



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
DOCTORADO EN CIENCIAS (FÍSICA)
INSTITUTO DE CIENCIAS FÍSICAS

LA FUNCIÓN DIELECTRICA MACROSCÓPICA DE SISTEMAS ESTRUCTURADOS

QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:
DOCTOR EN FÍSICA

PRESENTA:

M.C. José Samuel Pérez Huerta

TUTOR

Dr. Wolf Luis Mochán Backal
Instituto de Ciencias Físicas, UNAM

MIEMBROS DEL COMITÉ TUTOR

Dr. Antonio Marcelo Juárez Reyes
Instituto de Ciencias Físicas, UNAM
Dr. Jorge Alejandro Reyes Esqueda
Instituto de Física, UNAM

MÉXICO, D.F. ABRIL 2014



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.

SINODALES:

Dr. Wolf Luis Mochán Backal (ICF-UNAM).

Dr. Rubén Gerardo Barrera Pérez (IFUNAM).

Dr. Yuriy Rubo (IER-UNAM).

Dr. Felipe Ramos Mendieta (UNISON).

Dr. Augusto García Valenzuela (CCADET-UNAM).

Dr. Felipe Pérez Rodríguez (IFUAP).

Dr. José Concepción Torres Guzmán (FC-UAEM).

Agradecimientos

Al Dr. Luis Mochán, que apoyó mi trabajo en cada una de las fases de mi doctorado.

Al personal del PCF de la UNAM, que facilitaron mi estancia en el postgrado.

Al personal del ICF de la UNAM, que facilitaron mi estancia en este instituto.

Al CONACyT y a la DGAPA-UNAM que me apoyaron en distintos momentos con una beca para poder realizar mis estudios de Doctorado.

A los Doctores del ICF que me dieron clases.

A la Dra. Vivechana Agarwal que me apoyó en el último tramo de mi doctorado.

Al Dr. Guillermo Ortiz y al Dr. Bernardo Mendoza, que amablemente discutimos en muchísimas ocasiones el contenido de este trabajo.

Al Dr. Maximino Aldana, que como secretario académico del ICF ayudó a mi titulación.

Al Dr. Diego Vázquez, que siempre señaló la dirección correcta a donde caminar.

A los compañeros que enriquecieron este trabajo de manera directa, como José Torres, José Lopez, Rigoberto Castro.

A los compañeros del ICF que enriquecieron académicamente mi estancia, como Mauricio Torres, Saúl Hernández, Olmo Gonzales, Verónica Vicuña, David Ariza, Ana Contreras, Aurora Hernández, Margarita Resendiz, Yenni Ortiz, Luisana Claudio.

A mis padres y mis hermanos, por su apoyo incondicional.

A los compañeros que conocí en el ICF.

A Dalia Martínez, un agradecimiento muy especial.

Resumen

En este trabajo desarrollamos un formalismo para obtener la respuesta dieléctrica macroscópica de sistemas que presentan textura espacial arbitraria. En particular consideramos el caso de sistemas con variaciones espaciales periódicas, los cuales consisten de partículas de cierto material incrustadas de manera periódica en otro material distinto. Las componentes de dicho sistema tienen una respuesta dieléctrica que puede presentar dispersión temporal y puede tener naturaleza disipativa, es decir, en el caso general se trata de funciones complejas que dependen de la frecuencia y que por lo tanto pueden corresponder a medios dieléctricos o conductores, a materiales disipativos, a medios transparentes u opacos. La geometría de las partículas y la de la red de Bravais de la estructura también es arbitraria. El formalismo que proponemos es aplicable a valores arbitrarios de la longitud de onda con respecto a las otras escalas de distancia características del sistema, como podría ser la longitud de la celda unitaria para el caso de estructuras periódicas. Esta libertad en la elección del valor de la longitud de onda nos permite incorporar los efectos del retardamiento dentro de la respuesta macroscópica del sistema.

El formalismo que presentamos se puede aplicar a sistemas en una, dos y tres dimensiones. En particular, en el caso de sistemas unidimensionales conduce a expresiones analíticas para la respuesta dieléctrica, las cuales nos permite ilustrar cómo obtener la estructura de bandas fotónicas a partir de un esquema macroscópico y hacer una comparación crítica de resultados exactos con diversas aproximaciones propuestas en la literatura. En los casos de dos y tres dimensiones recurrimos a un cálculo numérico, para el cual proponemos un esquema iterativo modificado que permite obtener la respuesta macroscópica de manera eficiente. Probamos nuestro formalismo mediante el estudio de la propagación de ondas electromagnéticas en sistemas periódicos bidimensionales cuyas componentes tienen respuestas dieléctricas constantes y reales, y también estudiamos el caso de componentes metálicas con la consecuente dispersión y absorción.

Nuestra teoría macroscópica conduce a una función dieléctrica macroscópica que resulta ser dispersiva y no local, aun cuando el sistema está compuesto por dieléctricos no dispersivos. La no localidad de la respuesta resultante, es decir, su dependencia en el vector de onda, puede reemplazarse por una permeabilidad magnética efectiva local bajo ciertos esquemas de aproximación, a pesar de que las componentes individuales del sistema no tengan una respuesta magnética. Esta permeabilidad macroscópica muestra

dispersión y tiene una serie de resonancias magnéticas. Con ella se puede calcular una relación de dispersión aproximada para los modos del sistema. El cálculo macroscópico de las bandas fotónicas permite clasificar los modos fotónicos en transversales, longitudinales o mixtos de acuerdo a su polarización, y a la simetría del sistema y de la dirección de propagación. Para un sistema bidimensional hallamos una región con dispersión negativa en la cual permitividad y permeabilidad son ambas negativas, correspondiendo a los llamados metamateriales izquierdos con índice de refracción negativo. Analizamos los límites de validez de este tipo de interpretaciones.

Abstract

We develop a formalism for the calculation of the macroscopic dielectric response of composite systems with spatial fluctuations. We focus on periodic systems which are made of particles of one material embedded periodically within a matrix of another material, each of which is characterized by a well defined dielectric function. The nature of these dielectric functions is arbitrary, and could correspond to dielectric or conducting, transparent or opaque, absorptive and dispersive materials. The geometry of the particles and the Bravais lattice of the composite are also arbitrary. Our formalism is valid for arbitrary wavelengths, as compared to characteristic length-scales of the system such as the size of the unit cell for the periodic case. This freedom in the value of the wavelength lets us account for retardation effects within the macroscopic response of the system.

Our formalism is applicable to one, two and three dimensional systems. In particular, for one dimensional systems we get analytical expression for the macroscopic dielectric response. We show how to get the full photonic band structure of the system within our macroscopic scheme and we compare our results with those of the usual 1D band structure calculations. For two and three dimensional systems we implement numerical calculations based on a modified iterative method in order to get efficiently the macroscopic response. We test our formalism through the study the propagation of electromagnetic waves in two dimensional crystals made of periodic arrays of cylindrical holes in a dispersion-less dielectric host and we also study one system made of metal cylinders embedded in vacuum.

Our macroscopic theory yields a dispersive and non-local macroscopic response, even when the compound is made of dispersion-less dielectrics. The no-locality of the macroscopic response, i. e. its wavevector dependence, can be accounted for approximately through an effective local magnetic permeability, despite the fact that the components of the system we considered are non-magnetic. This macroscopic permeability is dispersive and has resonances. With the effective permeability and the local limit of the dielectric macroscopic responses we compute an approximate dispersion relation for the normal modes of the system. The macroscopic calculation of the photonic band structure of the system allows us to classify the normal photonic modes as transverse, longitudinal or mixed modes, according to their polarization, the symmetry of the system and the direction of the wavevector. For a two-dimensional system, we obtain a region of left-handedness where magnetic and dielectric responses are both negative. We discuss the limits of validity of this kind of physical interpretation.

Índice general

1. Introducción	1
2. Respuesta electromagnética: notación y definiciones	7
2.1. Introducción	7
2.2. Descomposición promedio y fluctuante	9
2.3. Descomposición longitudinal y transversal	11
2.3.1. Modos electromagnéticos en medios homogéneos e isotrópicos . .	12
3. Respuesta macroscópica en el límite no retardado	15
3.1. Formalismo	15
3.2. Sistema periódico	16
3.3. Sistema de dos componentes	18
3.4. Método recursivo	20
4. Respuesta macroscópica con retardamiento	27
4.1. Formalismo	27
4.2. Sistema periódico de dos componentes	29
4.3. Método recursivo: caso con retardamiento	31
4.3.1. Método recursivo con una métrica	31
4.3.2. Implementación	33
5. Sistema unidimensional	37
5.1. Cálculo analítico	37
5.2. Ejemplo	40
5.3. Cálculo recursivo	43
5.4. Modos propios	43
5.5. Estructura de bandas	47
5.6. Aproximación local y respuesta magnética	51
6. Sistema bidimensional	55
6.1. Respuesta dieléctrica	55
6.2. Bandas fotónicas	60

6.2.1. Polarización TE	61
6.2.2. Polarización TM	67
6.3. Aproximación local y respuesta magnética	70
6.4. Componente metálica	74
7. Conclusiones	79
Apéndice A. Correspondencia entre formulaciones macroscópicas	81
Apéndice B. Respuesta macroscópica: generalización para metales	85
Bibliografía	89

Capítulo 1

Introducción

El poder controlar con precisión el flujo de fotones de manera similar como se controla el flujo de electrones en dispositivos electrónicos ha despertado un gran interés tanto en el ámbito tecnológico como en el de investigación básica. La tendencia hacia la miniaturización de las componentes electrónicas y ópticas de diversos dispositivos implica grandes retos tecnológicos y resolver ciertas limitaciones impuestas por la Física. Por citar un ejemplo, una apertura en un material opaco, cuyo tamaño es menor a la longitud de onda utilizada, transmite luz, pero muy poca, como discutió inicialmente Bethe [1]. Esta limitación es de un carácter físico fundamental y no se puede eliminar de manera directa, pero puede superarse recurriendo a fenómenos diversos. W. Ebbesen y colaboradores [2] descubrieron el fenómeno de la *transmisión extraordinaria de la luz* en arreglos periódicos de huecos practicados en una placa de plata, a pesar de que el diámetro de los huecos y el periodo del arreglo eran mucho menores que la longitud de onda de la luz que incidía en la placa. La transmisión extraordinaria se observa para ciertas frecuencias y consiste en que se transmite más luz de la esperada adjudicable a las contribuciones de cada hueco en la placa iluminada. En el trabajo [2] propusieron que el acoplamiento de la luz incidente con los plasmones superficiales era el mecanismo responsable de la elevada transmisión óptica observada. Los plasmones son oscilaciones colectivas de los portadores de carga y se observan principalmente en los metales [3]. Este nuevo fenómeno despertó un gran interés general en estas estructuras metálicas perforadas [4, 5, 6, 7]. A partir del descubrimiento de la transmisión extraordinaria, otros autores han revisado y discutido el papel que juegan los plasmones superficiales en la transmisión. Por ejemplo, se ha verificado experimentalmente que la transmisión extraordinaria ocurre también en regiones de longitud de onda de microondas, donde los metales que fueron empleados son prácticamente conductores perfectos y que por lo tanto no pueden sustentar plasmones de superficie. Sin embargo, la red de huecos en el metal se comportan como un sistema donde puede haber excitaciones parecidas a los plasmones. Dicho mecanismo se conoce como *imitación de plasmón* [8, 9, 10].

Un experimento similar al descrito anteriormente, pero con resultados opuestos fue

realizado por Braun et al. en el año de 2009. En éste observaron que para ciertas frecuencias se presenta una disminución importante en la transmisión de la luz a través de una placa metálica con huecos [11], muy por debajo de la esperada. A este fenómeno se le conoce como *supresión de la transmisión de la luz*. El experimento consistió en hacer perforaciones cilíndricas de manera periódica a un placa ultradelgada de oro, de 20 nm. de espesor, tan delgada que era parcialmente transparente. Se midió la transmitancia óptica y se comparó con la de una placa de oro del mismo grosor pero sin huecos. Además, los huecos en la placa, según el resultado de Bethe [1], podrían propagar luz, aunque fuese poca, y por lo tanto incrementar la transmitancia total de la placa perforada. En contraste, en el experimento de Braun et al. [11] se mostró que la presencia de huecos en la placa de metal puede disminuir la transmitancia. Para ciertas frecuencias se suprime de manera considerable la transmisión de la luz en el sistema debido al fuerte acoplamiento entre los plasmones superficiales de ambas caras de la película [12, 13]. Además de estos sistemas de películas metálicas con huecos, también se ha probado que al cubrir con discos metálicos los huecos de películas estructuradas como las descritas arriba, es posible transmitir más luz [14] que cuando los huecos se dejan descubiertos. Estos ejemplos muestran la relevancia de estudiar las propiedades ópticas de sistemas estructurados que, aunado a las aplicaciones tecnológicas principalmente en el campo de la optoelectrónica y la fotónica, es un área de estudio activa que continuará vigente en los próximos años.

Por el interés tanto experimental como tecnológico, es necesario entender con claridad y profundidad fenómenos como los mencionados en los párrafos anteriores, y para ello, contar con formulaciones teóricas adecuadas e implementaciones numéricas factibles que permitan entender estos fenómenos y quizás predecir comportamientos novedosos. Para este tipo de análisis, sería indispensable conocer cómo responde el sistema estructurado ante la presencia de una onda electromagnética que se propaga en él.

En éste trabajo desarrollamos una teoría macroscópica para estudiar las propiedades electromagnéticas de sistemas estructurados. Una respuesta macroscópica o efectiva es aquella que permite describir al sistema en escalas relativamente grandes de distancia, sin detallar explícitamente el comportamiento en pequeñas escalas, pero incorporando los efectos relevantes del comportamiento microscópico. Determinar esta respuesta para un sistema arbitrario requiere incorporar varios fenómenos como son el esparcimiento múltiple [15, 16], la interacción electromagnética entre partículas vecinas y las variaciones abruptas de los campos en los diferentes medios de la estructura, entre otros. Aunque se han propuesto numerosas técnicas para calcular respuestas efectivas, muchas son aproximaciones que van asociadas a severos límites de validez, mientras que otras tantas resultan tener un alto costo computacional.

