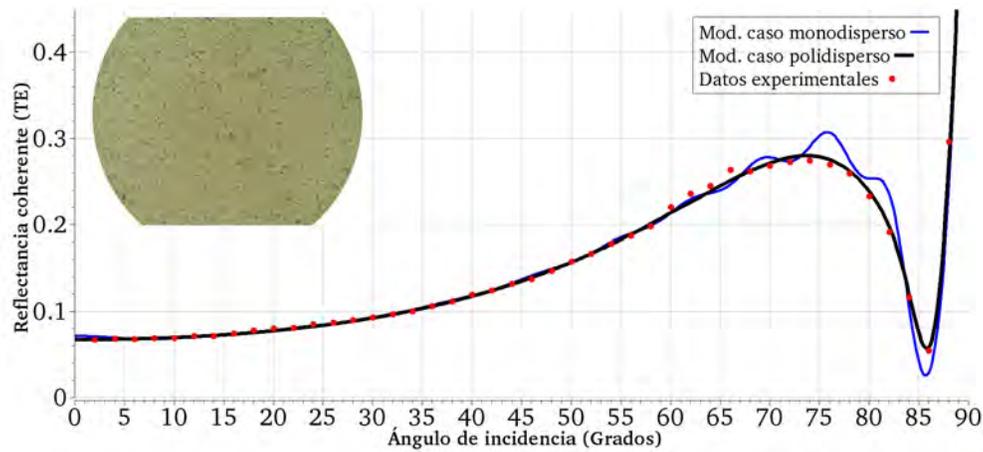


Figura 5.4: *Reflectancia coherente para la monocapa de partículas de alúmina (muestra AluM2). En la parte superior izquierda se exhibe una micrografía de la monocapa correspondiente a esta muestra.*

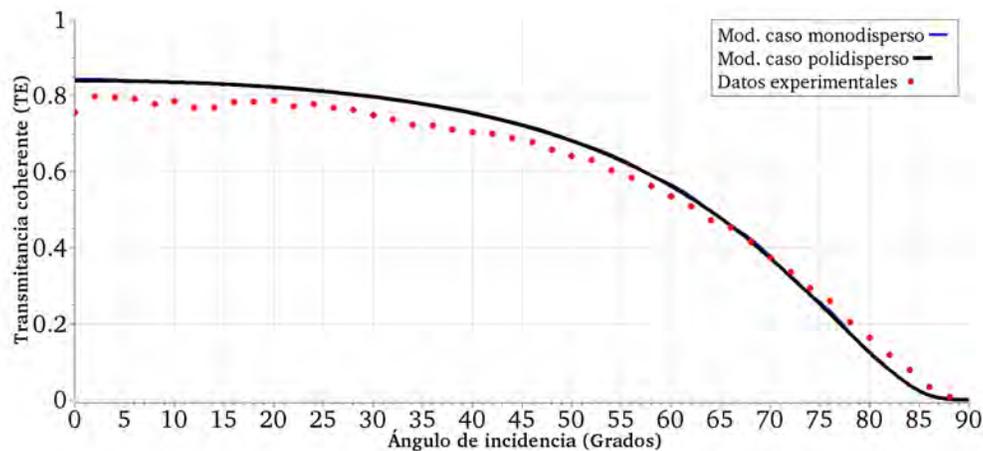


Figura 5.5: *Transmitancia coherente para la monocapa de partículas de alúmina (muestra AluM2).*

Parámetro de ajuste	Superficie de cubierta	Radio $a_o$	Ancho de la gaussiana	Índice de refracción de la partícula $n_p$	Índice de refracción del aire $n_1$	Índice de refracción del sustrato $n_2$
Valor	0.106	$1.5\mu m$	1.3	1.76463	1.0002761	1.515

Cuadro 5.3: Parámetros de ajuste para la monocapa de partículas de alúmina correspondientes a la muestra, *AluM3*.

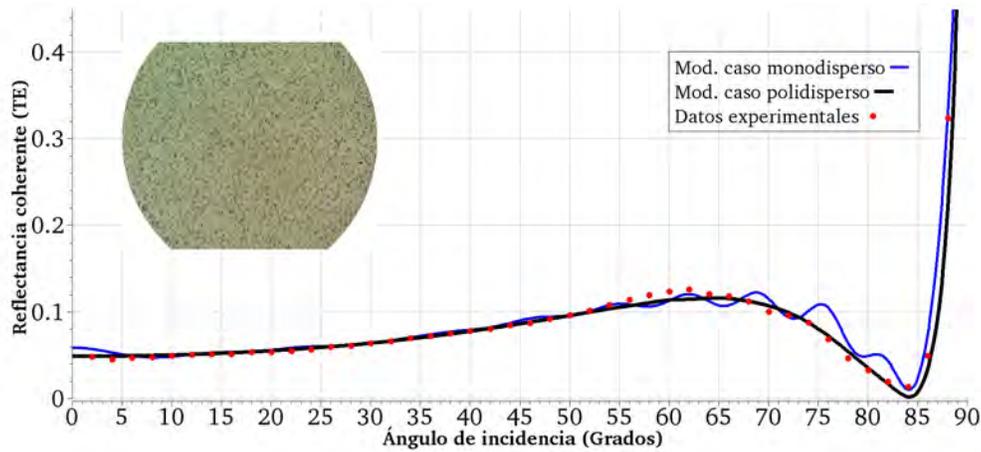


Figura 5.6: *Reflectancia coherente para la monocapa de partículas de alúmina (muestra AluM3). En la parte superior izquierda se exhibe una micrografía de la monocapa correspondiente a esta muestra.*

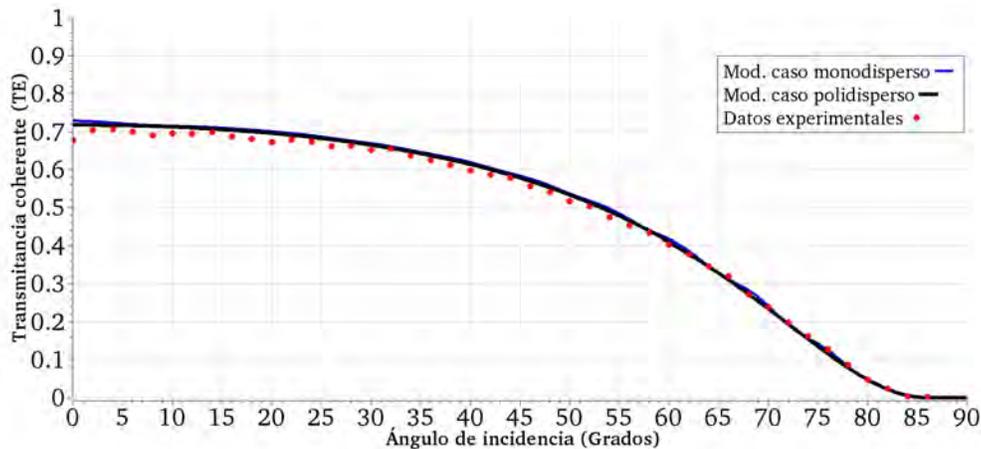


Figura 5.7: *Transmitancia coherente para la monocapa de partículas de alúmina (muestra AluM3).*

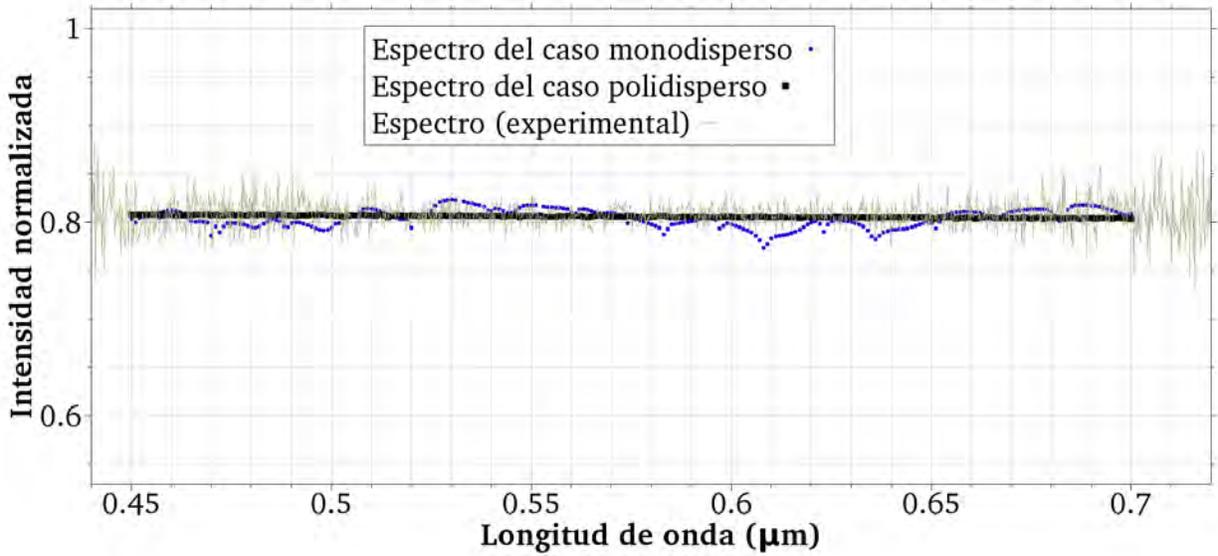


Figura 5.8: *Espectros de transmitancia teórico-experimental para la monocapa de partículas de alúmina correspondientes a la muestra AluM1.*

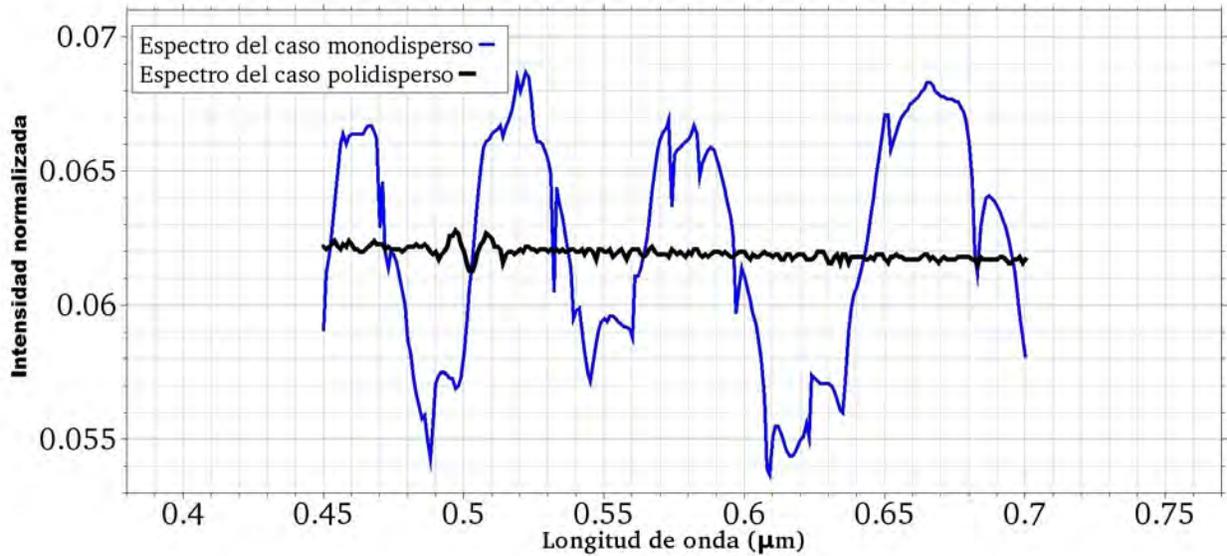


Figura 5.9: *Espectros de reflectancia teóricos para la monocapa de partículas de alúmina correspondientes a la muestra AluM1.*

## 5.2. Resultados experimentales para la monocapa de titania

En esta sección se describen los resultados teórico-experimentales para la monocapa de partículas de titania correspondientes a las muestras *TitM1*, *TitM2* y *TitM3*. Los parámetros de ajuste que se utilizaron para obtener las gráficas teóricas se muestran, respectivamente, en las tablas 5.4, 5.5 y 5.6. Estos parámetros se sustituyeron en el programa del apéndice B, para obtener así, las curvas de reflectancia y transmitancia teóricas de cada muestra.

En las figuras 5.10, 5.12 y 5.14 se exhiben las curvas de reflectancia de luz coherente para las monocapas de partículas de titania correspondientes a las muestras *TitM1*, *TitM2* y *TitM3*, respectivamente. Donde los círculos rojos corresponden a los datos experimentales, la línea azul pertenece al caso monodisperso y la línea negra describe al caso polidisperso. De estas gráficas podemos observar que la forma de estas tres curvas, para cada muestra, son totalmente distintas de las obtenidas con las monocapas de alúmina, y esta diferencia se debe obviamente al hecho de que se están empleando partículas mucho más pequeñas y con un índice de refracción distinto. Además, se puede ver nuevamente que el modelo teórico, para el caso polidisperso, describe mucho mejor los datos experimentales que el modelo para el caso monodisperso. Se presentan también en estas gráficas, las micrografías correspondientes a cada muestra de la monocapa de partículas de titania, tomadas por un microscopio óptico. De la misma manera que en el caso de las monocapas con partículas de alúmina, podemos decir el crecimiento de la concavidad de las curvas, para las monocapas de titania, ocurre mucho más rápido cuando la superficie de cubierta es menor, y el crecimiento de esta es lento cuando se tiene una superficie de cubierta grande. Por otra parte, en las figuras 5.11, 5.13 y 5.15 se muestran las curvas para la transmitancia coherente de luz respectivas de cada muestra para la monocapa con partículas de titania. En estas podemos distinguir claramente las curvas que describen al modelo monodisperso (línea azul) de aquellas correspondientes al caso polidisperso (línea negra). Se observa nuevamente, que el modelo teórico para el caso polidisperso se ajusta muy bien a los datos experimentales de transmitancia (círculos rojos). Los parámetros utilizados para estas curvas son los mismos a los empleados para obtener las curvas de reflectancia.

Finalmente, en la figura 5.16 se muestran los espectros de transmitancia para la monocapa de partículas de titania correspondientes a la muestra *TitM2*, donde la línea negra describe el caso polidisperso, la línea azul corresponde al caso monodisperso, y la línea continua es el espectro de transmitancia experimental. De aquí concluimos que el modelo teórico para el espectro de transmitancia, en el caso polidisperso, describe perfectamente al espectro de transmitancia experimental de esta muestra en específico, en un rango de  $450nm$  a  $700nm$ . Donde se puede observar que este espectro tiene la forma de una línea recta horizontal, la misma forma que la obtenida para la monocapa de partículas de alúmina. El espectro de reflectancia teórico de esta muestra se exhibe en la Fig. 5.17, de donde se puede observar la baja intensidad de este par de curvas, razón por la cual en este caso también nos fue imposible medir el espectro de reflectancia de esta muestra. Nótese la forma única de cada espectro, tanto en el caso monodisperso (línea azul) como el caso polidisperso (línea negra). Los parámetros para generar estos espectros se tomaron de la tabla 5.5, los cuales se sustituyeron en el programa del apéndice C, incluida también la misma fracción de cubierta  $\theta$ , por lo que el valor elegido para esta muestra debe ser el correcto.

Parámetro de ajuste	Superficie de cubierta	Radio $a_o$	Ancho de la gaussiana	Índice de refracción de la partícula $n_p$	Índice de refracción del aire $n_1$	Índice de refracción del sustrato $n_2$
Valor	0.107	220nm	1.4	2.73	1.0002761	1.515

Cuadro 5.4: Parámetros de ajuste para la monocapa de partículas de titania correspondientes a la muestra, *TitM1*.

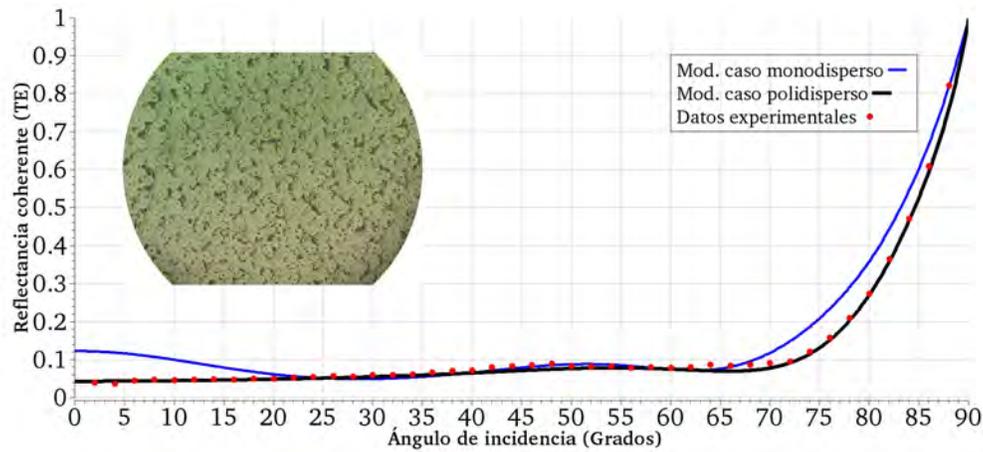


Figura 5.10: *Reflectancia coherente para la monocapa de partículas de titania (muestra TitM1). En la parte superior izquierda se exhibe una micrografía de la monocapa correspondiente a esta muestra.*

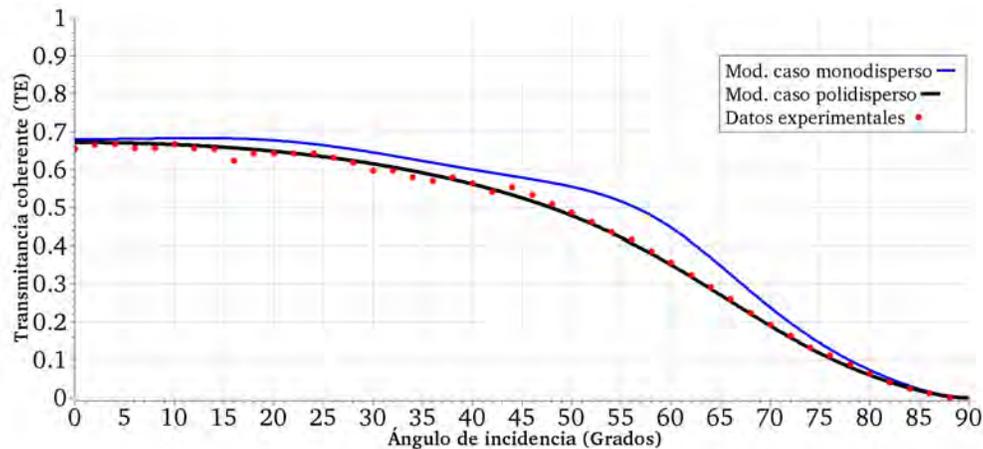


Figura 5.11: *Transmitancia coherente para la monocapa de partículas de titania (muestra TitM1).*

Parámetro de ajuste	Superficie de cubierta	Radio $a_o$	Ancho de la gaussiana	Índice de refracción de la partícula $n_p$	Índice de refracción del aire $n_1$	Índice de refracción del sustrato $n_2$
Valor	0.013	220nm	1.4	2.73	1.0002761	1.515

Cuadro 5.5: Parámetros de ajuste para la monocapa de partículas de titania correspondientes a la muestra *TitM2*.

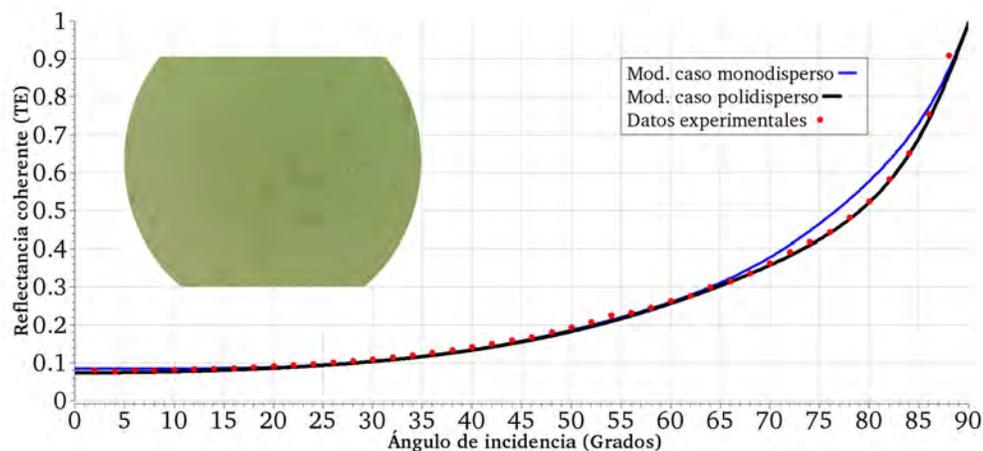


Figura 5.12: *Reflectancia coherente para la monocapa de partículas de titania (muestra TitM2). En la parte superior izquierda se exhibe una micrografía de la monocapa correspondiente a esta muestra.*

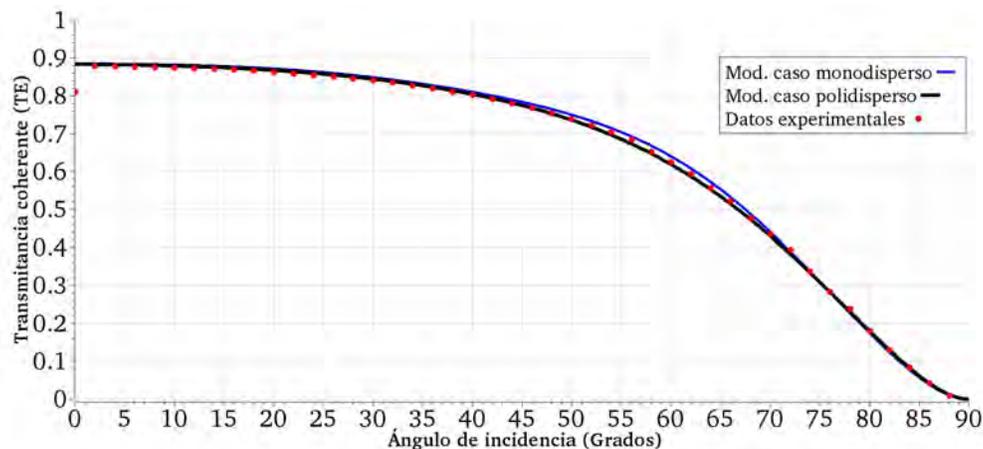


Figura 5.13: *Transmitancia coherente para la monocapa de partículas de titania (muestra TitM2).*

Parámetro de ajuste	Superficie de cubierta	Radio $a_o$	Ancho de la gaussiana	Índice de refracción de la partícula $n_p$	Índice de refracción del aire $n_1$	Índice de refracción del sustrato $n_2$
Valor	0.049	220nm	1.4	2.73	1.0002761	1.515

Cuadro 5.6: Parámetros de ajuste para la monocapa de partículas de titania correspondientes a la muestra *TitM3*.

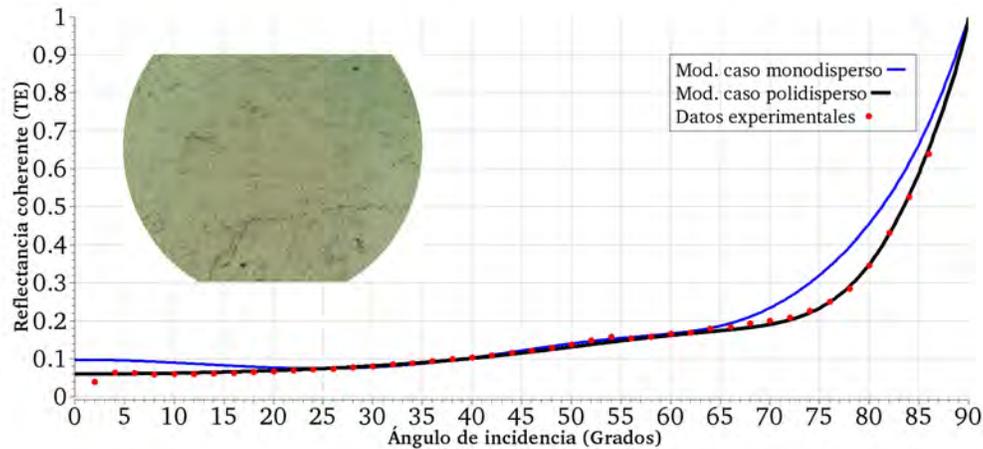


Figura 5.14: *Reflectancia coherente para la monocapa de partículas de titania (muestra TitM3). En la parte superior izquierda se exhibe una micrografía de la monocapa correspondiente a esta muestra.*

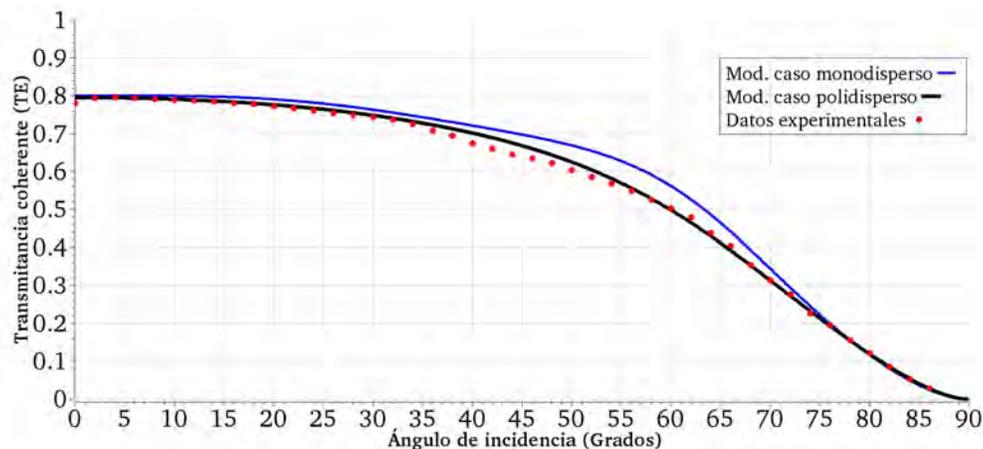


Figura 5.15: *Transmitancia coherente para la monocapa de partículas de titania (muestra TitM3).*

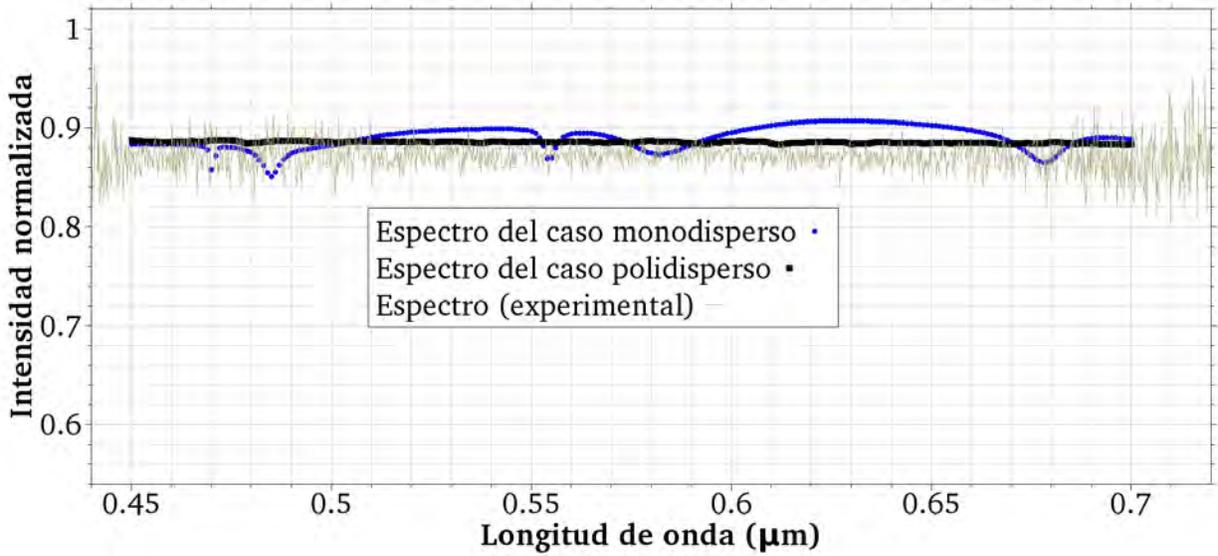


Figura 5.16: *Espectros de transmitancia teórico-experimental para la monocapa de partículas de titania correspondiente a la muestra TitM2.*