La propagación de la luz en medios lineales homogéneos es un tema bien conocido y exhaustivamente presentado en libros de texto de electrodinámica [17, 18, 19]. La respuesta electromagnética del medio determina completamente el comportamiento de la luz en dicho material. Debido a que las frecuencias de las resonancias en la permeabilidad

magnética μ de las sustancias típicas se hallan muy por debajo del rango visible, al estudiar la propagación de luz suelen ignorarse los efectos magnéticos y considerar al medio como no magnético, i.e. $\mu = 1$ [20]. De este modo, la respuesta electromagnética del medio queda determinada por su función dieléctrica ϵ . Sin embargo, estructuras artificiales como los sistemas mencionados arriba presentan inhomogeneidades espaciales y su respuesta dieléctrica varía de una posición a otra. Otros ejemplos de sistemas inhomogéneos son las estructuras granuladas y los sistemas multicristalinos. En estos medios, el comportamiento de una onda electromagnética se vuelve más complicado. Por ello el estudio de la propagación de la luz en estos medios ha sido objeto de muchas investigaciones [21, 22, 23, 24, 25, 26, 27, 28, 29, 30, 31].

Los medios artificiales periódicos se conocen como *cristales fotónicos* y pueden tener componentes metálicas y/o dieléctricas [32]. El motivo para incluir componentes metálicas es la fuerte dependencia de su respuesta dieléctrica de la frecuencia. Sin embargo, las componentes metálicas suelen presentar fuerte disipación debido al movimiento de los portadores de carga. Los cristales fotónicos fabricados exclusivamente de componentes dieléctricos han sido empleadas ampliamente, sobre todo por su baja disipación de energía [16, 33, 34, 35, 36, 37, 38]. Se ha logrado fabricar cristales fotónicos dieléctricos donde una de sus componentes tiene permitividad muy grande, del orden de algunas centenas, en particular, para frecuencias en la región de microondas [39, 40]. Estas componentes permiten un elevado contraste entre las respuestas dieléctricas de las distintas componentes del sistema, lo cual lleva a comportamientos novedosos.

Además de los efectos de la transmisión y supresión extraordinaria de la luz, existen otros fenómenos interesantes en sistemas inhomogéneos. Podemos mencionar la localización de Anderson en medios desordenados [31, 41], la refracción negativa [42], el efecto Doppler inverso [43] y el camuflaje óptico [44] entre otros [45]. Estos fenómenos no se observan en medios naturales y solamente aparecen en sistemas estructurados con cierta *textura* espacial. Estos medios son con frecuencia llamados metamateriales, término que designa a aquellos materiales que presentan comportamientos electromagnéticos inusuales comparados con los materiales ópticos usuales [46]. Existen acepciones más restringidas y más amplias en la literatura; en nuestro trabajo llamaremos metamaterial a cualquier sistemas estructurado producidos mediante la alternancia de dos o más materiales.

Un tipo de metamaterial comúnmente implementado consiste de una matriz dieléctrica con incrustaciones metálicas, de una matriz metálica con incrustaciones dieléctricas, o una matriz de cualquier tipo con huecos como ilustramos esquemáticamente en la figura 1.1. El sistema de anillos resonadores a la izquierda de la fig. 1.1 consiste en placas aislantes sobre las cuales se han *dibujado* anillos conductores, como se suele hacer en los circuitos impresos. Este fue el primer sistema en que se demostró el fenómeno de la refracción negativa, la cual se obtuvo en la región de microondas [47]. Los anillos que ilustramos son dos anillos concéntricos que se han interrumpido en extremos opuestos. Cuando un campo magnético incide en los anillos metálicos, se induce una corriente en

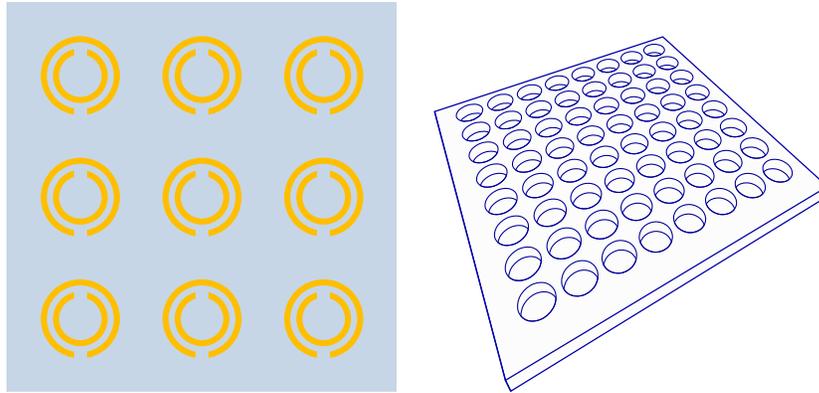


Figura 1.1: Ejemplos de sistemas estructurados. El lado izquierdo muestra un conjunto de anillos resonadores metálicos grabados en una placa aislante. El derecho muestra huecos perforados de manera periódica a través de una placa metálica.

ellos y por lo tanto un dipolo magnético. Las interrupciones en los anillos forman un capacitor que ante la presencia de un campo eléctrico, genera una distribución de carga entre sus “placas” de tipo dipolar. Escogiendo de manera adecuada los parámetros de los anillos, se puede conseguir que la resonancia en la respuesta magnética y la resonancia en la respuesta dieléctrica se traslapen en la misma región espectral. Típicamente, las funciones respuesta cambian de signo al atravesar una resonancia, por lo cual, estos materiales tienen permitividad *efectiva* ϵ y permeabilidad efectiva μ negativas alrededor de sus resonancias. Según una predicción debida a Veselago [48], en estas condiciones, una onda electromagnética incidente sobre la superficie de estos metamateriales desde un material ordinario sería refractada en una dirección del lado opuesto a la normal a la superficie cuando la comparamos con la dirección de una onda refractada en las condiciones usuales. En estos materiales se cumple la ley de Snell, pero con un índice de refracción *negativo*.

En la literatura, existen varias propuestas para estudiar la propagación de una onda electromagnética en sistemas estructurados como los ejemplos que hemos mencionado. Una de las más conocidas es la técnica numérica de las diferencias finitas en el dominio del tiempo, que fue propuesta por Yee [49] y ha sido ampliamente implementada constituyendo un referente obligado para el estudio de la propagación de ondas electromagnéticas en sistemas con disposiciones espaciales arbitrarias [50]. Otra propuesta es la aproximación de dipolo discreto, que sirve para estudiar la interacción de la luz con partículas de forma arbitraria, inicialmente propuesta para partículas pequeñas [51], pero posteriormente generalizada para incluir efectos de retardamiento debido al tamaño finito de la partícula [15]. En la aproximación de dipolo discreto, se modela una partícula de forma arbitraria como un conjunto de entidades puntuales polarizables cuya polariz-

abilidad se escoge de manera conveniente. La interacción electromagnética entre partes del sistema se reemplaza por una suma de interacciones dipolares. Mientras más entes polarizables se incluyan en el cálculo, más realista será el modelo del objeto que se desea estudiar.

Un conjunto de métodos alternativos a las propuestas anteriores lo constituyen las teorías de *medio efectivo* [52, 53, 54, 55, 56, 57, 58, 59, 30]. Algunas de las propuestas sólo son válidas en ciertos casos límites. Por ejemplo, que la fracción de llenado de las inclusiones sea baja, que las partículas estén acomodadas en una red cúbica, que la longitud de onda sea mucho mayor que el tamaño de la celda unitaria. El propósito de las teorías de medio efectivo es describir al medio compuesto como si fuera un material homogéneo que responde al campo electromagnético mediante una *respuesta efectiva*. De hecho, cuando describimos las propiedades electromagnéticas de un material ordinario en términos de su permitividad y su permeabilidad solemos ignorar la estructura siempre discreta que tiene la materia a nivel atómico, reemplazándolo por medio efectivo homogéneo, lo cual solemos justificar argumentando que la longitud de onda de la luz es tan grande que no *verá* los detalles de la estructura microscópica del medio [10, 53, 54, 60].

Bajo el enfoque de las teorías de medio efectivo, se han propuesto en una variedad de trabajos la manera en cómo llevar a cabo el proceso de homogeneización de los materiales con estructura espacial [60, 61, 62, 63, 64, 65, 66, 67, 68], y también existen varios trabajos donde se han discutido los límites de validez de dichas teorías [21, 69, 70].

En este trabajo estudiamos sistemas estructurados mediante el enfoque de medio efectivo con una formulación basada en las ecuaciones de Maxwell. En los capítulos 3 y 4 hacemos el desarrollo teórico de nuestra propuesta para obtener la respuesta dieléctrica macroscópica del sistema ϵ^M . Primero, en el capítulo 3, consideramos el caso en que la longitud de onda es mucho mayor que el tamaño de la celda unitaria y mostramos que la respuesta dieléctrica macroscópica se puede obtener mediante una fracción continuada. En dicha fracción aparecen ciertos coeficientes que sólo dependen de la geometría del sistema y que se obtienen mediante un esquema recursivo muy eficiente. Además, aparece una *variable espectral* que solamente depende de las respuestas dieléctricas de cada compuesto, las cuales a su vez son en general funciones complejas de la frecuencia. Después de analizar este caso, en el capítulo 4, generalizamos la teoría al caso general en el que la longitud de onda puede ser comparable con el tamaño de la celda unitaria. Discutimos el carácter dispersivo y no local de la respuesta ϵ^M resultante. Mostramos cómo, al tomar dicho carácter en cuenta, podemos obtener las relaciones de dispersión *exactas* de los modos electromagnéticos del sistema a partir de nuestro planteamiento macroscópico. Nuestra formulación nos permite clasificar dichos modos en transversales, longitudinales o mixtos de acuerdo a su polarización, a la simetría del sistema y a la dirección de propagación. Discutimos también cómo hallar una respuesta magnética local aun cuando las componentes de la estructura no sean magnéticas. Esta respuesta magnética, junto con la respuesta eléctrica local permiten hacer el cálculo aproximado

de las relaciones de dispersión. Aunque nuestro planteamiento es de carácter general, lo aplicamos principalmente a estructuras periódicas.

En el capítulo 5 resolvemos el caso de sistemas unidimensionales, lo cual nos permite obtener una expresión *analítica* para la respuesta dieléctrica. Ésta nos sirve para poner a prueba los procedimientos numéricos que propusimos en el capítulo 3 para posteriormente ilustrar detalladamente cómo obtener la estructura de bandas fotónicas a partir de un esquema macroscópico y verificar nuestros resultados comparándolos con la expresión analítica deducida a partir de la *matriz de transferencia* que relaciona a los campos eléctricos a través de un periodo de la estructura.

En el capítulo 6 implementamos el esquema recursivo de cálculo de la respuesta dieléctrica. Nuestras implementaciones se pueden aplicar a sistemas estructurados en dos y tres dimensiones. Mostramos resultados numéricos para algunos sistemas 2D cuyas componentes son dieléctricas y otros con una componente metálica. El cálculo es económico en cuanto a recursos de cómputo y pueden ejecutarse en computadoras personales convencionales, sin requerir de equipos de alto desempeño o de paralelizar los cálculos y usar un *cluster* [60]. Realizamos cálculos en el límite de longitud de onda larga y en el caso retardado, empleamos esta respuesta para obtener esquemas de bandas fotónicas y clasificamos las bandas resultantes. Obtuvimos numéricamente la respuesta magnética efectiva y buscamos regiones de dispersión anómala.

Por último, en el capítulo 7 presentamos nuestras conclusiones.

Capítulo 2

Respuesta electromagnética: notación y definiciones

2.1. Introducción

Para obtener la respuesta macroscópica o efectiva de un sistema estructurado, como los descritos en el capítulo 1, es necesario partir de la respuesta electromagnética microscópica para incorporar de manera completa los efectos microscópicos en el comportamiento de la estructura a escala macroscópica.

Para describir el comportamiento de un material en presencia de un campo eléctrico, en los libros de texto de electromagnetismo se suele considerar al medio como un conjunto de moléculas polarizables que responden a una excitación mediante un reacondo de sus cargas [17, 18]. La polarización de un medio \mathbf{P} , es decir, su momento dipolar por unidad de volumen, se relaciona con el campo eléctrico \mathbf{E} por medio de

$$\mathbf{P} = \chi \mathbf{E}, \quad (2.1)$$

donde χ es la *susceptibilidad eléctrica* del medio. En la ec. (2.1) hemos hecho la *aproximación lineal*, es decir, supusimos que la polarización depende linealmente del campo eléctrico y que la susceptibilidad es una propiedad intrínseca del material. Esta aproximación es válida mientras el campo eléctrico sea mucho menor que los campos eléctricos típicos a los que están sujetos los electrones del material. La ecuación (2.1) es también válida en sistemas densos como sólidos o líquidos los cuales en general no pueden considerarse como un simple conjunto de moléculas.

La ecuación de Gauss,¹

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = 4\pi\rho, \quad (2.2)$$

¹En este trabajo expresamos las ecuaciones de la electrodinámica en el sistema C.G.S. Gaussiano [17].

donde ρ es la densidad de carga *externa*, incorpora el efecto de polarización del medio a través del desplazamiento eléctrico

$$\mathbf{D} = \mathbf{E} + 4\pi\mathbf{P} = \varepsilon\mathbf{E}, \quad (2.3)$$

La relación entre \mathbf{D} y \mathbf{E} se conoce como *la ecuación constitutiva*. Aquí,

$$\varepsilon = \mathbf{1} + 4\pi\boldsymbol{\chi} \quad (2.4)$$

es la permitividad o respuesta dieléctrica del material.

A continuación profundizamos en la relación entre los campos \mathbf{D} y \mathbf{E} . En el caso más simple, podríamos interpretar el lado derecho de la ec. (2.3) con un simple producto entre la constante dieléctrica ε y el campo eléctrico \mathbf{E} . Sin embargo, esto sólo sería válido en un medio no dispersivo, homogéneo e isotrópico. En general, la respuesta del material podría depender de la posición, si el medio fuese inhomogéneo. Además, dado que \mathbf{D} y \mathbf{E} son campos vectoriales, una relación lineal más general entre ellos involucraría un tensor ε y no un simple escalar, es decir, la respuesta podría depender de la dirección del campo y \mathbf{D} podría apuntar en una dirección distinta a la de \mathbf{E} . Finalmente, la respuesta podría ser distinta de acuerdo al valor de la frecuencia ω con la que oscila el campo, dando lugar al fenómeno de la *dispersión temporal*. Poniendo estas ideas juntas, tendríamos

$$\mathbf{D}(\mathbf{r}, \omega) = \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{r}, \omega)\mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega), \quad (2.5)$$

donde $\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{r}, \omega)$ sería una matriz dependiente de la posición \mathbf{r} y de la frecuencia ω . Aquí hemos expresado la ec. constitutiva (2.3) en la *representación* de la posición y la frecuencia, pero podríamos expresarla en la representación del tiempo a través de una transformada de Fourier

$$\mathbf{D}(\mathbf{r}, t) = \int dt' \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{r}, t - t')\mathbf{E}(\mathbf{r}, t'), \quad (2.6)$$

donde hemos empleado el teorema de la convolución y definimos $\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{r}, t - t')$ como la transformada de Fourier de $\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{r}, \omega)$. La ec. (2.6) muestra explícitamente que el desplazamiento eléctrico en un punto y en un tiempo t dado depende del campo eléctrico en ese punto y del valor del campo en el mismo punto pero en otros tiempos t' . Esto se debe a que el sistema tarda un tiempo finito en polarizarse después de que se ha aplicado un campo eléctrico. El principio de *causalidad* implicaría que sólo los tiempos $t' \leq t$ contribuyen a la convolución (2.6), i.e. $\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{r}, t - t') = 0$ si $t < t'$.