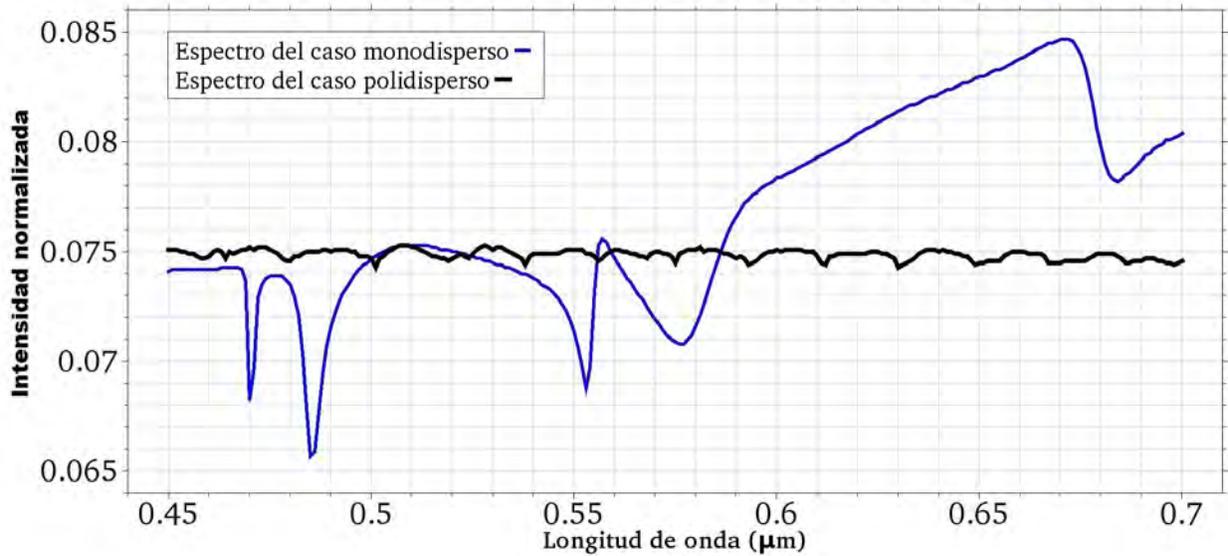


Figura 5.17: *Espectros de reflectancia teóricos para la monocapa de partículas de titania correspondiente a la muestra TitM2.*

### 5.3. Análisis de los resultados experimentales

De los resultados teórico-experimentales presentados en la sección previa, para las monocapas de alúmina y titania, respectivamente, podemos ver que las curvas teóricas se ajustan bien a los datos experimentales, tanto en la reflectancia como en el caso de la transmitancia. Sin embargo, se puede constatar algunas pequeñas discrepancias entre la teoría y el experimento, esto se puede deber a cuatro razones principales:

- La primera, y más importante, la formación de agregados de partículas sobre la superficie del portaobjetos, los cuales por supuesto no se toman en cuenta en estos dos modelos, caso monodisperso y polidisperso. Estos clústers de partículas se pueden observar en algunas zonas de las micrografías tomadas de la superficie del portaobjetos con el microscopio óptico, las cuales se muestran en las gráficas de los resultados experimentales, respectivamente para cada monocapa.
- Otra causa, principalmente para las partículas de alúmina, es el hecho de no tener un ancho constante del spot cuando el haz de láser incide sobre la región donde se estudia la reflectancia y la transmitancia, pues a medida que se gira al goniómetro con la muestra, la forma del spot empieza a deformarse, básicamente pasa de una forma circular (a incidencia normal) a una forma elíptica (para ángulos rasantes), esto conlleva a que la región radiada no sea la misma para todo ángulo de incidencia, y con ello se ilumine una zona donde además la fracción de cubierta no sea la misma, pues ésta puede variar para diferentes zonas de la misma muestra. Por ende observamos que para ángulos rasantes, en las monocapas de partículas de alúmina sobretodo, la curva teórica se aleje un poco de los valores experimentales.
- Tanto en el caso de monocapas con partículas de alúmina como con partículas de titania, éstas partículas no poseen una forma perfectamente esférica, sino una forma esferoidal irregular. Sin embargo, aún así estas partículas pueden ser descritas con este modelo considerando su forma como una esfera perfecta.
- No tenemos un sustrato con una superficie perfectamente plana, esto lo pudimos corroborar con las curvas de reflectancia y transmitancia obtenidas para el portaobjetos (sin monocapa depositada), donde existe una pequeña separación entre la curva teórica y los datos experimentales para ángulos rasantes, véase figura 5.1.

De los resultados mostrados en las secciones previas, para las dos monocapas de partículas polidispersas, se puede inferir sin lugar a dudas que el modelo teórico, para el caso polidisperso, reproduce bastante bien los datos experimentales. Sin embargo, como se pudo percibir, para ambos modelos, la fracción de cubierta  $\Theta$  y el ancho de la función para la distribución de tamaños  $\sigma$  fueron elegidos de forma tal que se obtuvieran los mejores ajustes entre el experimento y la teoría. La razón de ello, para el caso de la fracción de cubierta, es que no se cuenta con una herramienta para determinar  $\Theta$  sobre áreas grandes de una muestra (para áreas pequeñas tenemos la microscopía). De aquí una posible aplicación, muy particular, para el modelo desarrollado en este trabajo es el de poder determinar la cantidad

de superficie cubierta por las partículas depositadas sobre el sustrato, esto a partir de medir sus correspondientes curvas de reflectancia y/o transmitancia. Más aún, un segundo método para corroborar el valor correcto de esta cantidad es a través de medir sus espectros de transmitancia, y observar la concordancia para esta cantidad, medida de manera indirecta por estos dos métodos experimentales. En el último capítulo de este trabajo, describo un tercer método para deducir la fracción de cubierta por medio del análisis de las micrografías tomadas de la superficie del portaobjetos con la monocapa depositada en éste (véase sección 6.1). Pasando a la segunda variable, la función para la distribución de tamaños  $\sigma$ , se habrá podido notar que el ajuste teórico-experimental de cada una de las curvas descritas en las dos secciones previas se realizaron empleando una distribución de tamaños con una función del tipo **log-normal**, esto para cada monocapa. No obstante, el fabricante especifica que las partículas de titania poseen este tipo de función para su distribución de tamaños, con un ancho asignado de  $\sigma = 1.4$ . Como se pudo constatar este valor fue el que se utilizó para realizar el ajuste entre los modelos teóricos y los datos experimentales, hablando solamente de la monocapa con partículas de titania. En contraste, se desconoce hoy en día la distribución de tamaños que poseen las partículas de alúmina. Sin embargo, se asumió como hipótesis en este trabajo que este tipo de partículas poseen igualmente una función del tipo log-normal que describe su distribución de tamaños. Partiendo de esta idea, se procedió a realizar el ajuste teórico-experimental donde finalmente se obtuvo un buen ajuste entre el modelo teórico y el experimento. Sólo que en este caso, para las partículas de alúmina, se utilizó un ancho en su distribución de  $\sigma = 1.3$ , menor al empleado en las partículas de titania. En la figura 5.18, se muestran las curvas correspondientes a la distribución de tamaños para las partículas de alúmina y titania empleadas para el ajuste teórico-experimental. Como nota adicional, si  $\sigma \rightarrow 0$ , el modelo polidisperso se reduce al caso monodisperso.

Los modelos teóricos que se han formulado en este trabajo de investigación nos permiten describir la reflectancia y transmitancia coherente de luz ya sea para una monocapa de partículas monodispersas, o bien, para una monocapa de partículas polidispersas. Si examinamos con cuidado la curvas de reflectancia para la monocapa de partículas de alúmina, notamos que estas poseen una forma muy peculiar (ver figuras 5.2, 5.4 y 5.6). Pero, ¿Cuál es la razón de esta anatomía? Partiendo del modelo polidisperso, en la figura 5.19, se muestran las curvas de reflectancia para una monocapa de partículas de alúmina soportada por un sustrato en la aproximación de la ecuación 3.111, cuya expresión es 5.1 (línea negra), la del sustrato sin monocapa (línea roja), y la de la monocapa aislada (línea azul) que corresponde a la norma al cuadrado de la expresión 3.94. Se muestra además en esta figura, la curva de la transmitancia de la monocapa aislada (línea verde) correspondiente a la norma al cuadrado de la expresión 3.95. La línea café corresponde a la gráfica de esparcimiento, deducida de la expresión:  $1 - (R_{monocapa} + T_{monocapa})$ .

$$R_{monocapa+sustrato} \approx |r_{coh_p}|^2 + |t_{coh_p}|^4 |r_{12}|^2 \quad (5.1)$$

Como se puede ver de la figura 5.19, de  $0^\circ$  a  $40^\circ$  aproximadamente, la reflectancia se debe en gran parte al sustrato o portaobjetos (sin monocapa), es decir, prácticamente la reflexión es debida al portaobjetos. Note que de  $0^\circ$  a  $86^\circ$  la reflectancia de la monocapa aislada es

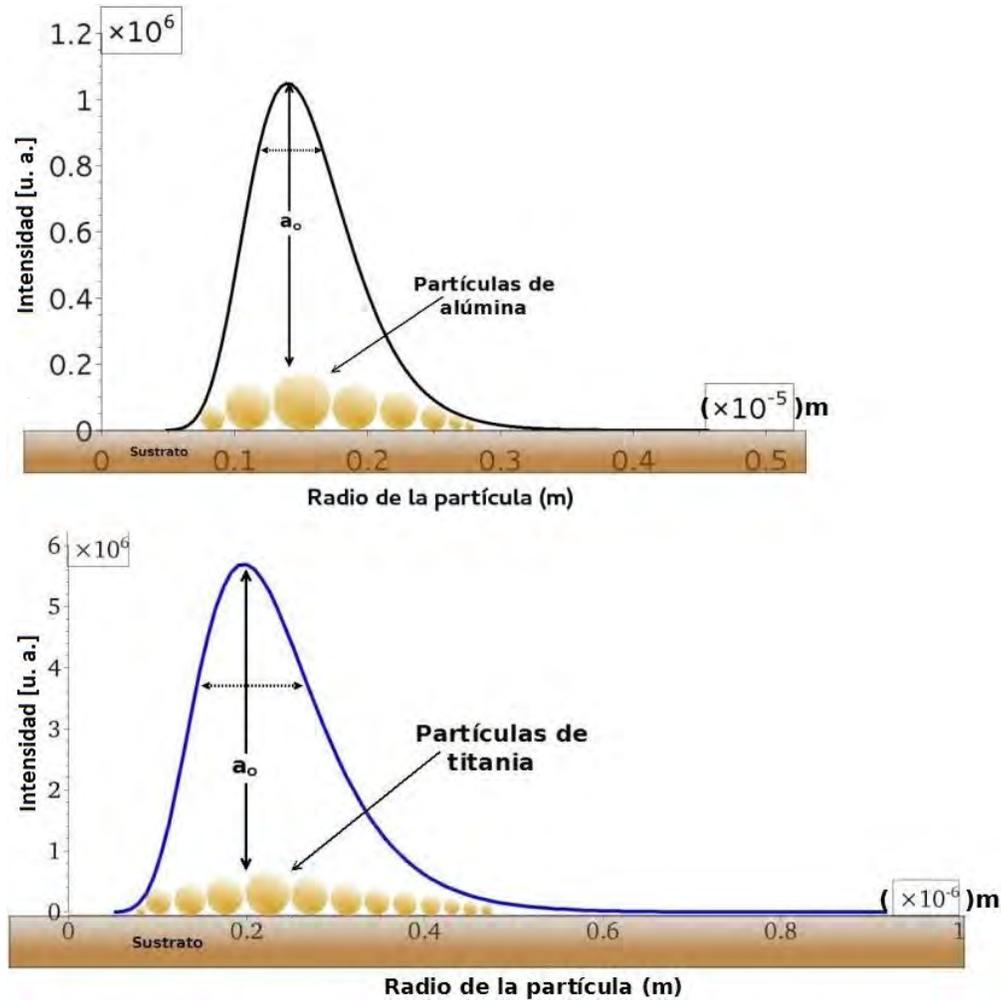


Figura 5.18: *Distribución de tamaños para las partículas de alúmina y titania.*

nula,  $r_{coh_p} = 0$ , pero empezando a superar los  $86^\circ$  la monocapa aislada es la que refleja totalmente en el sistema. Por otra parte, al superar los  $40^\circ$  el sustrato empieza a reflejar en menor cantidad, debido a que la transmitancia de la monocapa aislada de partículas empieza a disminuir su valor, ver expresión 5.1. Esto sigue ocurriendo hasta que se llega a un máximo en la reflectividad del sustrato, aproximadamente a los  $73^\circ$ , pues superando este ángulo de incidencia, la norma a la cuarta potencia de la transmitancia, de la monocapa aislada, es muy pequeña, con lo que la reflectancia del sustrato empieza a caer prácticamente a cero (alrededor de los  $86^\circ$ ). Pero como se mencionó, a partir de los  $86^\circ$ , la reflectividad del sistema se debe totalmente a la reflectancia de la monocapa aislada, mientras que la reflectancia del sustrato con la transmitancia de la monocapa aislada se anulan mutuamente, hasta los  $90^\circ$ . Por último, en la figura 5.20 se muestran las curvas correspondientes a la reflectancia de una monocapa de partículas de titania soportadas por un sustrato (línea negra), deducida de la Exp. 5.1, la curva de reflectancia para la monocapa aislada (línea azul) y la del sustrato

sin monocapa (línea roja). Además se muestra la transmitancia de la monocapa aislada (línea verde) y el esparcimiento de ésta correspondiente a la línea punteada café. Se puede constatar de esta figura que de  $0^\circ$  hasta los  $70^\circ$  la monocapa aislada de partículas de titania no refleja, mientras que la reflectancia del sustrato por el producto de la transmitancia de la monocapa aislada mantienen un valor constante en la reflectancia total del sistema hasta los  $73^\circ$ . Pasando los  $70^\circ$ , el aumento de la reflectancia en el sistema se debe totalmente a la reflectancia de la monocapa aislada.