La ec. (2.6) no es aún la relación lineal más general entre \mathbf{D} y \mathbf{E} . Así como la respuesta no es instantánea en general, podría ser que el desplazamiento eléctrico en un punto del espacio \mathbf{r} dependa no solamente del campo eléctrico en ese punto, sino además dependa del campo eléctrico en otros puntos cercanos \mathbf{r}' . Esta dependencia de la excitación en puntos cercanos se conoce como *no-localidad* o *dispersión espacial*. En el

caso no local, el desplazamiento en la representación de la posición y del tiempo estaría dado por

$$\mathbf{D}(\mathbf{r}, t) = \int dt' \int d^3\mathbf{r}' \varepsilon(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t - t') \mathbf{E}(\mathbf{r}', t'). \quad (2.7)$$

En un sistema no local, existen interacciones no incluidas en los campos \mathbf{D} y \mathbf{E} que transmiten información sobre el campo electromagnético de uno a otro punto del sistema. Por ejemplo, imaginemos un electrón en un metal que a cierto tiempo t' y en alguna posición \mathbf{r}' interacciona con un campo eléctrico $\mathbf{E}(\mathbf{r}', t')$. Este electrón podría desplazarse y llegar a otra posición \mathbf{r} en algún tiempo posterior t , modificando la corriente eléctrica en ese punto del sistema. Por lo tanto, $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ dependería de $\mathbf{E}(\mathbf{r}', t')$. Otro efecto que da origen a la no localidad es el principio de exclusión de Pauli que implica que un electrón que se acerca a otro con el mismo espín, lo desplace para evitar compartir su posición. Por lo tanto los metales serían sistemas no locales [71].

En un sistema homogéneo, el efecto que una excitación en \mathbf{r}' produce en otra posición \mathbf{r} no dependería por separado de \mathbf{r} y \mathbf{r}' , sino que dependería exclusivamente de la separación $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$. Es decir, si trasladamos \mathbf{r} pero simultáneamente trasladamos \mathbf{r}' por la misma distancia en la misma dirección, la respuesta del sistema no se vería modificada. En este caso, la ec. (2.7) sería una convolución en el tiempo y en el espacio, por lo cual podríamos tomar la transformada de Fourier inversa en el espacio y tiempo para obtener la relación constitutiva en la representación de la frecuencia y del *vector de onda* \mathbf{k} ,

$$\mathbf{D}(\mathbf{k}, \omega) = \varepsilon(\mathbf{k}, \omega) \mathbf{E}(\mathbf{k}, \omega), \quad (2.8)$$

En esta representación, la operación de ε sobre el campo es un simple producto tensorial cartesiano.

Hemos visto que podemos escribir la respuesta del material empleando diferentes *representaciones* como ilustran las ecs. (2.7) o (2.8). Podemos escribir la relación constitutiva de manera general, sin recurrir ninguna representación específica, como

$$\mathbf{D} = \hat{\varepsilon} \mathbf{E}. \quad (2.9)$$

En esta ecuación escribimos la respuesta dieléctrica $\hat{\varepsilon}$ como un *operador* lineal que actúa sobre el campo \mathbf{E} . Utilizaremos ($\hat{\quad}$) sobre un símbolo para denotar que es un operador.

2.2. Descomposición promedio y fluctuante

El campo, la polarización y el desplazamiento eléctrico en el interior de sistemas con textura, como podría ser un cristal artificial formado por un arreglo periódico de inclusiones en el interior de una matriz, mostrarán en general fluctuaciones espaciales. Ilustramos éstas en la figura 2.1, la cual muestra esquemáticamente un campo arbitrario \mathbf{F} dentro del medio y su descomposición en una parte fluctuante \mathbf{F}_f y otra promedio

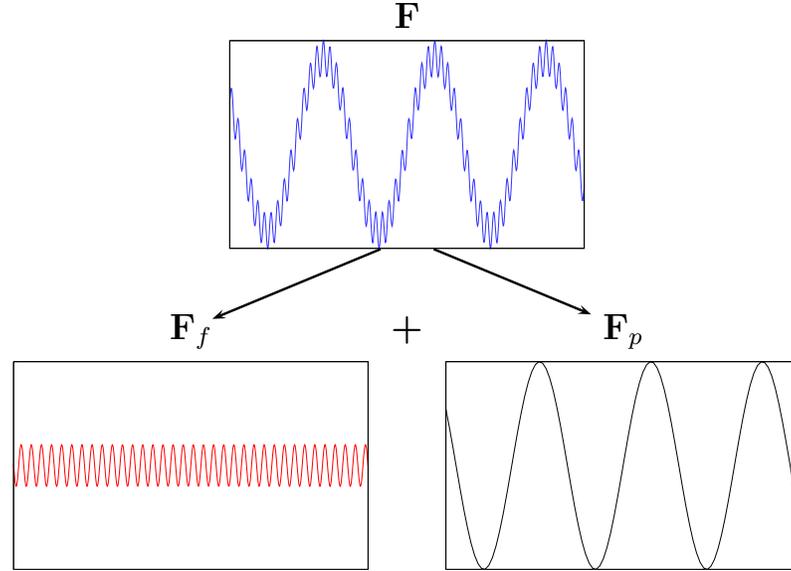


Figura 2.1: Un campo arbitrario \mathbf{F} en el interior de un material con textura. Podemos descomponer al campo en una contribución \mathbf{F}_f que oscila rápidamente como función de la posición (izquierda abajo) y otra contribución \mathbf{F}_p que oscila lentamente en el espacio (derecha abajo).

\mathbf{F}_p . La escala de variación de las fluctuaciones \mathbf{F}_f del campo inducidas por la textura del material son del orden de la escala de distancias d características de la textura, como podría ser el tamaño de las inclusiones o el periodo de la red cristalina artificial. Además, el campo tiene una componente promedio \mathbf{F}_p cuya escala espacial de variación es del orden de la longitud de onda $\lambda = 2\pi c/\omega$ característica de una onda electromagnética que se propaga en el vacío con la misma frecuencia ω con que oscila \mathbf{F} . Aquí, c es la velocidad de la luz en el vacío y suponemos que la escala microscópica es pequeña comparada con λ (más adelante relajaremos esta suposición). En este trabajo llamaremos escala *microscópica* a la escala espacial del sistema estructurado, no a la escala atómica. Dicha escala está determinada por ejemplo, por el tamaño de partículas inmersas en una matriz y/o la distancia entre ellas.

Esta descomposición de \mathbf{F} nos sugiere el definir dos operadores que podrían actuar sobre cualquier campo: el proyector *promedio* $\hat{\mathcal{P}}_p$ y el proyector *fluctuaciones* $\hat{\mathcal{P}}_f$. Dado un campo \mathbf{F} cualquiera, escribimos su componente promedio como $\mathbf{F}_p = \hat{\mathcal{P}}_p \mathbf{F}$ y su parte fluctuante como $\mathbf{F}_f = \hat{\mathcal{P}}_f \mathbf{F}$. Estos proyectores deben cumplir con

$$\hat{\mathcal{P}}_\alpha \hat{\mathcal{P}}_\alpha = \hat{\mathcal{P}}_\alpha, \quad \alpha = p, f, \quad (2.10a)$$

$$\hat{\mathcal{P}}_f \hat{\mathcal{P}}_p = \hat{\mathcal{P}}_p \hat{\mathcal{P}}_f = \mathbf{0}, \quad (2.10b)$$

$$\hat{\mathcal{P}}_p + \hat{\mathcal{P}}_f = \hat{\mathbf{1}}. \quad (2.10c)$$

Estas ecuaciones tienen un significado claro. Por ejemplo, una vez promediado un campo

este ya no tendría fluctuaciones (ec. (2.10b)), por lo que un segundo promedio no haría más cambio (ec. (2.10a)) y si añadimos de vuelta las fluctuaciones que habíamos quitado para obtener el promedio, recuperaríamos el campo original (ec. (2.10c)).

Identificaremos a los *campos promediados* con los *campos macroscópicos*, $\mathbf{F}_p \equiv \mathbf{F}^M$.² El desplazamiento macroscópico \mathbf{D}^M y el campo eléctrico macroscópico \mathbf{E}^M están relacionados mediante la ecuación constitutiva macroscópica

$$\mathbf{D}^M = \hat{\epsilon}^M \mathbf{E}^M, \quad (2.11)$$

donde ϵ^M es la respuesta macroscópica de la estructura.

Empleando los proyectores $\hat{\mathcal{P}}_\alpha$ podemos reescribir la relación constitutiva ec. (2.9) como

$$\mathbf{D}_\alpha = \hat{\mathcal{P}}_\alpha \mathbf{D} = \hat{\mathcal{P}}_\alpha \hat{\epsilon} \mathbf{E} = \hat{\mathcal{P}}_\alpha \hat{\epsilon} \sum_\beta \hat{\mathcal{P}}_\beta \mathbf{E} = \sum_\beta \hat{\mathcal{P}}_\alpha \hat{\epsilon} \hat{\mathcal{P}}_\beta \hat{\mathcal{P}}_\beta \mathbf{E} = \sum_\beta \hat{\epsilon}_{\alpha\beta} \mathbf{E}_\beta, \quad (2.12)$$

donde usamos las ecs. (2.10) e introducimos la notación

$$\hat{\mathcal{O}}_{\alpha\beta} = \hat{\mathcal{P}}_\alpha \hat{\mathcal{O}} \hat{\mathcal{P}}_\beta, \quad \alpha, \beta = p, f, \quad (2.13)$$

para las proyecciones de cualquier operador $\hat{\mathcal{O}}$.

Comparando las ecs. (2.11) con (2.12), para $\alpha = p$, vemos que $\hat{\epsilon}^M \neq \hat{\epsilon}_{pp}$, es decir, la respuesta macroscópica no es el promedio de la respuesta microscópica. Más bien, hay que añadir una corrección al promedio de la respuesta microscópica. Esta corrección se conoce como *efecto de campo local*, y proviene del acoplamiento entre el campo promedio y el campo fluctuante [24, 25]. En los capítulos 3 y 4 presentaremos propuestas para encontrar esta corrección. Antes de ello, introduciremos otros proyectores que nos ayudarán en nuestro análisis.

2.3. Descomposición longitudinal y transversal

Una herramienta útil para nuestra formulación es la descomposición de un campo vectorial $\mathbf{F} = \mathbf{F}_L + \mathbf{F}_T$, que es el *teorema de Helmholtz* [72], en sus componentes *longitudinal* $\mathbf{F}_L = \hat{\mathcal{P}}_L \mathbf{F}$ y *transversal* $\mathbf{F}_T = \hat{\mathcal{P}}_T \mathbf{F}$, donde $\hat{\mathcal{P}}_L$ y $\hat{\mathcal{P}}_T$ son los proyectores longitudinal y transversal respectivamente. La proyección de los campos cumplen con

$$\nabla \cdot \mathbf{F}_L = \nabla \cdot \mathbf{F}, \quad (2.14a)$$

$$\nabla \times \mathbf{F}_L = \mathbf{0}, \quad (2.14b)$$

$$\nabla \times \mathbf{F}_T = \nabla \times \mathbf{F}, \quad (2.14c)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{F}_T = 0, \quad (2.14d)$$

$$(\hat{\mathcal{P}}_L + \hat{\mathcal{P}}_T) \mathbf{F} = \mathbf{F}. \quad (2.14e)$$

²Usaremos indistintamente superíndices o subíndices con la finalidad de simplificar la lectura de nuestras expresiones, siempre y cuando no exista lugar a confusión.

La parte longitudinal del campo cumple con ecuaciones del tipo electrostático mientras que la parte transversal obedece ecuaciones del tipo magnetostático. La proyección \mathbf{F}_L se puede hallar de un potencial escalar ϕ ,

$$\mathbf{F}_L = -\nabla\phi. \quad (2.15)$$

De acuerdo a la ec. (2.14a), éste potencial cumple con la ecuación de Poisson

$$\nabla^2\phi = -\nabla \cdot \mathbf{F}. \quad (2.16)$$

Una solución de la ec. (2.16) en la representación de la posición es

$$\phi(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi} \int d^3\mathbf{r}' \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \nabla' \cdot \mathbf{F}(\mathbf{r}'), \quad (2.17)$$

Sustituyendo la solución (2.17) en la ec. (2.15) obtenemos el proyector longitudinal

$$\hat{\mathcal{P}}_L = \nabla\nabla^{-2}\nabla, \quad (2.18)$$

donde definimos ∇^{-2} como el inverso del operador de Laplace, $\nabla^2\nabla^{-2} = \hat{1}$, con $\hat{1}$ el operador identidad. En la representación de la posición, identificamos a ∇^{-2} con un operador integral cuyo kernel es la función de Green coulombiana $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -1/(4\pi|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$ para la ecuación de Poisson. En la representación de Fourier podemos escribir el mismo operador como³

$$\mathcal{P}_L = \frac{\mathbf{k}\mathbf{k}}{k^2}, \quad (2.19)$$

A partir de \mathcal{P}_L podemos obtener el proyector transversal

$$\mathcal{P}_T = 1 - \mathcal{P}_L \quad (2.20)$$

usando la propiedad (2.14e).

Utilizamos los proyectores longitudinal o transversal $\hat{\mathcal{P}}_\eta$ para reescribir la relación constitutiva ec. (2.9) como

$$\mathbf{D}_\eta = \sum_\nu \hat{\epsilon}_{\eta\nu} \mathbf{E}_\nu, \quad (2.21)$$

con $\eta, \nu = L, T$. Esta descomposición es análoga a la que hicimos en la ec. (2.12).