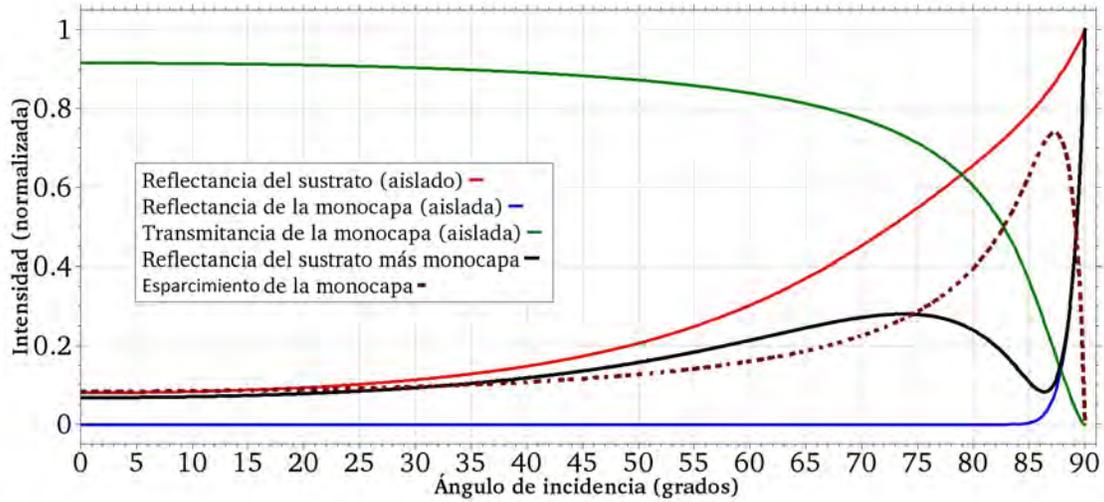


Figura 5.19: *Curvas de reflectancia y transmitancia para una monocapa aislada de partículas de alúmina.*

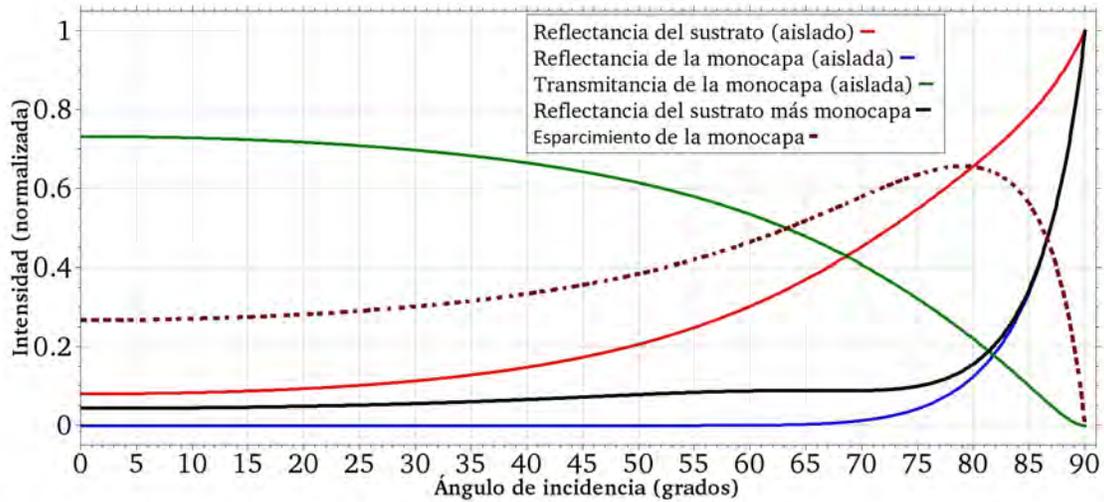


Figura 5.20: *Curvas de reflectancia y transmitancia para una monocapa aislada de partículas de titania.*



# Capítulo 6

## Discusión y conclusiones

En la sección previa se realizó la comparación entre los datos experimentales para la reflectancia y transmitancia de monocapas con partículas de alúmina y/o titania (partículas polidispersas), con el modelo teórico para el caso monodisperso y polidisperso. Si recordamos, el único parámetro que se ajustó sin restricción para obtener el mejor ajuste entre los datos experimentales y las curvas teóricas fue la superficie de cubierta,  $\Theta$ . De aquí que se pueda inferir que una forma indirecta de medir la cantidad de partículas depositadas en una superficie plana es a través de sus curvas de reflectancia o transmitancia, o de los espectros de transmitancia. Mi intención de este último capítulo, es mostrar un *software* que nos permite estimar, de manera muy aproximada, la fracción de cubierta de las partículas que son depositadas sobre la superficie de un portaobjetos, a partir del análisis de la micrografía tomada de la superficie del portaobjetos con la monocapa depositada. Después comparamos las cantidades obtenidas con el *software* con las fracciones de cubierta determinadas con los modelos teóricos. Finalmente en la segunda sección de este capítulo se dan las conclusiones generales de este trabajo.

### 6.1. Discusión de la superficie de cubierta $\Theta$ , con una aplicación

Como se mencionó, resulta un poco ambiguo estimar la cantidad de partículas que fueron depositadas sobre la superficie del portaobjetos a partir de su respectiva micrografía, que al final de cuentas, esto nos determina el porcentaje de la fracción de cubierta, por la monocapa, sobre la superficie de éste, denotada en este trabajo como  $\Theta$ . En la monocapa de partículas muchas de ellas se encuentran aisladas, otras tantas están muy próximas entre sí, e incluso como se mencionó en los resultados, algunas de ellas forman agregados, lo cual imposibilita el conteo directo de estas partículas a simple vista con el microscopio óptico. Aunando a esto, tenemos que algunas de estas partículas son tan pequeñas, como las partículas de titania, que podrían pasar desapercibidas en la micrografía óptica, figura 6.3.

La idea en esta sección es la de discutir un pequeño algoritmo que nos permita estimar la fracción de cubierta a partir de la imagen tomada de la superficie del sustrato con la

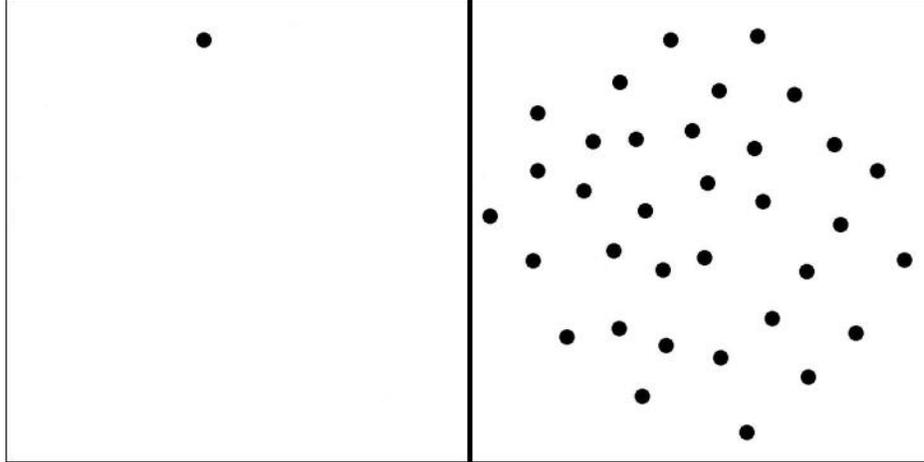


Figura 6.1: En la parte izquierda de esta figura se muestra una partícula de diámetro  $1u$  depositada sobre una superficie totalmente blanca con un área total de  $30 \times 30u^2$ . En la imagen de la derecha se muestran 34 partículas depositadas sobre la misma área.

monocapa depositada (capturada con una cámara a través del lente ocular de un microscopio óptico). Este algoritmo trabaja de manera muy sencilla. En la figura 6.1 se muestra una partícula-negra de diámetro  $1u$ <sup>1</sup> “depositada” sobre una superficie con un área de  $30 \times 30u^2$ , es fácil ver entonces que la fracción de cubierta es

$$\Theta = \frac{(N \cdot a)}{A_T}, \quad (6.1)$$

donde  $N$  es el número total de partículas,  $a$  es el área de la partícula y  $A_T$  es el área total de la superficie. En este caso el área de nuestra partícula es  $\pi(0.5u)^2 = 0.785u^2$  y el área de la superficie es de  $900u^2$ , por lo que la fracción de cubierta es,  $\Theta = 0.087\%$ . De esta misma manera analizando la imagen de la derecha, con  $N = 34$ , se llega a una fracción de cubierta de,  $\Theta = 2.96\%$  o  $0.029$ . El problema viene cuando las partículas que son depositadas sobre el sustrato no tienen una forma geométrica específica, o bien, como es nuestro caso se forman agregados. Sin mencionar que se carecen de los datos necesarios, como puede ser el área de la superficie, el tamaño de partícula, la forma geométrica, etc, véase la figura 6.2.

Sin embargo, hay una ventaja importante en este tipo de imágenes, al igual que en las micrografías tomadas de las monocapas de alúmina y titania, y es el alto contraste que tienen las partículas respecto a la superficie en las que son depositadas. La idea principal estriba en poder “traducir” estas imágenes en contrastes de grises con una función especial de *octave* o *matlab*, a este comando al cual se hace referencia, se le llama *imread*. En *octave/matlab* una imagen a **escala de grises** es representada por medio de una matriz bidimensional de  $m \times n$  elementos, en donde  $n$  representa el número de píxeles de ancho y  $m$  el número de píxeles de largo. Así que con esto, independientemente de la imagen, ya tenemos el área de la superficie total  $A_T$  que corresponde al tamaño de la matriz,  $(mn)$ . Además, cada elemento de la matriz

<sup>1</sup>Para este ejemplo  $u$  corresponde a una unidad de distancia arbitraria.



Figura 6.2: “Partículas” amorfas depositadas sobre la misma superficie (un área de  $900u^2$ )  
 ¿Cual es la fracción de cubierta por estas partículas?

de la propia imagen tiene asignado un valor de 0 (negro) a 255 (blanco). He aquí otra ventaja, pues para las imágenes 6.1 y 6.2 simplemente discriminamos aquellos píxeles que no posean el valor de 0, para después restarlos de aquellos con valor 0, y obtener así  $(N \cdot a)$ , finalmente aplicamos la Exp. 6.1 para obtener la fracción de cubierta  $\Theta$ . **Nota:** Si deseamos obtener la imagen correspondiente a los píxeles que se tomaron en cuenta en el filtro (a escala de grises), simplemente empleamos el comando *imshow*. El algoritmo implementado para esta discriminación se muestra a continuación,

```
% Este programa se puede ejecutar en matlab u octave
clc
clear all
clf
A=imread('ima1.jpg');
S=size(A);
m=S(:,1);
n=S(:,2);
At=m*n; % Area total de la imagen
a=0; % Conteo de pixeles
b=0; % Conteo de pixeles
c=0; % Conteo de pixeles
for i=1:m
```

```

for j=1:n
if A(i,j)==255 %(Conteo del fondo blanco) Sustrato
a=1+a;
B(i,j)=255;
elseif A(i,j)>=0 & A(i,j)<24 % (conteo de partículas)
b=1+b;
B(i,j)=A(i,j);
else % (ruido) % para el caso de las monocapas
c=1+c;
B(i,j)=255;
end
end
end
Ae=At-a % area efectiva para el caso de las monocapas
Fc=(b/At)*100 % FRACCIÓN DE CUBIERTA
% para el caso de las monocapas con partículas
Fcm=(b/Ae)*100
figure(1)
imshow(A, [0 255])
figure(2)
imshow(B, [0 255])

```

Analizando la imagen de la izquierda, para la figura 6.1, con este algoritmo se obtiene una superficie de cubierta del 0.0873%, y para la imagen de la derecha de esta misma figura se obtiene una superficie de cubierta del 2.96%, es decir, son los mismos valores que se obtuvieron previamente en el análisis de este par de imágenes. Sin contar con los datos suficientes para la imagen correspondiente a la figura 6.2, se obtiene un superficie de cubierta, empleando este algoritmo del 11.8% correspondiente al área cubierta de las partículas amorfas depositadas sobre la superficie del sustrato.

Las imágenes mostradas en la figura 6.3, correspondientes a las monocapas de alúmina y titania, tienen un fondo blanco (debido a la edición), por lo que es necesario eliminarla del área total (esto al cargar la imagen con el comando *imread*), para así obtener el área correcta que encierra a la monocapa de partículas (en el algoritmo llamada área efectiva). Es importante recalcar que las partículas depositadas en la superficie del sustrato tienen un contraste variable, por lo que su rango en escala de grises es mayor. Así pues, para las partículas de alúmina su rango en la escala de grises va de 0 a 120 y para las partículas de titania se tiene un rango, en la escala de grises, de 0 a 96. Estas escalas nos permiten discriminar las partículas del sustrato mismo y del fondo blanco.

En las tablas 6.1 y 6.2 se muestran los valores correspondientes a las superficies de cubierta obtenidas con el modelo teórico y con el algoritmo para las monocapas de partículas de alúmina y titania, respectivamente. De este par de tablas podemos ver que existen pequeñas discrepancias entre los valores obtenidos con el programa y los que se utilizaron en el modelo teórico. Esto puede deberse a las diferencias que hay entre el área que se está empleando

Modelo	Muestra: <i>AluM1</i>	Muestra: <i>AluM2</i>	Muestra: <i>AluM3</i>
$\Theta$ -teórico	5.7 %	3.8 %	10.6 %
$\Theta$ - <i>software</i>	5.2 %	4.31 %	13.83 %

Cuadro 6.1: Fracción de cubierta para la monocapa de partículas de alúmina determinadas con el programa y con el modelo teórico.

Muestra	Muestra: <i>TitM1</i>	Muestra: <i>TitM2</i>	Muestra: <i>TitM3</i>
$\Theta$ -teórico	10.7 %	1.3 %	4.9 %
$\Theta$ - <i>software</i>	10.32 %	1.44 %	1.66 %

Cuadro 6.2: Fracción de cubierta para la monocapa de partículas de titania determinadas con el programa y con el modelo teórico.

para el análisis de la imágenes con el *software* (área iluminada por el microscopio óptico), y el área que realmente es iluminada por el haz de láser sobre la monocapa de partículas, la cual es de aproximadamente de  $2.01\text{mm}^2$ . No obstante, como primer análisis, los valores de estas fracciones de cubierta se aproximan bastante bien con los empleados en los modelos teóricos, aunque el *software* se puede mejorar si se conoce el área iluminada por el microscopio óptico necesaria para tomar la micrografía. De aquí podemos concluir, de manera muy particular, lo siguiente: Contamos con tres formas de poder determinar la fracción de cubierta, la primera a través de las curvas de reflectancia y transmitancia, la segunda con el espectro de transmitancia, o bien, empleando el *software* aquí descrito. Sí los tres valores coinciden, con estos tres métodos, entonces podemos asegurar que ese valor corresponde a la superficie de cubierta real para la monocapa de partículas que se esta analizando. En la figura 6.3 se muestran las imágenes “reconstruidas” con el *software*, empleando el comando *imshow*, correspondientes a las monocapas con partículas de alúmina y titania, de donde se ha filtrado al sustrato, permitiéndonos ver solamente las monocapas de partículas de alúmina y titania, note que apenas se distingue la monocapa de partículas de titania en la imagen inferior derecha.

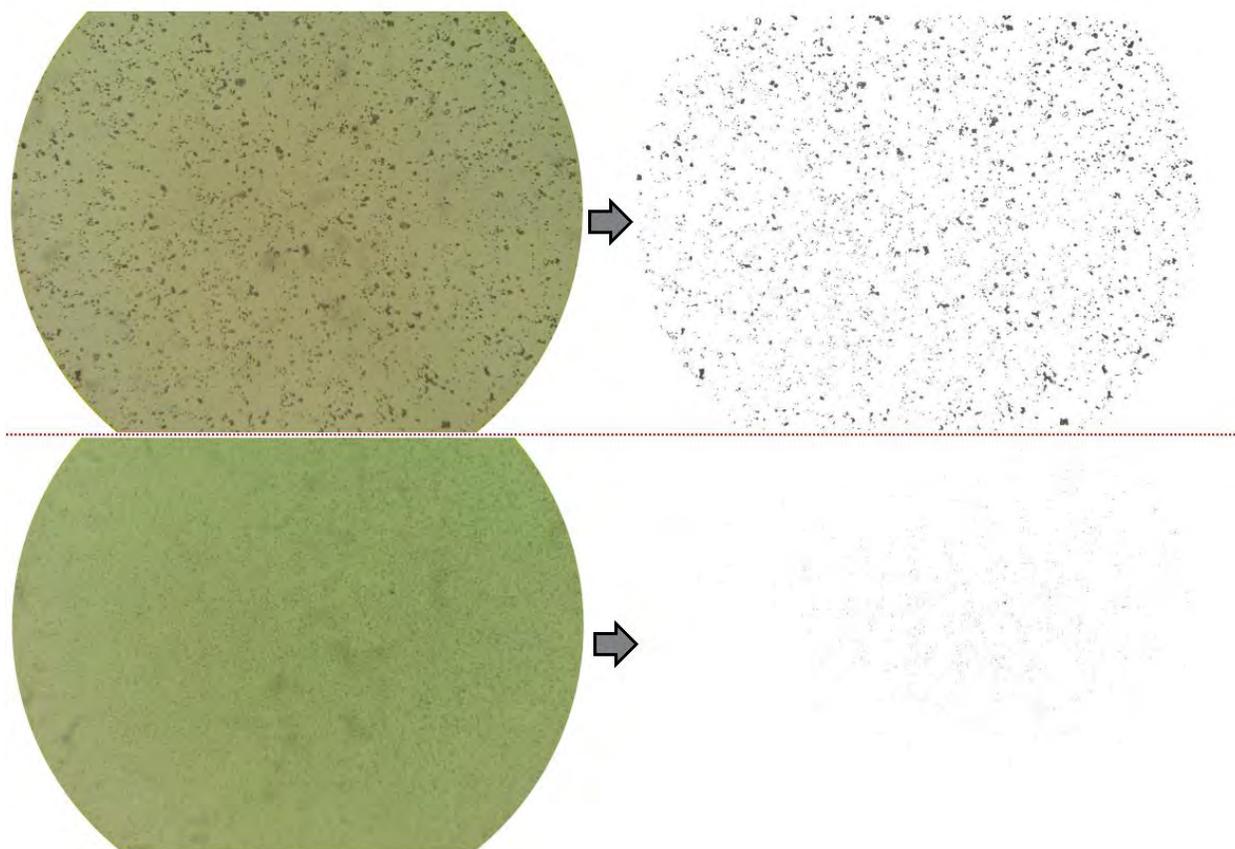


Figura 6.3: En la parte superior-izquierda de esta figura se muestra la micrografía de la monocapa de partículas de alúmina correspondiente a la muestra *AluM2*. Y a su derecha se muestra la imagen “reconstruida”, con el software, de la monocapa (sin sustrato). En la parte inferior-izquierda se muestra la micrografía de una monocapa de partículas de titania correspondiente a la muestra *TitM2*. En la parte derecha de esta imagen se muestra la imagen de la monocapa aislada reconstruida con el software.

## 6.2. Resumen y conclusiones generales

Esta tesis tuvo dos objetivos principales, por un lado establecer un modelo relativamente simple para la reflexión y transmisión coherente de luz de una monocapa de partículas “grandes” depositadas sobre un sustrato plano de vidrio para el caso de monocapas polidispersas. Entiéndase por partículas grandes aquellas partículas cuyos radios son comparables, o más grandes, a la longitud de la onda electromagnética incidente. El modelo aquí desarrollado es una extensión del modelo de múltiple esparcimiento para la reflexión y transmisión de luz coherente desde una monocapa de partículas monodispersas publicado recientemente [1]. El modelo para monocapas con partículas polidispersas es aplicable para todo ángulo de incidencia y cualquier tipo de configuración, interna o externa, empleada en el arreglo experimental e independientemente del tamaño de partícula, sin embargo está limitado a fracciones de cubierta baja. Por otro lado, el segundo objetivo principal fue estudiar la validez del modelo teórico. Para ello se procedió a medir de manera experimental la reflectancia y transmitancia óptica para monocapas con partículas de alúmina y titania depositadas sobre la superficie de un sustrato con una configuración por reflexión externa, para una interfase aire-vidrio, de 0 a 90°. Se encontró que los datos experimentales son consistentes con el modelo teórico, de donde se consideró en cuenta una fracción de cubierta baja, este último parámetro se tomó de manera que se ajustaran lo mejor posible las curvas teóricas a los datos experimentales. La razón de esto fue la dificultad de medir de forma directa la fracción de cubierta de las partículas depositadas sobre el sustrato a través de las micrografías obtenidas de estas monocapas con ayuda de un microscopio óptico. Sin embargo, en este trabajo se plantea de manera indirecta, una forma de medir la cantidad de partículas depositadas sobre la superficie del portaobjetos, esto a través de un procesamiento imágenes por *software*, donde se pudo corroborar, para dos muestras, la proximidad entre los valores ajustados para hacer coincidir el modelo teórico con los datos experimentales y los obtenidos con este procesamiento. Por otra parte, se puede concluir que la hipótesis de considerar una función log-normal para la distribución de tamaños en el caso de las partículas de alúmina fue correcta. Es decir, la misma función que describe la distribución de tamaños en las partículas de titania lo es para las partículas de alúmina. De donde se usó, para las partículas de alúmina, un ancho en la función de  $\sigma = 1.3$  y para las partículas de titania un valor de  $\sigma = 1.4$ .

Tomando como punto de partida el análisis teórico-experimental exitoso que se obtuvo a partir de las curvas de reflectancia y transmitancia como función del ángulo de incidencia de las monocapas con partículas de alúmina y titania, el paso siguiente consistió en medir los espectros de transmitancia para dos muestras representativas, una de alúmina y otra de titania. Se concluye que la forma de estos dos espectros experimentales se reproducen consistentemente con el modelo teórico. Los parámetros que fueron usados para generar los espectros teóricos de transmitancia correspondientes a estas muestras, son los mismos que los usados en el modelo de esparcimiento coherente, incluida también la fracción de cubierta. De aquí que se pueda inferir, casi de forma segura, que las superficies de cubierta elegidas para las muestras: *AluM1* y *TitM2*, son las correctas. Por otra parte, cabe mencionar que nos resultó difícil, por no decir imposible, medir los espectros de reflectancia de forma experimental, no obstante los espectros de reflectancia teóricos se exhibieron para este par

de monocapas, donde se puede corroborar la baja intensidad de éstos. Inesperadamente los espectros de transmisión para este par de monocapas no ofrecen mayor información del sistema. Si acaso se puede inferir la fracción de cubierta  $\Theta$  y el ancho para la distribución de tamaños  $\sigma$ . En contraste, las curvas de reflectancia y transmitancia en función del ángulo de incidencia, nos ofrecen un poco más de información respecto a la forma en que este sistema refleja o transmite la luz coherente que incide en éste, o bien, para qué ángulos la luz es mayormente esparcida, además de que se puede inferir la fracción de cubierta y el ancho de la función para la distribución de tamaños.

La conclusión general de este trabajo es que el modelo de esparcimiento coherente desarrollado en [1] y extendido aquí para el caso de monocapas polidispersas describe correctamente y de manera cuantitativa la reflectividad y transmitividad de monocapas de partículas altamente esparcidoras de luz soportadas por un sustrato plano a bajas fracciones de cubierta. Sin embargo, aún queda mucha investigación por revolver en este campo de estudio, además de extender el análisis, de este modelo, en nuevos arreglos experimentales. Por ejemplo, medir por reflexión interna, la reflectancia y transmitancia de luz coherente en monocapas nuevas, con partículas de sílice y látex. Extender el modelo teórico para tomar en cuenta nuevas formas geométricas en las partículas que se depositan sobre algún sustrato plano, esto para partículas de bajo contraste respecto al del medio donde se hallan inmersas. Por otra parte, elaborar un modelo en el que se tomen en cuenta altas densidades para la fracción de cubierta, para partículas cuyo tamaño sea menor o mayor a la longitud de onda incidente. El desarrollo teórico de estos modelos y su comparación con experimentos implica el desarrollo de nuevos arreglos experimentales, también será de interés su aplicación a sensores ópticos en algún sistema biológico, tecnológico o científico en general. En el caso biológico, un ejemplo podría ser, caracterizar crecimientos en cultivos celulares (depositados en portaobjetos o en cajas de Petri) por reflexión o transmisión de su luz coherente (o espectros de transmisión). Como se sabe, las células no poseen en sí una forma geométrica definida y éstas se encuentran inmersas dentro de alguna sustancia, que permite su alimentación y crecimiento de cada una de ellas. Podemos ver a este sistema biológico como una película delgada depositada sobre un sustrato plano sumergidas en un medio complejo. Es decir, las células en nuestro modelo teórico representan al conjunto de partículas y el medio 1 toma el papel de la sustancia que rodea al cultivo celular. Otra aplicación interesante, sería para monitorear el depósito de aerosoles contaminantes sobre algún sustrato específico. En otras palabras, esto es, determinar el número de partículas contaminantes que se llegan a depositar sobre algún tipo de sustrato inmersos en un medio específico. Así pues, se concluye con esto las tareas pendientes contempladas para un trabajo futuro, además de plantear al lector un motivo para llamar su interés a estos temas aparentemente muy teóricos, pero que en el fondo resguardan una enorme cantidad de aplicaciones en instrumentación moderna.

# Apéndice A

## Dispersión de luz de pequeñas partículas

El programa que se detalla primeramente en este apéndice nos permite calcular la intensidad, de una partícula, en función del ángulo de dispersión. Cabe mencionar que la teoría que subyace en cada uno de estos programas se describe en la sección 2.3. Ya desde 1968 existía un estudio computacional acerca de los coeficientes de dispersión de Mie, desarrollado por Dave. Y hoy en día se siguen usando estos algoritmos con algunas modificaciones adaptadas al *software* de hoy. Entre estos cambios destaca la convergencia del número mínimo,  $n_{max}$ , para la descomposición del campo incidente en ondas esféricas de las series infinitas presentes en los coeficientes de la matriz de dispersión,  $S_1(\theta)$  y  $S_2(\theta)$ . Convergencia que dependerá del tamaño normalizado de la partícula  $x$ . Para un error relativo de  $10^{-7}$ , el valor propuesto en [27], es de

$$n_{max} = x + 4x^{1/3} + 2 \quad (\text{A.1})$$

En dicha referencia se menciona que la iteración no puede extenderse a cualquier número grande pues se corre el riesgo de que la función de recurrencia, en estas series, diverja, por acarreamiento de error en las variables flotantes. No obstante, la función propuesta, A.1, para la convergencia de estas series, tiene su fundamento en un extenso estudio publicado por Wiscombe entre 1979 y 1980, y ampliamente analizado por Khare. El programa que se presenta en este apéndice depende de la subrutinas mostradas en las respectivas secciones del presente anexo, más aún, estas subrutinas son de vital importancia para los posteriores algoritmos que fueron utilizados en el análisis de los resultados teóricos-experimentales, pues hay una dependencia de éstos con las subrutinas aquí presentadas. Cada uno de estos programas pueden ser compilados en la consola de cualquier distribución de Linux, en nuestro caso se ha utilizado Debian-Linux, con el paquete instalado *GNU-OCTAVE*. O bien, si cuenta con una licencia de *MATLAB* se pueden compilar en este *software* sin ningún problema. Las variables que se necesitan para ejecutar el programa son: parámetro de tamaño  $x$ , índice de refracción del medio  $m$  y cota superior para la evaluación del ángulo de dispersión  $\theta$ .

El siguiente programa fue tomado del apéndice A, de la siguiente referencia [27]. Como se había dicho este programa calcula las intensidades dispersadas asociadas a las componentes perpendicular y paralela para una partícula esférica “pequeña” homogénea inmersa en un medio con índice de refracción  $m = m' + im''$  y con un parámetro de tamaño  $x$ , en función del ángulo de esparcimiento,  $\theta$ :

```

clear all
clc
clf
m=input('Dame el índice de refracción m: ');
x=input('Dame el tamaño del parámetro x: ');
ang=input('Dame el ángulo máximo de evaluación (Hasta 180°): ');
num=input('Dame la frecuencia de muestreo: ');
paso=ang/num
o=0;
for r=1:num+1
O=o*pi/180;
u=cos(O);
S12=fm_AB(m, x, u);
anbn=fm_cof(m, x);
An=anbn(1,:);
Bn=anbn(2,:);
Ia(r)=S12(1,:);
IA(r)=abs(Ia(r))^2;
YA(r)=log10(IA(r));
Ib(r)=S12(2,:);
IB(r)=abs(Ib(r))^2;
YB(r)=log10(IB(r));
X(r)=o;
o=o+paso;
end
plot(X, YA, 'r')
hold on
plot(X, YB, '-b')
title("Dispersion de luz en una esfera");
xlabel("Angulo de Dispersion")
ylabel("Logaritmo de la intensidad")
legend('Intensidad componente paralela', 'Intensidad componente perpendicular');
grid on
print Desfera.jpg

```

## A.1. Subrutina 1. Coeficientes de dispersión $S_1(\theta)$ y $S_2(\theta)$

Este programa calcula los coeficientes de dispersión del campo lejano conocidos como  $S_1(\theta)$  y  $S_2(\theta)$ , para este programa denotados como  $A$  y  $B$ , respectivamente:

```
function result=fm_AB(m, x, u)
% La función u está acotada: -1<=u=cos(theta)<=1
% m: es el índice de refracción relativo complejo, m=m'+im'',
% siendo m=k1/k=n1/n. Donde n1 es el índice de refracción de la partícula
% y n es el índice de refracción del medio.
% x: es el parámetro de tamaño, siendo x=ka. Donde:
% k=2*pi*n (a/lambda): es el número de onda en el medio
% a: es el radio de la esfera
nmax=round(2+x+4*x^(1/3));
ab=fm_cof(m, x);
an=ab(1,:);
bn=ab(2,:);
pt=fm_pt(u, nmax);
Pn=pt(1,:);
Tn=pt(2,:);
l=(1:nmax);
l2=(2*l + 1)./(1.*(l+1));
Pn=l2.*Pn;
Tn=l2.*Tn;
A=(an*Pn'+bn*Tn');
B=(an*Tn'+bn*Pn');
result=[A; B];
```