2.3.1. Modos electromagnéticos en medios homogéneos e isotrópicos

Como un ejemplo sencillo para ilustrar la utilidad de los proyectores \mathcal{P}_L y \mathcal{P}_T , en esta sección mostraremos cómo se pueden obtener las relaciones de dispersión de los modos

³Cuando utilicemos una representación particular de un operador, prescindiremos del símbolo ($\hat{}$).

2.3 Descomposición longitudinal y transversal

electromagnéticos en el interior de un medio homogéneo e isotrópico. En éstos medios, al no haber otra dirección preferencial que la definida por el vector de onda \mathbf{k} , no puede haber acoplamiento entre campos longitudinales y transversales. Entonces, $\varepsilon_{LT} = 0$ y $\varepsilon_{TL} = 0$, y podemos escribir la relación constitutiva (2.21) como

$$\mathbf{D}_L(\mathbf{k}, \omega) = \varepsilon_{LL}(\mathbf{k}, \omega)\mathbf{E}_L(\mathbf{k}, \omega) \quad (2.22)$$

y

$$\mathbf{D}_T(\mathbf{k}, \omega) = \varepsilon_{TT}(\mathbf{k}, \omega)\mathbf{E}_T(\mathbf{k}, \omega), \quad (2.23)$$

donde $\varepsilon_{LL}(\mathbf{k}, \omega)$ y $\varepsilon_{TT}(\mathbf{k}, \omega)$ son números complejos para cada \mathbf{k} y ω .

La ecuación de Gauss (2.2) en ausencia de carga externa en esta representación es

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{D}(\mathbf{k}, \omega) = \mathbf{k} \cdot \mathbf{D}_L(\mathbf{k}, \omega) = 0. \quad (2.24)$$

De acuerdo a la ec. (2.22), bajo estas condiciones un campo eléctrico longitudinal no nulo sólo podría existir si

$$\varepsilon_{LL}(\mathbf{k}, \omega) = 0. \quad (2.25)$$

Ésta es una relación intrínseca entre el vector de onda y la frecuencia y constituye la *relación de dispersión* para los modos longitudinales.

Por otro lado, tomando el rotacional de la ec. de Faraday

$$\nabla \times \mathbf{E} = \frac{i\omega}{c}\mathbf{B}, \quad (2.26)$$

obtenemos

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{E} = \frac{\omega^2}{c^2}\mathbf{D}, \quad (2.27)$$

donde hemos usamos la ec. de Ampere para materiales no magnéticos y sin fuentes

$$\nabla \times \mathbf{B} = -\frac{i\omega}{c}\mathbf{D}. \quad (2.28)$$

Apliquemos el operador transversal a la ec. (2.27)

$$-\nabla^2 \mathcal{P}_T \mathbf{E} = \frac{\omega^2}{c^2} \mathcal{P}_T \mathbf{D}, \quad (2.29)$$

que en la representación de Fourier escribimos como

$$\left(\mathbf{k}^2 - \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon_{TT}(\mathbf{k}, \omega) \right) \mathbf{E}_T(\mathbf{k}, \omega) = \mathbf{0}, \quad (2.30)$$

donde hemos usado la ec. (2.23) para tener todo en términos de \mathbf{E}_T . De aquí obtenemos que un campo eléctrico transversal no nulo sólo podría existir si se cumple

$$\mathbf{k}^2 = \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon_{TT}(\mathbf{k}, \omega). \quad (2.31)$$

Ésta es la relación de dispersión para los modos transversales.

Capítulo 3

Respuesta macroscópica en el límite no retardado

3.1. Formalismo

Consideremos un sistema con textura espacial en el cual se propaga una onda electromagnética cuya longitud de onda en el vacío es $\lambda = 2\pi c/\omega$. Si la escala característica d de la textura fuera muy pequeña comparada con λ , la onda se propagaría prácticamente como si el sistema fuese un medio homogéneo con ciertas propiedades electromagnéticas *efectivas*. Nuestro objetivo es determinar las propiedades electromagnéticas de este medio homogeneizado. En este capítulo obtendremos la respuesta macroscópica de un sistema estructurado haciendo una *aproximación de onda larga*, es decir, despreciando la cantidad pequeña d/λ . Por ejemplo, una onda luminosa visible propagándose en un material *nanoestructurado* cumpliría con esta aproximación. Notamos que d/λ es despreciable cuando la luz recorre la distancia característica d en un tiempo d/c mucho más pequeño que el periodo $\lambda/c = 2\pi/\omega$ de oscilación del campo electromagnético. Por eso es que la aproximación de onda larga también se conoce como aproximación *cuasiestática*, la cual es válida en el límite *no retardado*. En este caso, se cumplen las ecuaciones de Maxwell electro-estáticas en distancias del orden de d .

Supongamos que un *campo eléctrico externo* longitudinal \mathbf{E}_L^{ext} actúa sobre el sistema estructurado. Éste campo satisface la ley de Gauss (2.2)

$$\nabla \cdot \mathbf{E}_L^{ext} = 4\pi\rho, \quad (3.1)$$

además de $\nabla \times \mathbf{E}_L^{ext} = \mathbf{0}$ por ser completamente longitudinal. La divergencia de la parte longitudinal del desplazamiento eléctrico es $\nabla \cdot \mathbf{D}_L = 4\pi\rho$ y, análogamente, su rotacional es nulo $\nabla \times \mathbf{D}_L = \mathbf{0}$. Por lo tanto, podemos identificar ambos campos, es decir $\mathbf{E}_L^{ext} = \mathbf{D}_L$.

En la aproximación de onda larga, el campo eléctrico es derivable de un potencial escalar $\mathbf{E} = -\nabla\phi$ y por lo tanto es un campo completamente longitudinal, es decir

$\mathbf{E} = \mathbf{E}_L$. Por lo tanto, la ec. constitutiva (2.9) es $\mathbf{D}_L = \hat{\epsilon}_{LL}\mathbf{E}_L$ de donde despejamos

$$\mathbf{E}_L = (\hat{\epsilon}_{LL})^{-1}\mathbf{D}_L. \quad (3.2)$$

Promediando la ec. anterior, obtenemos

$$\mathbf{E}_L^p = (\hat{\epsilon}_{LL})_{pp}^{-1}\mathbf{D}_L^p + (\hat{\epsilon}_{LL})_{pf}^{-1}\mathbf{D}_L^f. \quad (3.3)$$

Como \mathbf{D}_L es el campo externo entonces *no tiene fluctuaciones espaciales* inducidas por la textura del sistema. Por lo tanto $\mathbf{D}_L^f = \mathbf{0}$. Si el campo externo tuviera fluctuaciones, no tendría sentido físico hacer una formulación macroscópica. El campo eléctrico longitudinal promedio es entonces simplemente

$$\mathbf{E}_L^p = (\hat{\epsilon}_{LL})_{pp}^{-1}\mathbf{D}_L^p. \quad (3.4)$$

Los campos de la ec. (3.4) son campos macroscópicos, por lo cual de la relación constitutiva macroscópica (2.11) identificamos la respuesta macroscópica del sistema

$$(\hat{\epsilon}_{LL}^M)^{-1} = (\hat{\epsilon}_{LL})_{pp}^{-1}. \quad (3.5)$$

El inverso de la proyección longitudinal de la respuesta dieléctrica macroscópica es el promedio del inverso de la parte longitudinal de la respuesta dieléctrica microscópica. Este resultado es un caso particular de un enunciado más general: *la respuesta macroscópica a una excitación externa es el promedio de la correspondiente respuesta microscópica.* La respuesta macroscópica en el límite de onda larga fue obtenido en los trabajos [24, 25] y ha sido implementada para obtener las propiedades ópticas de cristales artificiales [62].

En la siguiente sección usamos el resultado (3.5) para obtener la respuesta macroscópica de una estructura periódica aun cuando nuestro resultado es válido para cualquier sistema con fluctuaciones espaciales en el cual el retardamiento de la luz sea despreciable.

3.2. Sistema periódico

Un tipo interesante de sistema estructurado es el sistema periódico artificial. Un cristal artificial está formado por la repetición espacial periódica (red) de una unidad espacial estructurada (celda unitaria). La red de Bravais de un cristal en $D = 1, 2$ o 3 dimensiones es el conjunto $\{\mathbf{R}\} = \{\sum_{i=1}^D n_i \mathbf{d}_i\}$, donde n_i son D números enteros y \mathbf{d}_i son D vectores primitivos. Usamos el teorema de *Bloch* para escribir el campo eléctrico en el interior del cristal como [73]

$$\mathbf{E}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} \mathbf{E}_{\mathbf{G}} e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{G})\cdot\mathbf{r}}, \quad (3.6)$$

donde \mathbf{r} es un punto cualquiera dentro del cristal, $\mathbf{E}_{\mathbf{G}}$ es la amplitud de una onda plana con vector de onda $\mathbf{G} + \mathbf{k}$, \mathbf{G} es un vector que pertenece a la red recíproca del cristal

definida por $e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{R}} = 1$ y \mathbf{k} es el *vector de Bloch* que escogemos en la primera zona de Brillouin y que, consistentemente con la aproximación de onda larga, supondremos que es muy pequeño, i.e., $k \ll G$ para todo vector recíproco $\mathbf{G} \neq \mathbf{0}$.

En la representación de la posición, escribimos un operador como

$$\hat{O}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_{\mathbf{G}, \mathbf{G}'} \hat{O}_{\mathbf{G}\mathbf{G}'} e^{i((\mathbf{k}+\mathbf{G})\cdot\mathbf{r} - (\mathbf{k}+\mathbf{G}')\cdot\mathbf{r}')}, \quad (3.7)$$

con \mathbf{r}, \mathbf{r}' dos posiciones dentro del cristal. En la representación de Fourier, escribimos al operador como una “matriz” cuyos “índices” son un par de vectores \mathbf{G}, \mathbf{G}' .

En la superposición de ondas de la ec. (3.6), las componentes con vector de onda $\mathbf{k} + \mathbf{G}$ fluctúan espacialmente sobre distancias $\sim |\mathbf{d}_i|$. La única contribución del campo que no tiene fluctuaciones espaciales inducidas por la estructura del sistema es la que tiene el vector de onda \mathbf{k} pequeño. Identificamos esta componente con la proyección promedio del campo. El proyector promedio $\hat{\mathcal{P}}_p$ deberá remover del campo todas aquellas componentes con vector recíproco diferente del vector nulo,

$$\mathcal{P}_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}^p = \delta_{\mathbf{G}\mathbf{0}}\delta_{\mathbf{G}'\mathbf{0}}, \quad (3.8)$$

con $\delta_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}$ la delta de Kronecker. Para implementar nuestro resultado (3.5), requerimos del proyector longitudinal $\hat{\mathcal{P}}^L$, que en esta representación es

$$\mathcal{P}_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}^L = \delta_{\mathbf{G}\mathbf{G}'} \frac{\mathbf{k} + \mathbf{G}}{|\mathbf{k} + \mathbf{G}|} \frac{\mathbf{k} + \mathbf{G}}{|\mathbf{k} + \mathbf{G}|}. \quad (3.9)$$

En el límite de onda larga $k \ll G \neq 0$, por lo que consideramos $\mathbf{k} + \mathbf{G} \approx \mathbf{G}$ y podemos simplificar la notación para el operador longitudinal como

$$\mathcal{P}_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}^L = \delta_{\mathbf{G}\mathbf{G}'} \hat{\mathbf{G}}\hat{\mathbf{G}}, \quad (3.10)$$

donde hemos definido los vectores unitarios $\hat{\mathbf{G}} \equiv \mathbf{G}/|\mathbf{G}|$. Para $\mathbf{G} = \mathbf{0}$ definimos $\hat{\mathbf{G}} \equiv \hat{\mathbf{k}} = \mathbf{k}/k$. Notemos que debemos definir la dirección en que se propaga la onda de Bloch $\hat{\mathbf{k}}$ aún en el límite $k \rightarrow 0$.

En el espacio de Fourier, escribimos la ecuación constitutiva (2.9) en términos de sus componentes

$$\mathbf{D}_{\mathbf{G}} = \sum_{\mathbf{G}'} \epsilon_{\mathbf{G}\mathbf{G}'} \mathbf{E}_{\mathbf{G}'}, \quad (3.11)$$

donde $\epsilon_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}$ es la transformada de Fourier de la respuesta microscópica $\epsilon(\mathbf{r})$ con vector de onda $\mathbf{G} - \mathbf{G}'$. Usamos la representación (3.9) del proyector longitudinal para obtener la respuesta longitudinal microscópica como

$$\epsilon_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}^{LL} \equiv \mathcal{P}_{\mathbf{G}\mathbf{G}}^L \epsilon_{\mathbf{G}\mathbf{G}'} \mathcal{P}_{\mathbf{G}'\mathbf{G}'}^L = \hat{\mathbf{G}}\eta_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}\hat{\mathbf{G}'}, \quad (3.12)$$

donde hemos definido la componente longitudinal de la respuesta dieléctrica como

$$\eta_{\mathbf{G}\mathbf{G}'} = \hat{\mathbf{G}} \cdot (\epsilon_{\mathbf{G}\mathbf{G}'} \hat{\mathbf{G}}'). \quad (3.13)$$

En el subespacio de los campos longitudinales, la inversa de la respuesta longitudinal es

$$(\epsilon^{LL})_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}^{-1} = \hat{\mathbf{G}} \eta_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}^{-1} \hat{\mathbf{G}}'. \quad (3.14)$$

Escribimos la respuesta macroscópica longitudinal del sistema, usando la ec. (3.5), como

$$(\epsilon_{LL}^M)^{-1} = \hat{\mathbf{k}} \eta_{00}^{-1} \hat{\mathbf{k}}, \quad (3.15)$$

donde, después de haber invertido la matriz $\eta_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}$ debemos tomar el elemento 00 .

Resumamos el procedimiento para obtener la respuesta macroscópica del sistema: primero hallamos la componente longitudinal $\eta_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}$ de la respuesta dieléctrica microscópica, luego la invertimos como una matriz con índices \mathbf{G} y \mathbf{G}' para posteriormente tomar la componente 00 de la matriz así invertida. Con este procedimiento obtenemos la proyección $\hat{\mathbf{k}}\hat{\mathbf{k}} \cdot \epsilon_M^{-1} \cdot \hat{\mathbf{k}}\hat{\mathbf{k}}$ de ϵ_M^{-1} a lo largo de la dirección longitudinal $\hat{\mathbf{k}}$ correspondiente a una onda plana de longitud de onda larga \mathbf{k} . Repitiendo este procedimiento para otras direcciones $\hat{\mathbf{k}}$ independientes entre si podemos obtener todas las componentes cartesianas de ϵ_M^{-1} y mediante una simple inversión cartesiana obtener la respuesta dieléctrica macroscópica ϵ_M . Debemos enfatizar que la respuesta dieléctrica macroscópica es en general un tensor, aunque la respuesta microscópica de la que partimos sea isotrópica. Para sistemas de dos dimensiones, el tensor tiene cuatro componentes cartesianas y en tres dimensiones tiene nueve componentes.

3.3. Sistema de dos componentes

Ahora aplicaremos la teoría desarrollada en la sec. 3.2 para calcular la respuesta macroscópica de un cristal artificial binario formado de inclusiones de un material que ocupan cierta región B y se colocan de manera periódica dentro de una matriz que ocupa el resto A del espacio, como ilustramos esquemáticamente en la figura 3.1. Supondremos que los materiales tienen funciones dieléctricas ϵ_A y ϵ_B bien definidas, es decir, que son suficientemente grandes para poder estar caracterizadas mediante una función dieléctrica, aunque también pediremos que sean suficientemente chicas para poder emplear la aproximación de onda larga. Entonces, escribimos

$$\epsilon(\mathbf{r}) = \begin{cases} \epsilon_A & \text{si } \mathbf{r} \in A, \\ \epsilon_B & \text{si } \mathbf{r} \in B. \end{cases} \quad (3.16)$$

Además, supondremos que cada material A y B es isotrópico. Las funciones dieléctricas ϵ_A y ϵ_B podrían ser dispersivas, es decir, depender de la frecuencia ω de oscilación del

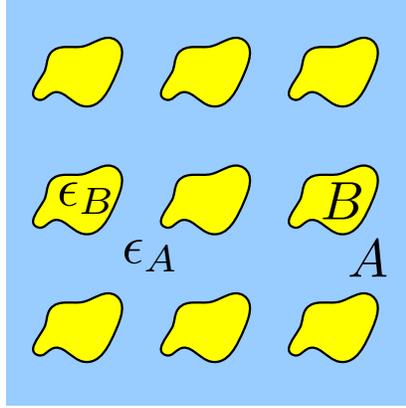


Figura 3.1: Sistema que consiste en partículas colocadas periódicamente en una matriz. Se muestra con la letra B la región ocupada por las partículas y con la letra A la región ocupada por la matriz. La función dieléctrica de las partículas es ϵ_B y la de la matriz es ϵ_A .

campo, y pueden ser funciones complejas, es decir, pueden corresponder a materiales disipativos. Caracterizamos la región B ocupada por las inclusiones mediante una función $B(\mathbf{r})$ a la que llamaremos *función indicadora*, definida mediante

$$B(\mathbf{r}) = \begin{cases} 1 & \text{si } \mathbf{r} \in B, \\ 0 & \text{si } \mathbf{r} \notin B. \end{cases} \quad (3.17)$$

Empleando ésta función indicadora, podemos escribir la respuesta microscópica del sistema como

$$\begin{aligned} \epsilon(\mathbf{r}) &= \epsilon_A - \epsilon_{AB}B(\mathbf{r}) \\ &= \frac{\epsilon_A}{u} \left(u - B(\mathbf{r}) \right) \end{aligned} \quad (3.18)$$

donde definimos $\epsilon_{AB} \equiv \epsilon_A - \epsilon_B$, e introdujimos la *variable espectral* $u = 1/(1 - \epsilon_B/\epsilon_A)$ [53]. Utilizamos la ec. (3.13) para hallar la componente longitudinal de ésta respuesta microscópica (3.18)

$$\eta_{\mathbf{G}\mathbf{G}'} = \frac{\epsilon_A}{u} \left(u - B_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}^{LL} \right), \quad (3.19)$$

donde $B_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}^{LL} = \hat{\mathbf{G}} \cdot (B_{\mathbf{G}\mathbf{G}'} \hat{\mathbf{G}}')$ es la proyección longitudinal de la función indicadora, representada en el espacio recíproco por la transformada de Fourier espacial $B_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}$ de la función indicadora $B(\mathbf{r})$ con vector de onda $\mathbf{G} - \mathbf{G}'$, donde definimos la transformada mediante

$$B_{\mathbf{G}\mathbf{G}'} = \int_{\text{celda}} \frac{d\mathbf{r}^3}{\Omega} B(\mathbf{r}) e^{i(\mathbf{G}-\mathbf{G}') \cdot \mathbf{r}}, \quad (3.20)$$

donde la integral se realiza sobre la celda unitaria, cuyo volumen denotamos por Ω .

Ahora debemos invertir la componente longitudinal (3.19) de la respuesta microscópica y finalmente hallar su elemento 00

$$\eta_{00}^{-1} = \frac{u}{\epsilon_A} \left(u - B_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}^{LL} \right)_{00}^{-1}. \quad (3.21)$$

En la siguiente sección mostraremos cómo hallar el elemento $(u - B_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}^{LL})_{00}^{-1}$ mediante un método recursivo que nos permite evitar el operar con matrices grandes.

3.4. Método recursivo

Notamos que el elemento 00 de la inversa de la componente longitudinal, ec. (3.21), es análogo a una función de Green proyectada [74, 75]

$$\mathcal{G}_{00}(\mathcal{E}) = \langle 0 | \hat{\mathcal{G}}(\mathcal{E}) | 0 \rangle, \quad (3.22)$$

sobre un estado $|0\rangle$, donde

$$\hat{\mathcal{G}}(\mathcal{E}) = (\mathcal{E} - \hat{\mathcal{H}})^{-1} \quad (3.23)$$

es un *operador de Green* correspondiente a algún hamiltoniano $\hat{\mathcal{H}}$ y \mathcal{E} es una energía compleja. Aquí usamos la notación de Dirac en términos de *bra's* y *ket's* [76] para especificar estados.

Haydock [77, 78] propuso un método muy eficiente para hallar la proyección de un operador de Green (3.22) de manera recursiva. La ec. (3.21) tiene una estructura similar a la ec. (3.22). Una comparación sugiere las correspondencias

$$\hat{\mathcal{H}} \rightarrow B_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}^{LL}, \quad (3.24)$$

$$\mathcal{E} \rightarrow u. \quad (3.25)$$

En esta sección mostramos el esquema recursivo de Haydock y posteriormente usaremos las analogías (3.24) y (3.25) para calcular la respuesta macroscópica del sistema periódico en el límite de onda larga a través de la ec. (3.21).

En el método de Haydock, comenzamos con un estado $|0\rangle$ normalizado al cual aplicamos el operador $\hat{\mathcal{H}}$ para obtener un nuevo estado

$$|\tilde{1}\rangle \equiv \hat{\mathcal{H}}|0\rangle = b_1|1\rangle + a_0|0\rangle. \quad (3.26)$$

Escribimos el estado auxiliar $|\tilde{1}\rangle$ como una combinación lineal del estado inicial $|0\rangle$ y de un estado nuevo $|1\rangle$ al que exigimos que sea ortogonal a $|0\rangle$,

$$\langle 0 | 1 \rangle = 0 \quad (3.27)$$

y normalizado $\langle 1|1\rangle = \langle 0|0\rangle = 1$. Multiplicando la ec. (3.26) por el bra $\langle 0|$ y usando la condición (3.27) hallamos el coeficiente

$$a_0 = \langle 0|\hat{\mathcal{H}}|0\rangle, \quad (3.28)$$

el cual es real pues $\hat{\mathcal{H}}$ es hermitiano. Multiplicando la ec. (3.26) por el bra $\langle \tilde{1}|$ y usando la condición de ortonormalidad, hallamos

$$|b_1|^2 = \langle \tilde{1}|\tilde{1}\rangle - a_0^2, \quad (3.29)$$

de donde podemos obtener el módulo $|b_1|$. La fase de b_1 es arbitraria, pero un cambio en su fase implica un cambio trivial en la fase del estado $|1\rangle$. Por lo tanto, arbitrariamente tomamos a $b_1 = |b_1|$ como un número real positivo. A partir de los coeficientes a_0 y b_1 podemos determinar el nuevo estado como

$$|1\rangle = \frac{|\tilde{1}\rangle - a_0|0\rangle}{b_1} \quad (3.30)$$

Iteramos un procedimiento similar al anterior y en cada paso construimos un estado nuevo a partir de los anteriores. Para la $n + 1$ -ava repetición usamos la relación

$$|\widetilde{n+1}\rangle \equiv \hat{\mathcal{H}}|n\rangle = b_{n+1}|n+1\rangle + a_n|n\rangle + b_n|n-1\rangle, \quad (3.31)$$

donde $|\widetilde{n+1}\rangle$ es un estado auxiliar, $|n+1\rangle$ es un estado nuevo a determinar y obtenemos los *coeficientes de Haydock* a_n y b_{n+1} a partir de la condición de ortonormalidad

$$\langle n+1|m\rangle = \delta_{n+1,m}, \quad (3.32)$$

donde $|m\rangle$ es cualquiera de los estados construidos previamente.

Multiplicando por $\langle n|$ a la izquierda de la ec. (3.31) y usando la ortonormalidad (3.32), obtenemos

$$a_n = \langle n|\widetilde{n+1}\rangle = \langle n|\hat{\mathcal{H}}|n\rangle. \quad (3.33)$$

Al tomar el módulo al cuadrado de $|\widetilde{n+1}\rangle$ obtenemos

$$|b_{n+1}|^2 = \langle \widetilde{n+1}|\widetilde{n+1}\rangle - a_n^2 - b_n^2, \quad (3.34)$$

y escogemos b_{n+1} como su raíz cuadrada real positiva. La presencia del término $b_n|n-1\rangle$ en la ec. (3.31) es consecuencia inmediata de la hermiticidad de $\hat{\mathcal{H}}$, la cual también implica que no haya más términos del lado derecho de dicha ecuación. Una vez determinados los coeficientes correspondientes a este paso de la recursión, podemos obtener el estado nuevo

$$|n+1\rangle = \frac{|\widetilde{n+1}\rangle - a_n|n\rangle - b_n|n-1\rangle}{b_{n+1}}. \quad (3.35)$$

Iterando las ecuaciones (3.33), (3.34), (3.35) partiendo de $n = 0$ y definiendo $b_0 \equiv 0$, construimos la base $\{|n\rangle\}$, en la cual el hamiltoniano $\hat{\mathcal{H}}$ se representa por una matriz tridiagonal simétrica de la forma

$$\hat{\mathcal{H}} \rightarrow \begin{pmatrix} a_0 & b_1 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ b_1 & a_1 & b_2 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & b_2 & a_2 & b_3 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & b_3 & a_3 & b_4 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}. \quad (3.36)$$

De acuerdo a la ec. (3.24) para emplear el esquema de Haydock al cálculo de la respuesta macroscópica podemos identificar al hamiltoniano como

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{\mathbf{G}, \mathbf{G}'} |\mathbf{G}\rangle B_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}^{LL} \langle \mathbf{G}'| \quad (3.37)$$

donde el ket $|\mathbf{G}\rangle$ representa un *estado* de onda plana con vector de onda $\mathbf{k} + \mathbf{G}$. Aplicando este hamiltoniano a un estado $|n\rangle$ obtenemos

$$\hat{\mathcal{H}}|n\rangle = \sum_{\mathbf{G}, \mathbf{G}'} |\mathbf{G}\rangle B_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}^{LL} \langle \mathbf{G}'|n\rangle \quad (3.38)$$

$$= \sum_{\mathbf{G}, \mathbf{G}'} |\mathbf{G}\rangle \hat{\mathbf{G}} \cdot (B_{\mathbf{G}\mathbf{G}'} \hat{\mathbf{G}}') \phi_n(\mathbf{G}') \quad (3.39)$$

$$= \sum_{\mathbf{G}, \mathbf{G}'} |\mathbf{G}\rangle \hat{\mathbf{G}} \cdot B_{\mathbf{G}\mathbf{G}'} \phi_n(\mathbf{G}'), \quad (3.40)$$

donde introdujimos una *función de onda* ϕ_n correspondiente al estado $|n\rangle$ y evaluada en el espacio recíproco

$$\phi_n(\mathbf{G}) \equiv \langle \mathbf{G}|n\rangle, \quad (3.41)$$

y donde definimos la función de onda vectorial longitudinal correspondiente

$$\phi_n(\mathbf{G}) \equiv \hat{\mathbf{G}} \phi_n(\mathbf{G}). \quad (3.42)$$

La ec. (3.40) contiene al término

$$\psi_n(\mathbf{G}) \equiv \sum_{\mathbf{G}'} B_{\mathbf{G}\mathbf{G}'} \phi_n(\mathbf{G}'), \quad (3.43)$$

el cual notamos, usando la ec. (3.20), que es un convolución. Por lo tanto, de acuerdo al teorema de la convolución [79], $\psi(\mathbf{G})$ es simplemente la integral de Fourier de

$$\psi_n(\mathbf{r}) = B(\mathbf{r}) \phi_n(\mathbf{r}), \quad (3.44)$$

donde $\phi_n(\mathbf{r})$ se obtiene de una serie de Fourier con coeficientes $\phi_n(\mathbf{G})$ y vectores de onda \mathbf{G} . Entonces,

$$\hat{\mathcal{H}}|n\rangle = \sum_{\mathbf{G}} |\mathbf{G}\rangle \hat{\mathbf{G}} \cdot \psi_n(\mathbf{G}). \quad (3.45)$$

Proyectando este resultado sobre un estado $|\mathbf{G}\rangle$ obtenemos

$$\langle \mathbf{G} | n+1 \rangle \equiv \phi_{\widetilde{n+1}}(\mathbf{G}) = \hat{\mathbf{G}} \cdot \psi_n(\mathbf{G}). \quad (3.46)$$

Ahora podemos escribir la ec. (3.33) como

$$a_n = \langle n | n+1 \rangle = \sum_{\mathbf{G}} \langle n | \mathbf{G} \rangle \langle \mathbf{G} | n+1 \rangle = \sum_{\mathbf{G}} \phi_n^*(\mathbf{G}) \phi_{\widetilde{n+1}}(\mathbf{G}), \quad (3.47)$$

donde empleamos la completéz de los estados de onda plana $\sum_{\mathbf{G}} |\mathbf{G}\rangle \langle \mathbf{G}| = \mathbf{1}$. De acuerdo a la ec. (3.34), podemos calcular los coeficientes de Haydock b_{n+1} a partir de

$$\langle \widetilde{n+1} | \widetilde{n+1} \rangle = \sum_{\mathbf{G}} |\phi_{\widetilde{n+1}}(\mathbf{G})|^2. \quad (3.48)$$

Finalmente, empleando la ec. (3.35) obtenemos

$$\phi_{n+1}(\mathbf{G}) = \frac{\phi_{\widetilde{n+1}}(\mathbf{G}) - a_n \phi_n(\mathbf{G}) - b_n \phi_{n-1}(\mathbf{G})}{b_{n+1}}. \quad (3.49)$$

Las ecs. (3.41)-(3.49) nos proporcionan un procedimiento recursivo que nos permite obtener todos los coeficientes de Haydock y todas las funciones $\phi_n(\mathbf{G})$ a partir de nuestro estado inicial $\phi_0(\mathbf{G}) = \delta_{\mathbf{G},0}$. Este procedimiento resulta muy conveniente para ser implementado numéricamente, ya que requiere únicamente multiplicaciones de funciones de \mathbf{G} , multiplicación de funciones de \mathbf{r} y de integrales y series de Fourier, operaciones que son económicas en cuanto a recursos de cómputo. Debemos notar que este método recursivo no requiere operaciones con matrices [60], o más bien, sólo requiere operaciones con matrices que son diagonales en el espacio recíproco o en el espacio real, los cuales están conectados entre sí mediante transformaciones de Fourier.