## A.2. Subrutina 2. Amplitudes complejas del campo dispersado

Este programa calcula las amplitudes complejas,  $a_n$ ,  $b_n$ ,  $c_n$  y  $d_n$ , de las ondas parciales para el campo dispersado:

```
function result=fm_cof(m, x)
% m: es el índice de refracción relativo complejo, m=m'+im'',
% siendo m=k1/k=n1/n. Donde n1 es el índice de refracción de la partícula
% y n es el índice de refracción del medio.
% x: es el parámetro de tamaño, siendo x=ka. Donde:
% k=2*pi*n (a/lambda): es el número de onda en el medio
% a: es el radio de la esfera
```

```

nmax=round(2+x+(4*x^(1/3)));
l=(1:nmax);
v=(1+0.5);
mx=m.*x;
m2=m.*m;
% Funciones de Bessel de primer y segundo tipo, en función de x
rx=sqrt(0.5*pi./x);
bx=besselj(v, x).*rx;
% Derivada de la función de Bessel, en función de x
b1x=[sin(x)/x, bx(1:nmax-1)];
yx=bessely(v, x).*rx;
y1x=[-cos(x)/x, yx(1:nmax-1)];
hx=bx+i*yx; % Función de Hankel
h1x=b1x+i*y1x; % Función de Hankel
% Funciones de Bessel de primer tipo en función del producto mx
rmx=sqrt(0.5*pi./mx);
bmx=besselj(v, mx).*rmx;
% Derivada de la función de Bessel, en función de mx
b1mx=[sin(mx)/mx, bmx(1:nmax-1)];
ax=x.*b1x-1.*bx; % [xJ_{n}(x)]'
amx=mx.*b1mx-1.*bmx; % [mxJ_{n}(mx)]'
ahx=x.*h1x-1.*hx; % [xh_{n}(x)]'
% Funciones de recursión para los coeficientes de Mie
an=(m2.*bmx.*ax-bx.*amx)./(m2.*bmx.*ahx-hx.*amx);
bn=(bmx.*ax-bx.*amx)./(bmx.*ahx-hx.*amx);
cn=(bx.*ahx-hx.*ax)./(bmx.*ahx-hx.*amx);
dn=m.*(bx.*ahx-hx.*ax)./(m2.*bmx.*ahx-hx.*amx);
result=[an; bn; cn; dn];

```

### A.3. Subrutina 3. Funciones angulares de Mie $\pi_n$ y $\tau_n$

El siguiente programa nos permite calcular las funciones angulares de Mie,  $\pi_n$  y  $\tau_n$ , que describen la dependencia angular de la luz radiada en la dirección del ángulo de dispersión  $\theta$ , siendo  $P_n^1$  los polinomios de Legendre:

```

function result=fm_pt(u, nmax)
% La función u está acotada: -1<=u=cos(theta)<=1
% n entero que va de 1 a nmax
% pi_n y tau_n son las funciones angulares usadas en la teoría de Mie
p(1)=1; % Por definición
t(1)=u;

```

```
p(2)=3*u;
t(2)=3*cos(2*acos(u));
for n=3:nmax
% Función recursiva de PI_n
p1=(2*n-1)./(n-1).*p(n-1).*u;
p2=(n./(n-1)).*p(n-2);
p(n)=p1-p2;
% Función recursiva de Tau_n
t1=n*u.*p(n);
t2=(n+1).*p(n-1);
t(n)=t1-t2;
end
result=[p; t];
```



## Apéndice B

# Análisis teórico-experimental (casos monodisperso y polidisperso)

El algoritmo que se muestra a continuación nos permite determinar las curvas de reflectancia y transmitancia para una monocapa, constituida por partículas monodispersas y polidispersas, soportadas por una superficie plana, para una onda electromagnética incidente con polarización  $TE$  y  $TM$ , (Secs. 3.2, 3.3 y 3.4). Además, permite comparar estas curvas con los datos experimentales medidos con los arreglos experimentales correspondientes a las Figs. 4.7 y 4.10, para la reflectancia y transmitancia, respectivamente (para el caso experimental, sólo polarización  $TE$ ). En este caso particular se cargan los datos experimentales de una monocapa con partículas de alúmina para la muestra AluM2, y los parámetros para generar sus correspondientes curvas teóricas, como superficie de cubierta, radio de partícula, índice de refracción, etc., de esta muestra en particular se toman de la tabla 5.2, correspondiente a la sección 5.1. Nótese la dependencia de este programa con las subrutinas descritas en el apéndice anterior, mostradas en las secciones A.1, A.2 y A.3, las cuales se mandan a llamar como funciones externas dentro de este programa. En las secciones de este apéndice, se detallan además dos subrutinas importantes, la primera corresponde a la evaluación numérica de las funciones integrales para  $\beta_F$ ,  $\beta_B$  y  $\beta_C$ , y la segunda subrutina calcula la distribución de tamaños,  $n(a)$ , en función del radio de una partícula,  $a$ . Por otra parte, si se desean obtener las curvas de reflectancia y transmitancia para otro tipo de muestras, correspondientes a las monocapas de alúmina, basta con sustituir sus parámetros específicos de éstas, mostrados en las tablas 5.1 y 5.3, en las líneas principales de este programa. Para el caso de las monocapas con partículas de titania los parámetros principales se muestran en las tablas 5.4, 5.5 y 5.6, de la sección 5.1. Finalmente, la ejecución de estos programas se pueden realizar con la paquetería de *software* libre *GNU-OCTAVE*, o bien, bajo licencia con *MATLAB*.

```
clear all
clc
clf
% Carga de datos experimentales para la alúmina
```

```

% Las siguientes 12 líneas se pueden comentar con (%) pues
% se carecen de los archivos con los datos experimentales
load M2Z2R.dat
load M2Z2T.dat
XangT=M2Z2T(:,1);
YaluT=M2Z2T(:,2);
XangR=M2Z2R(:,1);
YaluR=M2Z2R(:,2);
% ===== DATOS EXPERIMENTALES =====
Rui=0.000518; % Ruido en la medición
VR=2.667-Rui; % Intensidad del haz de láser
difT=0.03955; % Intensidad de la componente difusa T
difR=0.001948; % Intensidad de la componente difusa R
yaluT=(YaluT-difT)./VR; % Transmitancia experimental
yaluR=(YaluR-difR)./VR; % Reflectancia experimental
% Evaluación de los coeficientes
fprintf('El ángulo máximo de evaluación (Hasta 90°) es: ');
ang=90.0
fprintf('La frecuencia de muestreo es: ');
num=900.0
% Parámetros de la muestra (monocapa)
fprintf('La longitud de onda (Lambda) es: ');
l=670.0e-09
fprintf('El radio promedio de las partículas es: ');
Do=1.5e-06
fprintf('El índice de refracción de la partícula (np) es: ');
np=1.76463
fprintf('El índice de refracción del medio 1 (n1) es: ');
n1=1.0002761
fprintf('El índice de refracción del medio 2 (n2) es: ');
n2=1.515
fprintf('La superficie de recubrimiento (en porcentaje) es: ');
A=0.038
fprintf('El ancho de la gaussiana es: ');
sigma=1.3
% Evaluación de la integral
fprintf('El límite superior de evaluación para las integrales es: ');
ls=Do*(sigma^(sqrt(18)))
fprintf('El límite inferior de evaluación para las integrales es: ');
li=Do/(sigma^(sqrt(18)))
fprintf('La frecuencia de muestreo para las integrales es: ');
N=100

```

```

% PARTE TEÓRICA (Caso monodisperso)
% Definición de constantes ...
paso=ang/num;
ko=2.0*pi/l;
km=ko*n1;
km2=km*km;
m=np/n1; % Índice de refracción relativo
x=ko*n1*Do; % Parámetro de tamaño caso monodisperso
x2=x*x; % Parámetro de tamaño al cuadrado caso monodisperso
% Sustancias no-magnéticas
mu1=1.0;
mu2=1.0;
epsilon1=(n1^2)/mu1;
epsilon2=(n2^2)/mu2;
% Ángulo de incidencia inicial
o=0.0;
rhoST=(A/(pi*Do*Do))*exp(-2.0*log(sigma)*log(sigma));
S0=fm_AB(m, x, 1); % So caso monodisperso
S02=(S0(1,:))*(S0(1,:)); % So^2 caso monodisperso
for r=1:num+1
Oi=o*pi/180;
inc=(pi-(2.0*Oi));
u=cos(inc);
alfa=(2*A)/(x2*cos(Oi));
alfa2=(alfa*alfa)/4.0;
AB=fm_AB(m, x, u); % Cálculo de S1 y S2
% kz1
kz1=(ko*n1)*cos(Oi);
% kz2
kz2=ko*sqrt((n2^2)-((n1^2)*sin(Oi)*sin(Oi)));
% Exponencial
beta=2.0*i*Do*kz1;
E=exp(beta);
%%%%%%%%%% TE %%%%%%%%%%%
% r(coh)
S1=AB(1,:); % S1 (para TE)
S12=S1*S1; % S1^2
numr1=-alfa*S1;
denr1=1.0+(alfa*S0(1,:))+(alfa2*(S02 - S12));
r1=numr1/denr1;
% t(coh)
numt1=1.0-(alfa2*(S02 - S12));

```

```

dent1=1.0+(alfa*S0(1,:))+(alfa2*(S02 - S12));
t1=numt1/dent1;
% Coeficiente de Fresnel r12 para TE
r12=((mu2*kz1) - (mu1*kz2))/((mu2*kz1) + (mu1*kz2));
% Coeficiente de Fresnel r21 para TE
r21=((mu1*kz2) - (mu2*kz1))/((mu1*kz2) + (mu2*kz1));
% Coeficiente de Fresnel t12 para TE
t12=(2.0*mu2*kz1)/(mu2*kz1 + mu1*kz2);
% Coeficiente de Fresnel t21 para TE (Vidrio-Aire)
t21=(2.0*mu1*kz2)/(mu1*kz2 + mu2*kz1);
% Coeficiente de reflexión: slab + monocapa
rTE=r1 +((r12*t1*t1*E)/(1.0-(r12*r1*E)));
pto1=(t1*conj(t1))*(t1*conj(t1));
pto2=(t12*conj(t12))*(t21*conj(t21));
% Coeficiente de transmisión: slab + monocapa
tTE=(t1*t12*sqrt(E))/(1.0 - (r12*r1*E));
% ===== REFLECTANCIA TE =====
% Caso experimental: slab + monocapa + aire
RTEm(r)=(rTE*conj(rTE))+(r21*conj(r21)*pto1*pto2)
% ===== TRANSMITANCIA TE =====
% Caso experimental
TTEm(r)=(tTE*conj(tTE))*(t21*conj(t21));
%%%%%%%%%% TM %%%%%%%%%%%
% r(coh)
S2=AB(2,:); % S2 (para TM)
S22=S2*S2;
numr2=-alfa*S2;
denr2=1.0+(alfa*S0(1,:))+(alfa2*(S02 - S22));
r2=numr2/denr2;
% t(coh)
numt2=1.0-(alfa2*(S02 - S22));
dent2=1.0+(alfa*S0(1,:))+(alfa2*(S02 - S22));
t2=numt2/dent2;
% Coeficiente de fresnel r12 para TM
rm12=((epsilon2*kz1)-(epsilon1*kz2))/((epsilon2*kz1)+(epsilon1*kz2));
% Coeficiente de fresnel r21 para TM
rm21=((epsilon1*kz2)-(epsilon2*kz1))/((epsilon1*kz2)+(epsilon2*kz1));
% Coeficiente de fresnel t12 para TM
tm12=(2.0*epsilon2*kz1)/((epsilon2*kz1)+(epsilon1*kz2));
% Coeficiente de fresnel t21 para TM (Vidrio-Aire)
tm21=(2.0*epsilon1*kz2)/((epsilon1*kz2)+(epsilon2*kz1));
% Coeficiente de reflexión: slab + monocapa (TM)

```

```

rTM=r2 +((rm12*t2*t2*E)/(1.0-(rm12*r2*E)));
pto3=(t2*conj(t2))*(t2*conj(t2));
pto4=(tm12*conj(tm12))*(tm21*conj(tm21));
% Coeficiente de transmisión: slab + monocapa (TM)
tTM=(t2*tm12*sqrt(E))/(1.0 - (rm12*r2*E));
% ===== REFLECTANCIA TM =====
% Caso experimental: slab + monocapa + aire
RTMm(r)=(rTM*conj(rTM))+(rm21*conj(rm21)*pto3*pto4);
% ===== TRANSMITANCIA TM =====
% Caso experimental
TTMm(r)=(tTM*conj(tTM))*(tm21*conj(tm21));
% INCREMENTO DEL ÁNGULO
X(r)=o;
o=o+paso;
end
% PARTE TEÓRICA (caso polidisperso)
% Ángulo de incidencia inicial
o=0.0;
for r=1:num+1
Oi=o*pi/180.0;
inc=(pi-(2.0*Oi));
eta=(2.0*pi)/(km2*cos(Oi));
% kz1
kz1=(ko*n1)*cos(Oi);
% kz2
kz2=ko*sqrt((n2^2)-((n1^2)*sin(Oi)*sin(Oi)));
% Las betas
betas=IntB(li, ls, N, ko, n1, Do, sigma, m, eta, rhoST, inc, kz1);
betaf=betas(1,:);
betaf2=betaf*betaf;
betab1=betas(2,:); % Polarización TE
betab12=betab1*betab1;
betac1=betas(3,:); % Polarización TE
betac12=betac1*betac1;
betab2=betas(4,:); % Polarización TM
betab22=betab2*betab2;
betac2=betas(5,:); % Polarización TM
betac22=betac2*betac2;
%%%%%%%%%% TE %%%%%%%%%%
% r(coh)
numr1=-betac1;
denr1=1.0+(betaf)+(0.25*(betaf2 - (betac1*betab1)));

```

```

r1=numr1/denr1;
% t(coh)
numt1=1.0-(0.25*(betaf2 - (betac1*betab1)));
dent1=1.0+(betaf)+(0.25*(betaf2 - (betac1*betab1)));
t1=numt1/dent1;
% Coeficiente de fresnel r12 para TE
r12=((mu2*kz1) - (mu1*kz2))/((mu2*kz1) + (mu1*kz2));
% Coeficiente de fresnel r21 para TE
r21=((mu1*kz2) - (mu2*kz1))/((mu1*kz2) + (mu2*kz1));
% Coeficiente de fresnel t12 para TE
t12=(2.0*mu2*kz1)/(mu2*kz1 + mu1*kz2);
% Coeficiente de Fresnel t21 para TE (Vidrio-Aire)
t21=(2.0*mu1*kz2)/(mu1*kz2 + mu2*kz1);
% Coeficiente de reflexión: slab + monocapa
rTE=r1 +((r12*t1*t1)/(1.0-(r12*r1)));
pto1=(t1*conj(t1))*(t1*conj(t1));
pto2=(t12*conj(t12))*(t21*conj(t21));
% Coeficiente de transmisión: slab + monocapa
tTE=(t1*t12)/(1.0 - (r12*r1));
% ===== REFLECTANCIA TE =====
% Caso experimental: slab + monocapa + aire
RTE(r)=(rTE*conj(rTE))+(r21*conj(r21)*pto1*pto2);
% ===== TRANSMITANCIA TE =====
% Caso experimental
TTE(r)=(tTE*conj(tTE))*(t21*conj(t21));
%%%%%%%%%% TM %%%%%%%%%%%
% r(coh)
numr2=-betac2;
denr2=1.0+(betaf)+(0.25*(betaf2 - (betac2*betab2)));
r2=numr2/denr2;
% t(coh)
numt2=1.0-(0.25*(betaf2 - (betac2*betab2)));
dent2=1.0+(betaf)+(0.25*(betaf2 - (betac2*betab2)));
t2=numt2/dent2;
% Coeficiente de fresnel r12 para TM
rm12=((epsilon2*kz1)-(epsilon1*kz2))/((epsilon2*kz1)+(epsilon1*kz2));
% Coeficiente de fresnel r21 para TM
rm21=((epsilon1*kz2)-(epsilon2*kz1))/((epsilon1*kz2)+(epsilon2*kz1));
% Coeficiente de fresnel t12 para TM
tm12=(2.0*epsilon2*kz1)/((epsilon2*kz1)+(epsilon1*kz2));
% Coeficiente de fresnel t21 para TM (Vidrio-Aire)
tm21=(2.0*epsilon1*kz2)/((epsilon1*kz2)+(epsilon2*kz1));