Habiendo obtenido los coeficientes de Haydock, podemos representar el operador a invertir como la matriz tridiagonal

$$(u - B_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}^{LL}) \rightarrow \begin{pmatrix} u - a_0 & -b_1 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ -b_1 & u - a_1 & -b_2 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & -b_2 & u - a_2 & -b_3 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & -b_3 & u - a_3 & -b_4 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}. \quad (3.50)$$

La ec. (3.21) muestra que no necesitamos calcular todos los elementos de la matriz $(u - B_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}^{LL})^{-1}$, sino únicamente aquel con índices $\mathbf{00}$. Dada la estructura tridiagonal de $B_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}^{LL}$, podemos identificar la matriz a invertir con \mathcal{K}_0 , donde definimos

$$\mathcal{K}_n = \left(\begin{array}{c|c} u - a_n & -\mathcal{R}_{n+1} \\ \hline -\mathcal{R}_{n+1}^T & \mathcal{K}_{n+1} \end{array} \right), \quad (3.51)$$

recursivamente [80]. Aquí $\mathcal{R}_{n+1} = (b_{n+1}, 0, 0, \dots)$ es un vector renglón y \mathcal{R}_{n+1}^T su transpuesto. Escribimos la inversa del bloque \mathcal{K}_n también en bloques del tipo

$$\mathcal{K}_n^{-1} = \left(\begin{array}{c|c} s_n & \mathcal{T}_{n+1} \\ \hline \mathcal{T}_{n+1}^T & \mathcal{U}_{n+1} \end{array} \right) \quad (3.52)$$

donde s_n es un número, \mathcal{T}_{n+1} es un vector renglón, \mathcal{T}_{n+1}^T su vector transpuesto y \mathcal{U}_{n+1} una matriz cuadrada. Notamos que para obtener la respuesta macroscópica únicamente necesitamos s_0 . Por definición, $\mathcal{K}_n^{-1}\mathcal{K}_n = \mathbf{1}$, donde $\mathbf{1}$ es una matriz identidad de las mismas dimensiones que \mathcal{K}_n . Escribiendo esta ecuación en bloques empleando las ecs. (3.51) y (3.52), es fácil hallar

$$s_n = (u - a_n - \mathcal{R}_{n+1}\mathcal{K}_{n+1}^{-1}\mathcal{R}_{n+1}^T)^{-1} \quad (3.53)$$

y puesto que \mathcal{R}_{n+1} tiene solamente un elemento distinto de cero, s_n es simplemente

$$s_n = (u - a_n - b_{n+1}^2 s_{n+1})^{-1}, \quad (3.54)$$

que es una relación recursiva: s_0 depende de s_1 , que a su vez depende de s_2 , y así sucesivamente, lo cual conduce a

$$s_0 = \frac{1}{u - a_0 - \frac{b_1^2}{u - a_1 - \frac{b_2^2}{u - a_2 - \frac{b_3^2}{\ddots}}}}, \quad (3.55)$$

que tiene la forma de una fracción continuada. Sustituyendo este resultado en la ec. (3.15) encontramos finalmente la proyección longitudinal de la inversa de la respuesta macroscópica

$$\hat{\mathbf{k}} \cdot \epsilon_M^{-1} \cdot \hat{\mathbf{k}} = \frac{u}{\epsilon_A} \frac{1}{u - a_0 - \frac{b_1^2}{u - a_1 - \frac{b_2^2}{u - a_2 - \frac{b_3^2}{\ddots}}}}. \quad (3.56)$$

Eligiendo suficientes direcciones distintas $\hat{\mathbf{k}}$ independientes entre si y repitiendo el procedimiento anterior, podemos obtener todas las componentes del tensor ϵ_M^{-1} y de ahí el tensor dieléctrico macroscópico ϵ_M del sistema en el límite de longitud de onda larga.

En la fracción (3.56) aparecen los coeficientes de Haydock, los cuales dependen exclusivamente de la *geometría del sistema*, caracterizada por la red de Bravais, su correspondiente red recíproca $\{\mathbf{G}\}$ y la función característica $B(\mathbf{r})$, y no dependen en absoluto de la composición del sistema ni de la frecuencia con que oscila el campo. También aparece la variable espectral u , la cual depende exclusivamente del cociente ϵ_A/ϵ_B entre las respuestas de las componentes del medio, y por lo tanto, depende de la composición del sistema y de la frecuencia. Esto implica que para una geometría de la red y de las inclusiones sólo es necesario calcular una vez los coeficientes de Haydock y con ellos se puede calcular la respuesta macroscópica de un sistema binario para cualquier pareja de materiales que lo conformen y para cualquier frecuencia simplemente sustituyendo el valor adecuado de la variable espectral en la ec. (3.56). La única condición que hemos impuesto es que la longitud de onda cumpla con la condición de ser de onda larga. Nuestro método de cálculo permite obtener los coeficientes de Haydock con un costo computacional bajo, pues no requerimos para ello realizar operaciones con matrices, y nos permite emplear dichos coeficientes para múltiples sistemas fabricados con materiales arbitrarios y para rangos amplios de frecuencia, sin tener que recalcular a_n ni b_n , economizando aún más el cálculo desde el punto de vista computacional. Estas son las principales ventajas de nuestro método [62, 81].

En el siguiente capítulo, generalizaremos la propuesta que hemos presentado para obtener la respuesta macroscópica de sistemas estructurados considerando el caso retardado, en el cual la longitud de onda es comparable con la escala de distancias d .

Capítulo 4

Respuesta macroscópica con retardamiento

4.1. Formalismo

En esta sección, generalizamos la propuesta del capítulo 3 para obtener la respuesta macroscópica de sistemas estructurados eliminando la suposición de onda larga, es decir, permitiendo que la longitud de onda de la luz sea comparable con la distancia d característica del sistema estructurado.

Basamos el planteamiento teórico de la respuesta macroscópica de un sistema estructurado en las ecuaciones de Maxwell. las cuales se pueden escribir para materiales no magnéticos y campos monocromáticos como

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = 4\pi\rho, \quad (4.1a)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0, \quad (4.1b)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = \frac{i\omega}{c}\mathbf{B}, \quad (4.1c)$$

$$\nabla \times \mathbf{B} = \frac{4\pi}{c}\mathbf{J} - \frac{i\omega}{c}\mathbf{D}, \quad (4.1d)$$

donde \mathbf{E} es el campo eléctrico, \mathbf{D} el desplazamiento eléctrico, \mathbf{B} el campo magnético, ρ y \mathbf{J} las densidades de carga y de corriente externas, ω la frecuencia y c la velocidad de la luz en el vacío. Las ecs. (4.1c) y (4.1d) muestran que los campos \mathbf{E} y \mathbf{B} están acoplados entre sí. El procedimiento usual para *desacoplar* matemáticamente el campo magnético del eléctrico es tomar el rotacional de la ec. (4.1c) y utilizar la ec. (4.1d) para obtener

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{E} = \frac{4\pi i\omega}{c^2}\mathbf{J} + \frac{\omega^2}{c^2}\mathbf{D}, \quad (4.2)$$

Usamos la ecuación constitutiva (2.9) para obtener

$$\left(\hat{\epsilon} - \frac{1}{q^2} \nabla \times \nabla \times \right) \mathbf{E} = \frac{4\pi}{i\omega} \mathbf{J}, \quad (4.3)$$

donde $q = \omega/c$ es el número de onda en el vacío. En la representación de la posición, la ec. (4.3) es en el caso más general una ecuación integro-diferencial pues $\hat{\epsilon}$ es en el caso más general un operador integral no local, ver sec. 2.1, ec. (2.7). Podemos escribir la ec. (4.3) como

$$\hat{\mathcal{W}} \mathbf{E} = \frac{4\pi}{i\omega} \mathbf{J}, \quad (4.4)$$

donde hemos definido al *operador de onda* como

$$\hat{\mathcal{W}} = \hat{\epsilon} - \frac{1}{q^2} \nabla \times \nabla \times = \hat{\epsilon} + \frac{1}{q^2} \nabla^2 \hat{\mathcal{P}}_T, \quad (4.5)$$

y donde hemos utilizado el proyector transversal ver sec. 2.3, ec. (2.20). Resolvemos la ec. (4.4) formalmente invirtiendo al operador de onda para obtener el campo eléctrico

$$\mathbf{E} = \frac{4\pi}{i\omega} \hat{\mathcal{W}}^{-1} \mathbf{J}. \quad (4.6)$$

Promediando la ecuación anterior obtenemos

$$\mathbf{E}_p = \frac{4\pi}{i\omega} \left(\hat{\mathcal{W}}_{pp}^{-1} \mathbf{J}_p + \hat{\mathcal{W}}_{pf}^{-1} \mathbf{J}_f \right). \quad (4.7)$$

Como \mathbf{J} es un campo externo, entonces *no tiene fluctuaciones espaciales* inducidas por la estructura del sistema. Por lo tanto $\mathbf{J}_f = \mathbf{0}$. Si esta fuente externa tuviera fluctuaciones, no tendría sentido físico hacer una formulación macroscópica. De este modo, \mathbf{J} es igual que su *proyección* promedio $\hat{\mathcal{P}}_p \mathbf{J} = \mathbf{J}_p = \mathbf{J}$, de manera que la ec. (4.7) es simplemente

$$\mathbf{E}_p = \frac{4\pi}{i\omega} \hat{\mathcal{W}}_{pp}^{-1} \mathbf{J}_p. \quad (4.8)$$

Siguiendo un procedimiento similar a partir de las ecuaciones de Maxwell macroscópicas llegaríamos a una ecuación similar que relaciona los campos macroscópicos \mathbf{E}^M y \mathbf{J}^M mediante

$$\mathbf{E}^M = \frac{4\pi}{i\omega} \hat{\mathcal{W}}_M^{-1} \mathbf{J}^M, \quad (4.9)$$

donde el operador de onda macroscópico es

$$\hat{\mathcal{W}}^M = \hat{\epsilon}^M + \frac{1}{q^2} \nabla^2 \hat{\mathcal{P}}_p \hat{\mathcal{P}}_T. \quad (4.10)$$

Comparando la ec. (4.8) con (4.10) e identificando los campos promedio con los campos macroscópicos, identificamos la relación entre el operador de onda macroscópica con el microscópico del sistema

$$\hat{\mathcal{W}}_M^{-1} = \hat{\mathcal{W}}_{pp}^{-1}. \quad (4.11)$$

El inverso del operador de onda macroscópico es el promedio del inverso del operador de onda microscópico. Este resultado también es un caso particular de un enunciado más general: *la respuesta macroscópica a una excitación externa es el promedio de la correspondiente respuesta microscópica*, como ya habíamos señalado al final de la sec. 3.1.

Resaltamos que obtuvimos el resultado en la ec. (4.11) sin haber realizado aproximación alguna. En el caso general, no despreciamos el cociente d/λ , es decir, permitimos que la luz recorra la distancia característica d en un tiempo d/c que pueda ser comparable con el periodo $\lambda/c = 2\pi/\omega$ de oscilación del campo electromagnético. Así, nuestro desarrollo va más allá de la aproximación cuasiestática e incorpora plenamente los efectos de retardo.

Para obtener $\hat{\epsilon}^M$, primero promediaremos el inverso del operador de onda microscópico, luego lo invertimos y finalmente extraemos la respuesta macroscópica usando la ec. (4.10). Ésta respuesta, proviniendo de inversos y promedios de operadores que involucran derivadas diferenciales y en el caso general también integrales, es en general un operador integral, el que además depende de la frecuencia ω debido a la presencia explícita de q en la ec. (4.5) y a su posible presencia implícita en la respuesta microscópica. Esto significa que $\hat{\epsilon}^M$ es una respuesta no-local dependiente de ω , es decir, muestra dispersión espacial además de dispersión temporal.

En la siguiente sección aplicaremos el resultado (4.11) para obtener la respuesta macroscópica de un sistema periódico, aunque debemos resaltar que la formulación de esta sección es válida para cualquier sistema con fluctuaciones espaciales.

En el apéndice A comparamos nuestra formulación compacta y general con la formulación de la respuesta macroscópica de sistemas estructurados propuesta por Mochán et al en [24, 25].

4.2. Sistema periódico de dos componentes

En esta sección aplicaremos la teoría desarrollada en la sec. 4.1 para calcular la respuesta macroscópica de un cristal artificial binario formado de inclusiones de cierto material colocado de manera periódica dentro de una matriz. Denotaremos con la letra B la región del espacio ocupada por las inclusiones y con A la ocupada por la matriz. Supondremos que ambos materiales son isotrópicos y locales caracterizados por funciones dieléctricas ϵ_A y ϵ_B , las cuales pueden depender de la frecuencia y en general están dadas por números complejos. Por el momento consideraremos a ϵ_A como una función real. No obstante, podemos relajar esta condición para el caso en que ambas

componentes del sistema tienen respuestas complejas. En el apéndice B mostramos esta generalización. El sistema es como el sistema que hemos descrito en la sec. 3.3 e ilustramos esquemáticamente en la figura 3.1, excepto que aquí no limitaremos el tamaño de las inclusiones ni el periodo de la red en que se colocan.

Empleando la función indicadora dada en la ec. (3.17) escribimos la respuesta microscópica del sistema como en la ec. (3.18), $\hat{\epsilon} = (\epsilon_A/u)(u - \hat{B})$ donde u es la variable espectral y \hat{B} es el operador correspondiente a multiplicar por la función indicadora $B(\mathbf{r})$ en la representación de la posición.