```

```

% Coeficiente de reflexión: slab + monocapa (TM)
rTM=r2 +((rm12*t2*t2)/(1.0-(rm12*r2)));
pto3=(t2*conj(t2))*(t2*conj(t2));
pto4=(tm12*conj(tm12))*(tm21*conj(tm21));
% Coeficiente de transmisión: slab + monocapa (TM)
tTM=(t2*tm12)/(1.0 - (rm12*r2));
% ===== REFLECTANCIA TM =====
% Caso experimental: slab + monocapa + aire
RTM(r)=(rTM*conj(rTM))+(rm21*conj(rm21)*pto3*pto4);
% ===== TRANSMITANCIA TM =====
% Caso experimental
TTM(r)=(tTM*conj(tTM))*(tm21*conj(tm21));
% INCREMENTO DEL ÁNGULO
X(r)=o;
o=o+paso;
end
% Gráfica de la distribución de tamaño de la partícula
Dx=(ls-li)/N;
for r=1:N+1
Rx(r)=li+((r-1)*Dx);
Hx(r)=na(Rx(r), Do, sigma);
end
figure(1)
plot(X, RTEm, 'r', X, RTE, 'b', XangR, yaluR, 'og')
grid on
axis([0 90 0 1])
figure(2)
plot(X, TTEm, 'r', X, TTE, 'b', XangT, yaluT, 'og')
grid on
axis([0 90 0 1])

```

## B.1. Subrutina 4. Funciones integrales: $\beta_F$ , $\beta_B$ y $\beta_C$

La siguiente subrutina nos permite evaluar numéricamente las integrales  $\beta_F$ ,  $\beta_B$  y  $\beta_C$ , cuyas expresiones, Exps. 3.90, respectivamente, se muestran en la sección 3.3. Obviamente estas integrales no se pueden evaluar hasta  $+\infty$ , y más aún, la función correspondiente a la distribución de tamaños Exp. 3.98, tiene un punto singular en 0. No obstante, para cierto tamaño de partícula, esta función es cero (cota superior); y de igual manera hay un tamaño mínimo para la partícula donde la función para la distribución de tamaños es cero. Estos límites están dados por las expresiones 3.100, y son en estos límites donde se evalúan las integrales.

```
function result=IntB(li, ls, N, ko, n1, Do, sigma, m, eta, rhosT, inc, kz1)
```

```

Dx=(ls-li)/N; % Intervalo Dx - incremento
u=cos(inc);
% Cálculo de variables para fa
na0=na(li, Do, sigma);
xa=ko*n1*li;
S0li=fm_AB(m, xa, 1);
S1S2a=fm_AB(m, xa, u);
fa0=na0*rhosT*S0li(1,:); % beta_{F} So
%%%%%%%%%% TE %%%%%%%%%%%
S1a=S1S2a(1,:); % S1 (para TE)
fa1=na0*rhosT*S1a*exp(2.0*i*li*kz1); % beta_{B} j=1
%%%%%%%%%% TM %%%%%%%%%%%
S2a=S1S2a(2,:); % S2 (para TM)
fa2=na0*rhosT*S2a*exp(2.0*i*li*kz1); % beta_{B} j=2
%%%%%%%%%% TE %%%%%%%%%%%
fA1=na0*rhosT*S1a*exp(-2.0*i*li*kz1); % beta_{C} j=1
%%%%%%%%%% TM %%%%%%%%%%%
fA2=na0*rhosT*S2a*exp(-2.0*i*li*kz1); % beta_{C} j=2
%%%%%%%%%%
%%%%%%%%%%
% Cálculo de variables para fb
nb0=na(ls, Do, sigma);
xb=ko*n1*ls;
S0ls=fm_AB(m, xb, 1);
S1S2b=fm_AB(m, xb, u);
fb0=nb0*rhosT*S0ls(1,:); % beta_{F} So
%%%%%%%%%% TE %%%%%%%%%%%
S1b=S1S2b(1,:); % S1 (para TE)
fb1=nb0*rhosT*S1b*exp(2.0*i*ls*kz1); % beta_{B} j=1
%%%%%%%%%% TM %%%%%%%%%%%
S2b=S1S2b(2,:); % S2 (para TM)
fb2=nb0*rhosT*S2b*exp(2.0*i*ls*kz1); % beta_{B} j=2
%%%%%%%%%% TE %%%%%%%%%%%
fB1=nb0*rhosT*S1b*exp(-2.0*i*ls*kz1); % beta_{C} j=1
%%%%%%%%%% TM %%%%%%%%%%%
fB2=nb0*rhosT*S2b*exp(-2.0*i*ls*kz1); % beta_{C} j=2
%%%%%%%%%%
%%%%%%%%%%
% PRIMERA SUMA DE LAS INTEGRALES
Sum0=Dx*0.5*(fa0+fb0);
Sum1=Dx*0.5*(fa1+fb1); % Para TE
SumC1=Dx*0.5*(fA1+fB1); % Para TE

```

```

Sum2=Dx*0.5*(fa2+fb2); % Para TM
SumC2=Dx*0.5*(fA2+fB2); % Para TM
suma0=0.0;
suma1=suma0;
sumaC1=suma1;
suma2=sumaC1;
sumaC2=suma2;
for k=1:N-1
D=li+(k*Dx);
NAg=na(D, Do, sigma);
x=ko*n1*D;
S0=fm_AB(m, x, 1);
S1S2=fm_AB(m, x, u);
sum0(k)=NAg*rhosT*S0(1,:);
suma0=suma0+sum0(k); % Primera integral
%%%%%%%%%%%%%% TE %%%%%%%%%%%%%%%
S1=S1S2(1,:);
sum1(k)=NAg*rhosT*S1*exp(2.0*i*D*kz1); % Segunda integral
suma1=suma1+sum1(k);
sumC1(k)=NAg*rhosT*S1*exp(-2.0*i*D*kz1); % Tercera integral
sumaC1=sumaC1+sumC1(k);
%%%%%%%%%%%%%% TM %%%%%%%%%%%%%%%
S2=S1S2(2,:);
sum2(k)=NAg*rhosT*S2*exp(2.0*i*D*kz1); % Segunda integral
suma2=suma2+sum2(k);
sumC2(k)=NAg*rhosT*S2*exp(-2.0*i*D*kz1); % Tercera integral
sumaC2=sumaC2+sumC2(k);
end
I0=(Sum0+(suma0*Dx))*eta;
IB1=(Sum1+(suma1*Dx))*eta;
IC1=(SumC1+(sumaC1*Dx))*eta;
IB2=(Sum2+(suma2*Dx))*eta;
IC2=(SumC2+(sumaC2*Dx))*eta;
result=[I0; IB1; IC1; IB2; IC2];

```

## B.2. Subrutina 5. Función para la distribución de tamaños $n(a)$

El siguiente programa nos permite calcular o evaluar la función correspondiente a la distribución de tamaños, esto para partículas de alúmina y titania, en función del radio de éstas (tamaño de partícula). Donde los límites de evaluación están dados por las expresiones

3.100.

```
% Función distribución de tamaños
% Evaluación de la función n(a)
function [f1]=na(D, Do, sigma)
c1=(1/sqrt(2.0*pi))*(1/log(sigma));
c2=-0.5*(1/log(sigma))*(1/log(sigma));
v1=log(D/Do)*log(D/Do);
f1=c1*(1.0/D)*exp(c2*v1);
```

# Apéndice C

## Espectro de transmitancia

El programa descrito en este apéndice nos permite determinar los espectros de transmitancia y reflectancia para una monocapa de partículas monodispersas y polidispersas, así como la comparación de éstos con los espectros de transmitancia para el caso experimental. NOTA: El archivo *M3Z3T* con extensión *.dat*, que se carga en las primeras líneas de este algoritmo, corresponde a los datos experimentales del espectro de transmitancia para la muestra denotada como TitM2 en esta tesis. Además, los parámetros utilizados en este programa se muestran en la tabla 5.5, y son los datos de una monocapa de partículas de titania de esta misma muestra. Si se desean obtener los espectros de reflectancia y transmitancia teóricos para alguna otra muestra específica, con las monocapas de titania, o bien, para las monocapas de partículas de alúmina, basta con sustituir los parámetros de alguna de las siguientes tablas: 5.1, 5.2, 5.3, 5.4 o 5.6, en las líneas principales de este código para conseguir la curva deseada. Como nota final, este programa llama a cada una de las subrutinas, descritas en los apéndices previos, y su ejecución, al igual que los códigos anteriores, puede realizarse con la paquetería *GNU-OCTAVE*, o bien, con *MATLAB* si se tiene la licencia.

```
clear all
clc
clf
% Las siguientes 3 líneas se pueden comentar con (%) pues
% se carecen de los archivos con los datos experimentales
load M3Z3T.dat
Xe=M3Z3T(:,1)*1.0e-09;
Ye=M3Z3T(:,2)/100;
% Parámetros de la muestra (monocapa)
fprintf('El ángulo de incidencia es: ')
o=0
fprintf('La longitud de onda inferior (Lambda) es: ');
lI=450.0e-09
fprintf('La longitud de onda superior (Lambda) es: ');
lS=700.0e-09
```

```

fprintf('La frecuencia de muestreo es: ');
% frecuencia de muestreo respecto a la longitud de onda
num=250
fprintf('El radio promedio de las partículas es: ');
Do=0.220e-06
fprintf('El índice de refracción de la partícula (np) es: ');
np=2.73
fprintf('El índice de refracción del medio 1 (n1) es: ');
n1=1.0002761
fprintf('El índice de refracción del medio 2 (n2) es: ');
n2=1.515
fprintf('La superficie de recubrimiento (en porcentaje) es: ');
A=0.013
fprintf('El ancho de la gaussiana es: ');
sigma=1.4
% Evaluación de la integral
fprintf('El límite superior de evaluación para las integrales es: ');
ls=Do*(sigma^(sqrt(18)))
fprintf('El límite inferior de evaluación para las integrales es: ');
li=Do/(sigma^(sqrt(18)))
fprintf('La frecuencia de muestreo para las integrales es: ');
N=100
% Sustancias no-magnéticas
mu1=1.0;
mu2=1.0;
epsilon1=(n1^2)/mu1;
epsilon2=(n2^2)/mu2;
% PARTE TEÓRICA (Caso monodisperso)
% Definición de constantes ...
paso=(ls-li)/num;
O_i=0*pi/180;
inc=(pi-(2.0*O_i));
u=cos(inc);
m=np/n1; % Índice de refracción relativo
rhoST=(A/(pi*Do*Do))*exp(-2.0*log(sigma)*log(sigma));
l=li;
for r=1:num+1
ko=2.0*pi/l;
km=ko*n1;
km2=km*km;
x=ko*n1*Do; % Parámetro de tamaño caso monodisperso
x2=x*x; % Parámetro de tamaño al cuadrado caso monodisperso

```

```

S0=fm_AB(m, x, 1); % So caso monodisperso
S02=(S0(1,:))*(S0(1,:)); % So^2 caso monodisperso
alfa=(2*A)/(x2*cos(Oi));
alfa2=(alfa*alfa)/4.0;
AB=fm_AB(m, x, u); % Cálculo de S1 y S2
% kz1
kz1=(ko*n1)*cos(Oi);
% kz2
kz2=ko*sqrt((n2^2)-((n1^2)*sin(Oi)*sin(Oi)));
% Exponencial
beta=2.0*i*Do*kz1;
E=exp(beta);
%%%%%%%%%% TE %%%%%%%%%%%
% r(coh)
S1=AB(1,:); % S1 (para TE)
S12=S1*S1; % S1^2
numr1=-alfa*S1;
denr1=1.0+(alfa*S0(1,:))+(alfa2*(S02 - S12));
r1=numr1/denr1;
% t(coh)
numt1=1.0-(alfa2*(S02 - S12));
dent1=1.0+(alfa*S0(1,:))+(alfa2*(S02 - S12));
t1=numt1/dent1;
% Coeficiente de Fresnel r12 para TE
r12=((mu2*kz1) - (mu1*kz2))/((mu2*kz1) + (mu1*kz2));
% Coeficiente de Fresnel r21 para TE
r21=((mu1*kz2) - (mu2*kz1))/((mu1*kz2) + (mu2*kz1));
% Coeficiente de Fresnel t12 para TE
t12=(2.0*mu2*kz1)/(mu2*kz1 + mu1*kz2);
% Coeficiente de Fresnel t21 para TE (Vidrio-Aire)
t21=(2.0*mu1*kz2)/(mu1*kz2 + mu2*kz1);
% Coeficiente de reflexión: slab + monocapa
rTE=r1 +((r12*t1*t1*E)/(1.0-(r12*r1*E)));
pto1=(t1*conj(t1))*(t1*conj(t1));
pto2=(t12*conj(t12))*(t21*conj(t21));
% Coeficiente de transmisión: slab + monocapa
tTE=(t1*t12*sqrt(E))/(1.0 - (r12*r1*E));
% ===== REFLECTANCIA TE =====
% Caso experimental: slab + monocapa + aire
RTEm(r)=(rTE*conj(rTE))+(r21*conj(r21)*pto1*pto2);
% ===== TRANSMITANCIA TE =====
% Caso experimental