Ahora escribimos al operador de onda (4.5) como

$$\hat{\mathcal{W}} = \frac{\epsilon_A}{u} (u - \hat{B}) + \frac{1}{q^2} \nabla^2 \hat{\mathcal{P}}_T \quad (4.12a)$$

$$= \frac{\epsilon_A}{u} (u \hat{g}^{-1} - \hat{B}), \quad (4.12b)$$

donde hemos definido al operador

$$\hat{g} = \left(\hat{1} + \hat{\mathcal{P}}_T \frac{1}{q^2 \epsilon_A} \nabla^2 \right)^{-1}. \quad (4.13)$$

Tomando en cuenta que los términos longitudinales y transversales de la ec. (4.13) no se acoplan entre sí, podemos invertir sus coeficientes independientemente para obtener

$$\hat{g} = \hat{\mathcal{P}}^L + \left(1 + \frac{\nabla^2}{q^2 \epsilon_A} \right)^{-1} \hat{\mathcal{P}}^T. \quad (4.14)$$

Más adelante mostraremos que \hat{g} se puede interpretar como una *métrica*.

De acuerdo al procedimiento desarrollado en la sección 4.1, invertimos el operador de onda microscópico (4.13)

$$\hat{\mathcal{W}}^{-1} = \frac{u}{\epsilon_A} \hat{g} (u - \hat{B} \hat{g})^{-1}, \quad (4.15)$$

y lo promediamos

$$\hat{\mathcal{W}}_{pp}^{-1} = \frac{u}{\epsilon_A} \hat{g}_{pp} (u - \hat{B} \hat{g})_{pp}^{-1}, \quad (4.16)$$

donde hemos hecho una simplificación notando que \hat{g} no acopla campos promedio con campos fluctuantes al no tener dependencia en la geometría del cristal.

Continuamos con el procedimiento indicado en la ec. (4.16) y nos enfocamos en obtener

$$(u - \hat{B} \hat{g})_{pp}^{-1}. \quad (4.17)$$

En la siguiente sección mostraremos cómo hallar el promedio (4.17) mediante un método recursivo que evita operaciones con matrices grandes. El esquema es una generalización del procedimiento que mostramos en la sec. 3.4.

4.3. Método recursivo: caso con retardamiento

Notamos que la expresión (4.17) tiene una estructura similar a la que aparece en la ec. (3.21), la cual mostramos en la sec. 3.4 que es análoga a una función de Green proyectada, ec. (3.22), lo cual nos permitió desarrollar en la sec. 3.4 un esquema recursivo de cálculo eficiente. Sin embargo, existe una diferencia importante entre las ecs. (4.17) y (3.21) debida a la presencia en la primera de ellas del término \hat{g} . Para incorporarlo, necesitamos modificar el esquema recursivo previo.

En el límite de onda larga habíamos tomado como hamiltoniano la proyección longitudinal $B_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}^{LL}$ de la función indicadora (3.17), la cual es una matriz hermitiana, i.e., $(B_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}^{LL})^\dagger = B_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}^{LL}$, donde M^\dagger denota la matriz adjunta (transpuesta conjugada) de una matriz M . Notamos que $((B\mathbf{g})_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}^\dagger) \neq (B\mathbf{g})_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}$. Sin embargo, interpretando a \hat{g} como una *métrica*, podemos generalizar la definición de adjunto de tal manera que $\hat{B}\hat{g}$ se convierta en un operador hermitiano.

4.3.1. Método recursivo con una métrica

Interpretando a \hat{g} como métrica, el producto interno entre dos estados es ahora

$$(\phi|\psi) \equiv \langle \phi|\hat{g}|\psi \rangle, \quad (4.18)$$

en lugar de simplemente $\langle \phi|\psi \rangle$, aunque tenemos que advertir que \hat{g} , tal y como lo definimos en la ec. (4.14), *no* es una métrica *positiva definida*.

Para un operador arbitrario \hat{O} definimos su operador adjunto \hat{O}^\dagger como aquel que satisface [76, 82]

$$(\psi|\hat{O}^\dagger|\phi) \equiv (\phi|\hat{O}|\psi)^*, \quad \langle \psi|\hat{g}\hat{O}^\dagger|\phi \rangle \equiv \langle \phi|\hat{g}\hat{O}|\psi \rangle^*, \quad (4.19)$$

donde z^* denota el conjugado de cualquier número complejo z . Con esta definición podemos demostrar que nuestro operador $\hat{B}\hat{g}$ es hermitiano

$$\langle \psi|\hat{g}(\hat{B}\hat{g}|\phi) \rangle = [\langle \phi|\hat{g}(\hat{B}\hat{g}|\psi) \rangle]^*, \quad (4.20)$$

pues $(\hat{g}\hat{B}\hat{g})^\dagger = \hat{g}^\dagger\hat{B}^\dagger\hat{g}^\dagger = \hat{g}\hat{B}\hat{g}$ bajo la definición original de operador adjunto.

De acuerdo a la ec. (4.17) y empleando el proyector promedio definido en la ec. (3.8), necesitamos encontrar la proyección $(u - \hat{B}\hat{g})_{pp}^{-1} = \langle p|(u - \hat{B}\hat{g})^{-1}|p \rangle$ sobre un estado $|p\rangle$ correspondiente a una onda plana de frecuencia ω , vector de onda \mathbf{k} y cierta polarización \mathbf{e} ,

$$|p\rangle \equiv |\omega, \mathbf{k}; \mathbf{e}\rangle \equiv b_0|0\rangle, \quad (4.21)$$

y normalizado de la manera usual $\langle p|p\rangle = 1$. Iniciaremos nuestro desarrollo recursivo definiendo un estado inicial $|0\rangle = b_0^{-1}|p\rangle$, normalizado bajo la métrica \hat{g} mediante

$\langle 0|\hat{g}|0\rangle = g_0 = \pm 1$. El signo queda determinado por el signo de $\langle 0|\hat{g}|0\rangle$. En general, podemos escoger b_0 como un número real positivo.

Aplicamos el operador $\hat{B}\hat{g}$ a $|0\rangle$ para obtener un estado

$$|\widetilde{1}\rangle \equiv \hat{B}\hat{g}|0\rangle = b_1|1\rangle + a_0|0\rangle, \quad (4.22)$$

el cual escribimos como una combinación lineal de nuestro estado inicial $|0\rangle$ y un nuevo estado $|1\rangle$, al cual exigimos sea ortogonal a $|0\rangle$ bajo la métrica \hat{g}

$$\langle 1|\hat{g}|0\rangle = 0. \quad (4.23)$$

Multiplicando la ec. (4.22) por el bra $\langle 0|\hat{g}$ y usando la condición (4.23) hallamos el coeficiente

$$a_0 = g_0\langle 0|\hat{g}\hat{B}\hat{g}|0\rangle. \quad (4.24)$$

Multiplicando la ec. (4.22) por el bra $\langle \widetilde{1}|\hat{g}$ obtenemos

$$|b_1|^2 = g_1(\langle \widetilde{1}|\hat{g}|\widetilde{1}\rangle - g_0a_0^2), \quad (4.25)$$

donde introducimos la condición de normalización $\langle 1|\hat{g}|1\rangle = g_1 = \pm 1$ y escogemos el signo de g_1 de manera que $|b_1|^2$ sea positivo. De aquí obtenemos b_1 , el cual escogemos como un número real positivo.

A partir de los coeficientes a_0 y b_1 podemos determinar el nuevo estado como

$$|1\rangle = \frac{|\widetilde{1}\rangle - a_0|0\rangle}{b_1}. \quad (4.26)$$

Iteramos un procedimiento similar al anterior en el cual, en cada paso construimos un estado nuevo a partir de los estados anteriores. Para la iteración $n + 1$ usamos la relación

$$|\widetilde{n+1}\rangle \equiv \hat{B}\hat{g}|n\rangle = b_{n+1}|n+1\rangle + a_n|n\rangle + c_n|n-1\rangle \quad (4.27)$$

donde $|\widetilde{n+1}\rangle$ es un estado auxiliar, $|n+1\rangle$ es el estado nuevo a determinar a partir de la condición de ortonormalidad bajo la métrica \hat{g} ,

$$\langle n+1|\hat{g}|m\rangle = g_{n+1}\delta_{n+1,m}, \quad (4.28)$$

con $g_{n+1} = \pm 1$ y donde $m \leq n + 1$. Esta condición determina los *coeficientes generalizados de Haydock* a_n , b_{n+1} , c_n y g_{n+1} como mostraremos a continuación.

Multiplicando la ec. (4.27) a la izquierda por $\langle n|\hat{g}$ y usando la ortonormalidad (4.28), obtenemos

$$a_n = g_n\langle n|\hat{g}\hat{B}\hat{g}|n\rangle. \quad (4.29)$$

Similarmente, multiplicando por $\langle \widetilde{n+1}|\hat{g}$ obtenemos

$$b_{n+1}^2 = g_{n+1}(\langle \widetilde{n+1}|\hat{g}|\widetilde{n+1}\rangle - g_n a_n^2 - g_{n-1} b_n^2) \quad (4.30)$$

de donde obtenemos el signo g_{n+1} y el coeficiente real positivo b_{n+1} .

Multiplicando la ec. (4.27) a la izquierda por $\langle n-1|\hat{g}$ y usamos la ortonormalidad (4.28), obtenemos

$$c_n = g_{n-1}\langle n-1|\hat{g}\hat{B}\hat{g}|n\rangle = g_{n-1}\langle n|\hat{g}\hat{B}\hat{g}|n-1\rangle^* = g_n g_{n-1} b_n, \quad (4.31)$$

donde también empleamos la ec. (4.20) y una iteración previa de la ec. (4.27). Por lo tanto, podemos eliminar c_n de la ec. (4.27),

$$|\widetilde{n+1}\rangle \equiv \hat{B}\hat{g}|n\rangle = b_{n+1}|n+1\rangle + a_n|n\rangle + g_n g_{n-1} b_n|n-1\rangle. \quad (4.32)$$

Una vez determinados los coeficientes correspondientes a este paso de la iteración, obtenemos el estado nuevo

$$|n+1\rangle = \frac{|\widetilde{n+1}\rangle - a_n|n\rangle - b_n g_n g_{n-1}|n-1\rangle}{b_{n+1}}. \quad (4.33)$$

Iterando las ecuaciones (4.29), (4.30), (4.33), construimos la base $\{|n\rangle\}$, en la cual representamos al operador $(u - \hat{B}\hat{g})$ mediante una matriz tridiagonal de la forma

$$(u - \hat{B}\hat{g}) \rightarrow \begin{pmatrix} u - a_0 & -b_1 g_1 g_0 & 0 & 0 & \cdots \\ -b_1 & u - a_1 & -b_2 g_2 g_1 & 0 & \cdots \\ 0 & -b_2 & u - a_2 & -b_3 g_3 g_2 & \cdots \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \ddots \end{pmatrix}. \quad (4.34)$$

Así como demostramos que $\hat{B}\hat{g}$ es un operador hermitiano bajo la métrica \hat{g} , podemos demostrar que el lado derecho de la ec. (4.34) es una matriz hermitiana, aunque sus entradas reales no sean iguales a los de su matriz transpuesta ordinaria.

4.3.2. Implementación

Usemos ahora la representación en el espacio recíproco y las expresiones explícitas para los operadores que introdujimos en la sec. 3.3. Por ejemplo, escribimos el proyector transversal como

$$\mathcal{P}_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}^T = \delta_{\mathbf{G}\mathbf{G}'} \left(\mathbf{1} - \frac{\mathbf{k} + \mathbf{G}}{|\mathbf{k} + \mathbf{G}|} \frac{\mathbf{k} + \mathbf{G}'}{|\mathbf{k} + \mathbf{G}'|} \right), \quad (4.35)$$

donde usamos la ec. (2.20) y usamos al proyector longitudinal de (3.9). El Laplaciano en esta representación es

$$\nabla^2 = -|\mathbf{k} + \mathbf{G}|^2 \delta_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}, \quad (4.36)$$

y el proyector promedio queda dado por la ec. (3.8), es decir, $\mathcal{P}_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}^p = \delta_{\mathbf{G}\mathbf{0}} \delta_{\mathbf{G}'\mathbf{0}}$, de forma que el campo macroscópico así definido mantenga exclusivamente la componente con vector recíproco nulo.

Usando la representación en el espacio recíproco de los operadores $\hat{\mathcal{P}}_L$, $\hat{\mathcal{P}}_T$ y ∇^2 , ecs. (3.9), (4.35) y (4.36), respectivamente, escribimos

$$g_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}^{ij} = \delta_{\mathbf{G}\mathbf{G}'} \frac{\epsilon_A q^2 \delta_{ij} - (k_i + G_i)(k_j + G_j)}{\epsilon_A q^2 - (\mathbf{k} + \mathbf{G})^2} \quad (4.37)$$

donde i, j son índices cartesianos.