```

```

TTEm(r)=(tTE*conj(tTE))*(t21*conj(t21));
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%% TM %%%%%%%%%%
% r(coh)
S2=AB(2,:); % S2 (para TM)
S22=S2*S2;
numr2=-alfa*S2;
denr2=1.0+(alfa*S0(1,:))+(alfa2*(S02 - S22));
r2=numr2/denr2;
% t(coh)
numt2=1.0-(alfa2*(S02 - S22));
dent2=1.0+(alfa*S0(1,:))+(alfa2*(S02 - S22));
t2=numt2/dent2;
% Coeficiente de fresnel r12 para TM
rm12=((epsilon2*kz1)-(epsilon1*kz2))/((epsilon2*kz1)+(epsilon1*kz2));
% Coeficiente de fresnel r21 para TM
rm21=((epsilon1*kz2)-(epsilon2*kz1))/((epsilon1*kz2)+(epsilon2*kz1));
% Coeficiente de fresnel t12 para TM
tm12=(2.0*epsilon2*kz1)/((epsilon2*kz1)+(epsilon1*kz2));
% Coeficiente de fresnel t21 para TM (Vidrio-Aire)
tm21=(2.0*epsilon1*kz2)/((epsilon1*kz2)+(epsilon2*kz1));
% Coeficiente de reflexión: slab + monocapa (TM)
rTM=r2 +((rm12*t2*t2*E)/(1.0-(rm12*r2*E)));
pto3=(t2*conj(t2))*(t2*conj(t2));
pto4=((1+rm12)*(1+conj(rm12)))*((1+rm12)*(1+conj(rm12)));
% Coeficiente de transmisión: slab + monocapa (TM)
tTM=(t2*tm12*sqrt(E))/(1.0 - (rm12*r2*E));
% ===== REFLECTANCIA TM =====
% Caso experimental: slab + monocapa + aire
RTMm(r)=(rTM*conj(rTM))+(rm21*conj(rm21)*pto3*pto4);
% ===== TRANSMITANCIA TM =====
% Caso experimental
TTMm(r)=(tTM*conj(tTM))*(tm21*conj(tm21));
% INCREMENTO DE LA LONGITUD DE ONDA
X(r)=1;
l=l+paso;
end
% PARTE TEÓRICA (caso polidisperso)
l=lI; % Longitud de onda inicial
for r=1:num+1
% Definición de constantes ...
ko=2.0*pi/l;
km=ko*n1;

```

```

km2=km*km;
x=ko*n1*Do; % Parámetro de tamaño caso polidisperso
x2=x*x; % Parámetro de tamaño al cuadrado caso polidisperso
eta=(2.0*pi)/(km2*cos(Oi));
% kz1
kz1=(ko*n1)*cos(Oi);
% kz2
kz2=ko*sqrt((n2^2)-((n1^2)*sin(Oi)*sin(Oi)));
% Evaluación de las betas
betas=IntB(li, ls, N, ko, n1, Do, sigma, m, eta, rhoST, inc, kz1);
betaf=betas(1,:);
betaf2=betaf*betaf;
betab1=betas(2,:); % Polarización TE
betab12=betab1*betab1;
betac1=betas(3,:); % Polarización TE
betac12=betac1*betac1;
betab2=betas(4,:); % Polarización TM
betab22=betab2*betab2;
betac2=betas(5,:); % Polarización TM
betac22=betac2*betac2;
%%%%%%%%%%%%%% TE %%%%%%%%%%%%%%%
% r(coh)
numr1=-betac1;
denr1=1.0+(betaf)+(0.25*(betaf2 - (betac1*betab1)));
r1=numr1/denr1;
% t(coh)
numt1=1.0-(0.25*(betaf2 - (betac1*betab1)));
dent1=1.0+(betaf)+(0.25*(betaf2 - (betac1*betab1)));
t1=numt1/dent1;
% Coeficiente de fresnel r12 para TE
r12=((mu2*kz1) - (mu1*kz2))/((mu2*kz1) + (mu1*kz2));
% Coeficiente de fresnel r21 para TE
r21=((mu1*kz2) - (mu2*kz1))/((mu1*kz2) + (mu2*kz1));
% Coeficiente de fresnel t12 para TE
t12=(2.0*mu2*kz1)/(mu2*kz1 + mu1*kz2);
% Coeficiente de Fresnel t21 para TE (Vidrio-Aire)
t21=(2.0*mu1*kz2)/(mu1*kz2 + mu2*kz1);
% Coeficiente de reflexión: slab + monocapa
rTE=r1 +((r12*t1*t1)/(1.0-(r12*r1)));
pto1=(t1*conj(t1))*(t1*conj(t1));
pto2=(t12*conj(t12))*(t21*conj(t21));
% Coeficiente de transmisión: slab + monocapa

```

```

tTE=(t1*t12)/(1.0 - (r12*r1));
% ===== REFLECTANCIA TE =====
% Caso experimental: slab + monocapa + aire
RTE(r)=(rTE*conj(rTE))+(r21*conj(r21)*pto1*pto2);
% ===== TRANSMITANCIA TE =====
% Caso experimental
TTE(r)=(tTE*conj(tTE))*(t21*conj(t21));
%%%%%%%%%% TM %%%%%%%%%%%
% r(coh)
numr2=-betac2;
denr2=1.0+(betaf)+(0.25*(betaf2 - (betac2*betab2)));
r2=numr2/denr2;
% t(coh)
numt2=1.0-(0.25*(betaf2 - (betac2*betab2)));
dent2=1.0+(betaf)+(0.25*(betaf2 - (betac2*betab2)));
t2=numt2/dent2;
% Coeficiente de fresnel r12 para TM
rm12=((epsilon2*kz1)-(epsilon1*kz2))/((epsilon2*kz1)+(epsilon1*kz2));
% Coeficiente de fresnel r21 para TM
rm21=((epsilon1*kz2)-(epsilon2*kz1))/((epsilon1*kz2)+(epsilon2*kz1));
% Coeficiente de fresnel t12 para TM
tm12=(2.0*epsilon2*kz1)/((epsilon2*kz1)+(epsilon1*kz2));
% Coeficiente de fresnel t21 para TM (Vidrio-Aire)
tm21=(2.0*epsilon1*kz2)/((epsilon1*kz2)+(epsilon2*kz1));
% Coeficiente de reflexión: slab + monocapa (TM)
rTM=r2 +((rm12*t2*t2)/(1.0-(rm12*r2)));
pto3=(t2*conj(t2))*(t2*conj(t2));
pto4=(tm12*conj(tm12))*(tm21*conj(tm21));
% Coeficiente de transmisión: slab + monocapa (TM)
tTM=(t2*tm12)/(1.0 - (rm12*r2));
% ===== REFLECTANCIA TM =====
% Caso experimental: slab + monocapa + aire
RTM(r)=(rTM*conj(rTM))+(rm21*conj(rm21)*pto3*pto4);
% ===== TRANSMITANCIA TM =====
% Caso experimental
TTM(r)=(tTM*conj(tTM))*(tm21*conj(tm21));
% INCREMENTO DE LA LONGITUD DE ONDA
X(r)=1;
l=l+paso;
end
figure(1)
plot(X, RTEm, 'r', X, RTE, 'b')

```

```
axis([450e-09 700e-09 0 0.1])
grid on
figure(2)
plot(X, TTEm, 'r', X, TTE, 'b', Xe, Ye, 'k')
axis([400e-09 800e-09 0.4 1])
grid on
```

# Bibliografía

- [1] Augusto García-Valenzuela, Edahí Gutiérrez-Reyes, and Rubén G. Barrera. Multiple-scattering model for the coherent reflection and transmission of light from a disordered monolayer of particles. *J. Opt. Soc. Am. A*, 29:1161–1179, 2012.
- [2] T. Yamaguchi, H. Takahashi, and A. Sudoh. Optical behavior of a metal island film. *J. Opt. Soc. Am.*, 68:1039–1044, 1978.
- [3] A. Bagchi, R. G. Barrera, and A. K. Rajagopal. Perturbative approach to the calculation of the electric field near a metal surface. *Phys. Rev. B*, 20:4824–4838, 1979.
- [4] A. Bagchi, R. G. Barrera, and R. Fuchs. Local-field effect in optical reflectance from adsorbed overlayers. *Phys. Rev. B*, 25:7086–7096, 1982.
- [5] V. V. Truong, G. Bosi, and T. Yamaguchi. Optical behaviour of granular metal films: single-image versus multiple-image approaches in the treatment of substrate effects. *J. Opt. Soc. Am. A*, 5:1379–1381, 1988.
- [6] R. G. Barrera, M. del Castillo-Mussot, G. Monsivais, P. Villaseñor, and W. L. Mochán. Optical properties of two-dimensional disordered systems on a substrate. *Phys. Rev. B*, 43:13819–13826, 1991.
- [7] G. Bosi. Transmission of a thin film of spherical particles on a dielectric substrate: the concept of effective medium revisited. *J. Opt. Soc. Am. B*, 9:208–213, 1992.
- [8] G. Bosi. Optical response of a thin film of spherical particles on a dielectric substrate: retarded multipolar treatment. *J. Opt. Soc. Am. B*, 11:1073–1083, 1994.
- [9] G. Bosi. Optical response of a thin film of spherical particles upon a dielectric substrate: retarded multipolar treatment including multiple reflections. *J. Opt. Soc. Am. B*, 13:1691–1696, 1996.
- [10] V. A. Fedotov, V. I. Emel'yanov, K. F. MacDonald, and N. I. Zheludev. Optical properties of closely packed nanoparticle films: spheroids and nanoshells. *J. Opt. Pure Appl. Opt.*, 6:155–160, 2004.
- [11] M. L. Protopapa, M. Re A. Rizzo, and L. Pilloni. Layered silver nanoparticles embedded in a  $baF_2$  matrix: optical characterization. *Appl. Opt.*, 48:6662–6669, 2009.

- [12] M. L. Protopapa. Surface plasmon resonance of metal nanoparticles sandwiched between dielectric layers: theoretical modeling. *Appl. Opt.*, 48:778–785, 2009.
- [13] T. Menegotto, M. B. Pereira, R. R. B. Correia, and F. Horowitz. Simple modeling of plasmon resonances in *ag/sio<sub>2</sub>* nanocomposite monolayers. *Appl. Opt.*, 50:C27–C30, 2011.
- [14] M. I. Mishchenko. Multiple scattering by particles embedded in an absorbing medium. 1. foldy-lax equations, order-of-scattering expansion, and coherent field. *Opt. Express*, 16:2288–2301, 2008.
- [15] L. Tsang, J. A. Kong, and Kung-Hau Ding. *Scattering of Electromagnetic Waves: Theories and applications*, volume 1. Wiley, 2000.
- [16] A. García-Valenzuela and R. G. Barrera, editors. *Electromagnetic response of a random half-space of Mie scatterers within the effective field approximation and the determination of the effective optical coefficients*, 2003.
- [17] R. G. Barrera and A. García-Valenzuela. Coherent reflectance in a system of random mie scatterers and its relation to the effective medium approach. *Opt J. Soc. Am. A*, 20:296–311, 2003.
- [18] R. G. Barrera, A. Reyes-Coronado, and A. García-Valenzuela. Nonlocal nature of the electrodynamic response of colloidal systems. *Phys. Rev. B*, 75:184202, 2007.
- [19] E. A. van der Zeeuw, L. M. Sagis, G. J. M. Koper, Mann, M. T. Haarmans, and D. Be-deaux. The suitability of angle scanning reflectometry for colloidal particle sizing. *J. Chem. Phys.*, 105:1646–1653, 1996.
- [20] K. M. Hong. Multiple scattering of electromagnetic waves by a crowded monolayer of spheres: Application to migration imaging films. *J. Opt. Soc. Am.*, 70:821–826, 1980.
- [21] K. M. Hong. Granularity of monolayers: hard-disk model. *J. Opt. Soc. Am. A*, 5:237–240, 1988.
- [22] V. P. Dick, V. A. Loiko, and A. P. Ivanov. Angular structure of radiation scattered by monolayers of particles: experimental study. *Appl. Opt.*, 36:4235–4240, 1997.
- [23] V. A. Loiko, V. P. Dick, and V. I. Molochko. Monolayers of discrete scatterers: comparison of the single-scattering and quasi-crystalline approximations. *J. Opt. Soc. Am. A*, 15:2351–2354, 1998.
- [24] V. A. Loiko, V. P. Dick, and A. P. Ivanov. Features in coherent transmittance of a monolayer of particles. *J. Opt. Soc. Am. A*, 17:2040–2045, 2000.
- [25] V. A. Loiko and A. A. Miskevich. Light propagation through a monolayer of discrete scatterers: analysis of coherent transmission and reflection coefficients. *Appl. Opt.*, 44:3759–3768, 2005.

- [26] M. C. Peña-Gomar, J. J. F. Castillo, A. García-Valenzuela, R. G. Barrera, and E. Pérez. Coherent optical reflectance from a monolayer of large particles adsorbed on a glass surface. *Appl. Opt.*, 45:626–632, 2006.
- [27] Craig F. Bohren and Donald R. Huffman. *Absorption and scattering of light by small particles*. Wiley-Interscience, 1983.
- [28] M. C. Peña-Gomar, M. L. González-González, A. García-Valenzuela, J. Antó-Roca, and E. Pérez. Monitoring particle adsorption by use of laser reflectometry near the critical angle. *Appl. Opt.*, 43:5963–5970, 2004.
- [29] Augusto García-Valenzuela, M. C. Peña Gomar, and J. Villatoro. Sensitivity analysis of angle-sensitive-detectors based on a film resonator. *Opt. Eng.*, 42:1084–1092, 2003.
- [30] H. C. van de Hulst. *Light scattering by small particles*. Dover Publications, 1st. edition, 1981.
- [31] T. Okamoto, I. Yamaguchi, and T. Kobayashi. Local plasmon sensor gold colloid monolayers deposited upon glass substrates. *Opt. Lett.*, 25:372–374, 2000.
- [32] Y. Chen G. Xu, M. Tazawa, and P. Jin. Influence of dielectric properties of a substrate upon plasmon resonance spectrum supported ag nanoparticles. *Appl. Phys. Lett.*, 88, 2006.
- [33] C. Kuemin, T. Kraus, H. Wolf, and N. D. Spencer. Matrix effectson the surface plasmon resonance of dry supported gold nanocrystals. *Opt. Lett.*, 33:806–808, 2008.
- [34] D.-S. Wang and C.-W. Lin. Density-dependent optical response of gold nanoparticle monolayers on silicon substrates. *Opt. Lett.*, 32:2128–2130, 2007.
- [35] John David Jackson. *Classical electrodynamics*. John Wiley and Sons, 3rd. edition, 1998.
- [36] David J. Griffiths and Reed College. *Introduction to electrodynamics*. Prentice Hall, 3rd. edition, 1999.
- [37] Roald K. Wangsness. *Campos electromagnéticos*. Limusa, 2001.
- [38] M. Born and E. Wolf. *Principles of Optics*. Pergamon Press Inc., 6th. edition, 1986.
- [39] Eugene Hecht. *Óptica*. Addison Wesley Iberoamericana, 3rd. edition, 2000.
- [40] L. E. Scriven. Physics and applications of dip coating and spin coating. *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.*, 121:717–729, 1988.
- [41] L. D. Landau and B. G. Levich. Dragging of a liquid by a moving plate. *Acta Physicochim URSS*, 17:42–54, 1942.

- [42] C. Sánchez-Pérez, A. García-Valenzuela, R. Y. Sato-Berrú, J. O. Flores-Flores, and R. G. Barrera, editors. *Sizing colloidal particles from their contribution to the effective refractive index: Experimental results*, 2011.
- [43] J. G. Graeme. *Photodiode Amplifiers – Op Amp Solutions*. McGrawHill, 1995.