Para emplear nuestro esquema modificado de iteración al cálculo de la respuesta macroscópica, conviene representar a un estado cualquiera $|a\rangle$ a través de un campo vectorial con componentes $\varphi_a^i(\mathbf{r}) \equiv \langle \mathbf{r}i|a\rangle$, donde $|\mathbf{r}i\rangle$ corresponde a un estado con posición \mathbf{r} bien definida y polarizado en la dirección cartesiana i . Similarmente, podemos representar al mismo estado en el espacio recíproco mediante $\varphi_a^i(\mathbf{G}) \equiv \langle \mathbf{G}i|a\rangle$, donde $|\mathbf{G}i\rangle$ corresponde a una onda plana con vector de onda $\mathbf{k} + \mathbf{G}$ y polarizada en la dirección i . Así, cada uno de los estados $|n\rangle$ obtenidos en la subsección 4.3.1 puede representarse por

$$\varphi_n^i(\mathbf{G}) \equiv \langle \mathbf{G}i|n\rangle. \quad (4.38)$$

Aplicamos el operador \hat{g} al estado (4.38) para obtener la función vectorial

$$\phi_n^i(\mathbf{G}) \equiv \langle \mathbf{G}i|\hat{g}|n\rangle = g_{\mathbf{G}\mathbf{G}}^{ij} \varphi_n^j(\mathbf{G}), \quad (4.39)$$

donde hay una suma implícita sobre el índice cartesiano j y donde aprovechamos el hecho de que \hat{g} no acopla vectores de onda recíprocos distintos. Tomamos la transformada de Fourier inversa de esta expresión para representar el resultado en el espacio real como $\phi_n^i(\mathbf{r})$, y la multiplicamos por la función indicadora $B(\mathbf{r})$ para obtener

$$\phi_{n+1}^i(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r}i|\widetilde{n+1}\rangle = B(\mathbf{r})\phi_n^i(\mathbf{r}), \quad (4.40)$$

que transformada al espacio recíproco nos da $\phi_{n+1}^i(\mathbf{G}) = \langle \mathbf{G}i|\widetilde{n+1}\rangle$. Con esta función auxiliar podemos hallar el coeficiente (4.29) de Haydock,

$$a_n = g_n \sum_{\mathbf{G},i} \langle n|\hat{g}|\mathbf{G}i\rangle \langle \mathbf{G}i|B\hat{g}|n\rangle = g_n \sum_{\mathbf{G},i} \phi_n^{i*}(\mathbf{G}) \phi_{n+1}^i(\mathbf{G}), \quad (4.41)$$

donde empleamos la completez de los estados de onda plana $\sum_{\mathbf{G},i} |\mathbf{G}i\rangle \langle \mathbf{G}i| = 1$. De acuerdo a la ec. (4.30), podemos obtener el coeficiente b_{n+1} a partir del producto

$$\langle \widetilde{n+1}|\hat{g}|\widetilde{n+1}\rangle = \sum_{\mathbf{G},\mathbf{G}',i,j} \langle \widetilde{n+1}|\mathbf{G}i\rangle \langle \mathbf{G}i|\hat{g}|\mathbf{G}'j\rangle \langle \mathbf{G}'j|\widetilde{n+1}\rangle \quad (4.42)$$

$$= \sum_{\mathbf{G},i,j} \phi_{n+1}^{i*}(\mathbf{G}) g_{\mathbf{G}\mathbf{G}}^{ij} \phi_{n+1}^j(\mathbf{G}), \quad (4.43)$$

donde usamos la ec. (4.37). Usando la ec. (4.33) obtenemos el nuevo estado $|n+1\rangle$ en la representación del espacio recíproco,

$$\phi_{n+1}^i(\mathbf{G}) = \frac{\phi_{n+1}^i(\mathbf{G}) - a_n \phi_n^i(\mathbf{G}) - b_n g_n g_{n-1} \phi_{n-1}^i(\mathbf{G})}{b_{n+1}}. \quad (4.44)$$

Iterando las ecs. (4.38)-(4.44) podemos obtener todos los coeficientes de Haydock y todas las funciones $\phi_n^i(\mathbf{G})$ a partir de nuestro estado inicial, representado por la función vectorial

$$\phi_0^i(\mathbf{G}) = \frac{1}{b_0} \delta_{\mathbf{G}0} e_i, \quad (4.45)$$

donde introducimos las componentes e_i del vector de polarización escogido \mathbf{e} (ver ec. (4.21)).

El procedimiento detallado arriba es muy conveniente para ser implementado numéricamente, ya que requiere únicamente multiplicaciones por funciones de \mathbf{G} , transformadas rápidas de Fourier directas e inversas y multiplicaciones por funciones de \mathbf{r} , operaciones que son económicas en cuanto a recursos de cómputo. Debemos enfatizar que este método recursivo no requiere almacenar ni realizar operaciones con matrices densas [60], sino que sólo requiere operaciones con matrices que son diagonales ya sea en el espacio recíproco o en el espacio real, los cuales están conectados entre sí mediante transformaciones de Fourier.

Para obtener el inverso del operador de onda macroscópico, según la ec. (4.16), no es necesario invertir la matriz tridiagonal 4.34 completa, sino que requerimos únicamente el elemento en la primera fila y en la primera columna. Dicho elemento se obtiene de manera directa, como se hizo al final de la sec. 3.4 y se puede expresar como una fracción continuada, la cual sustituimos en la ec. (4.16) para obtener la proyección del operador de onda macroscópico inverso

$$\mathbf{e} \cdot \mathcal{W}_M^{-1} \cdot \mathbf{e} = \sum_{ij} e^i (\mathcal{W}_M^{-1})_{ij} e^j = \frac{u}{\epsilon_A} \frac{u - a_0 - \frac{g_0 b_0^2}{u - a_1 - \frac{g_0 g_1 b_1^2}{u - a_2 - \frac{g_1 g_2 b_2^2}{u - a_3 - \frac{g_2 g_3 b_3^2}{\ddots}}}}}{u - a_0 - \frac{g_0 b_0^2}{u - a_1 - \frac{g_0 g_1 b_1^2}{u - a_2 - \frac{g_1 g_2 b_2^2}{u - a_3 - \frac{g_2 g_3 b_3^2}{\ddots}}}}} \quad (4.46)$$

sobre el estado promedio (4.21), caracterizado por su vector de onda \mathbf{k} , su frecuencia ω y su polarización \mathbf{e} . Para cada valor de \mathbf{k} y ω , el operador de onda macroscópico inverso es un tensor con componentes cartesianas $(\mathcal{W}_M^{-1})_{ij}$. En la ec. (4.46) no hallamos todas las componentes de este tensor, sino únicamente su proyección sobre la dirección de polarización \mathbf{e} del estado elegido como inicial. Esta elección fue arbitraria, de forma que podemos repetir todo el procedimiento para otras direcciones, obteniendo así otras proyecciones. Haciendo esto para suficientes vectores \mathbf{e} independientes tendremos suficientes proyecciones $\mathbf{e} \cdot \mathcal{W}_M^{-1} \cdot \mathbf{e}$ para resolver todas las componentes $(\mathcal{W}_M^{-1})_{ij}$ del operador de onda macroscópico inverso \mathcal{W}_M^{-1} . Mediante una simple inversión cartesiana obtenemos el operador de onda macroscópico \mathcal{W}^M con componentes $(\mathcal{W}^M)_{ij}$. Debemos enfatizar que dicho operador puede ser un tensor anisotrópico aun cuando la respuesta microscópica de la que partimos haya sido isotrópica. Finalmente, usamos la ec. (4.10) para obtener el tensor dieléctrico macroscópico

$$\epsilon^M(\omega, \mathbf{k}) = \frac{1}{q^2} (k^2 \mathbf{1} - \mathbf{k}\mathbf{k}) + \mathcal{W}^M(\omega, \mathbf{k}), \quad (4.47)$$

con componentes cartesianas

$$\epsilon_{ij}^M(\omega, \mathbf{k}) = \frac{1}{q^2}(k^2\delta_{ij} - k_i k_j) + \mathcal{W}_{ij}^M(\omega, \mathbf{k}), \quad (4.48)$$

donde $i, j = x, y, z$.

Hacemos notar que en general el tensor dieléctrico dependerá tanto de ω como de \mathbf{k} , esto es, la respuesta macroscópica muestra en general dispersión temporal y espacial.

En el siguiente capítulo, obtendremos la respuesta macroscópica de un sistema unidimensional. Deduciremos la respuesta macroscópica y presentaremos resultados que muestran la dependencia en la frecuencia y el vector de onda de dicha función. Además, mostraremos cómo del esquema macroscópico se puede hallar la estructura completa de bandas del sistema.

Capítulo 5

Sistema unidimensional

En el capítulo anterior obtuvimos una expresión para la respuesta dieléctrica macroscópica de un material estructurado en presencia de retardamiento, la cual se puede implementar numéricamente mediante un algoritmo recursivo eficiente. Para poner a prueba dicho procedimiento, es conveniente contar con un sistema cuya respuesta macroscópica pueda obtenerse de una manera muy sencilla y que nos permita poner a prueba nuestros resultados numéricos, además de sugerir el tipo de aplicaciones que podemos dar a nuestros resultados y los límites de validez de aproximaciones subsecuentes. Con tal propósito, en este capítulo estudiaremos un sistema con periodicidad en una dimensión, que por sencillez en la escritura le llamaremos sistema unidimensionales y obtendremos una expresión analítica cerrada para su respuesta macroscópica. Ilustraremos la dispersión temporal y espacial que surge como consecuencia del retardamiento y mostraremos cómo del esquema macroscópico se puede hallar la estructura completa de bandas del sistema. Compararemos estos resultados analíticos con los obtenidos de la aplicación del método recursivo desarrollado en el capítulo previo y discutiremos el reemplazo de nuestro sistema dieléctrico no-local por un sistema local pero que tiene una respuesta magnética.

5.1. Cálculo analítico

Tomemos el caso mas simple de un medio estructurado: una red periódica unidimensional, invariante a lo largo de las direcciones cartesianas x y y , formada por un material A , que ocupa la región $0 \leq z \leq L_A$ y un material B , que ocupa la región $L_A \leq z \leq L$ de tamaño L_B formando una celda unitaria que se repite periódicamente en la dirección z con periodo $L = L_A + L_B$, como ilustramos en la figura 5.1. Supondremos que cada uno de estos materiales es no-magnético y tiene una respuesta dieléctrica bien definida ϵ_A y ϵ_B . Sus fracciones de llenado son $f_A = L_A/L$, $f_B = L_B/L$.

Consideremos una corriente externa \mathbf{J} dirigida en la dirección x y que se propaga como onda plana armónica en la dirección z con vector de onda \mathbf{k} , como ilustramos en

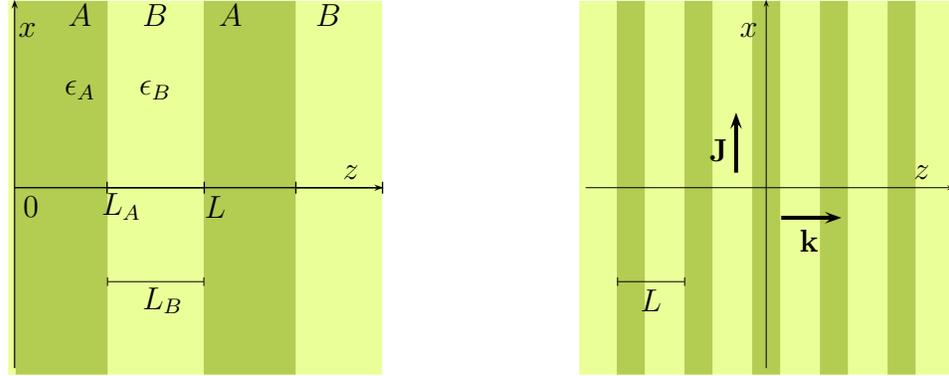


Figura 5.1: Panel izquierdo: Sistema en una dimensión que consiste en películas de cierto material con respuesta dieléctrica ϵ_A y ancho L_A alternadas periódicamente con películas de otro medio con respuesta dieléctrica ϵ_B y ancho L_B . Se muestran las coordenadas de algunas interfaces y el periodo L de la red. Panel derecho: Se muestra la estructura y el sistema coordenado, así como la corriente externa \mathbf{J} y su vector de onda \mathbf{k} .

el lado derecho de la figura 5.1. Nuestro objetivo es encontrar la respuesta del sistema a esta corriente.

Podemos hallar el campo eléctrico microscópico producido por esta corriente resolviendo la ecuación de onda con fuentes en cada una de las regiones y exigiendo que la solución obtenida cumpla con las condiciones de contorno correspondientes a cada una de las interfaces, además de ser una onda de Bloch con vector de Bloch \mathbf{k} . Una vez conocido el campo microscópico, podemos extraer de él la componente macroscópica para finalmente obtener la respuesta macroscópica del sistema.

Escribimos la dependencia espacial de la componente x de la corriente externa como $J(z) = J_0 e^{ikz}$, con J_0 la amplitud. La ecuación de onda inhomogénea (4.3) en una dimensión para la componente x del campo eléctrico E^α en la región $\alpha = A, B$ es simplemente

$$\left(\epsilon_\alpha + \frac{1}{q^2} \frac{d^2}{dz^2} \right) E^\alpha(z) = \frac{4\pi}{i\omega} J_0 e^{ikz}, \quad (5.1)$$

con $q = \omega/c$ y ω la frecuencia. La solución general de la ec. (5.1) es la superposición de una solución particular de la ecuación inhomogénea (5.1) y la solución general de la correspondiente ecuación de onda homogénea. Entonces, el campo eléctrico microscópico en las dos regiones contenidas en el intervalo $0 \leq z \leq L$ está dado por

$$E^\alpha(z) = E_0^\alpha e^{ikz} + E_D^\alpha e^{ik_\alpha z} + E_I^\alpha e^{-ik_\alpha z}, \quad (5.2)$$

donde hemos introducido el vector de onda libre en la región α ,

$$k_\alpha^2 = \epsilon_\alpha q^2, \quad (5.3)$$

y donde E_β^α con $\beta = D, I$ son cuatro coeficientes por determinar correspondiendo a ondas libres que corren hacia la derecha (D) o hacia la izquierda (I) en el medio α . El coeficiente E_0^α corresponde a una onda forzada que se propaga con el mismo vector de onda \mathbf{k} que la corriente externa, y se puede obtener sustituyendo la ec. (5.2) en (5.1),

$$E_0^\alpha = \frac{4\pi\omega J_0}{ic^2(k_\alpha^2 - k^2)}. \quad (5.4)$$

De manera análoga, podemos escribir la componente y del campo magnético microscópico $B^\alpha(z)$ dentro del medio α y expresarla en términos de los coeficientes del campo eléctrico mediante la ley de Faraday (4.1c),

$$B^\alpha(z) = E_0^\alpha \left(\frac{kc}{\omega} \right) e^{ikz} + \left(\frac{k_\alpha c}{\omega} \right) E_D^\alpha e^{ik_\alpha z} - \left(\frac{k_\alpha c}{\omega} \right) E_I^\alpha e^{-ik_\alpha z}. \quad (5.5)$$

Ésta es la única componente no nula. Las condiciones de continuidad para la componente tangencial del campo eléctrico y del campo magnético en las fronteras $z = L_A$ y L están dadas por los límites

$$E^A(z \rightarrow L_A^-) = E^B(z \rightarrow L_A^+), \quad (5.6a)$$

$$B^A(z \rightarrow L_A^-) = B^B(z \rightarrow L_A^+), \quad (5.6b)$$

$$E^A(z \rightarrow L^+) = E^B(z \rightarrow L^-), \quad (5.6c)$$

$$B^A(z \rightarrow L^+) = B^B(z \rightarrow L^-), \quad (5.6d)$$

donde los superíndices \pm indican si nos acercamos a la superficie por la derecha (+) o por la izquierda (-). Notamos que las ecs. (5.2) describen al campo únicamente en el intervalo $0 \leq z \leq L$, por lo cual no podemos emplearla en el lado derecho de las ecs. (5.6c) y (5.6d). Sin embargo, el teorema de Bloch nos dice que al avanzar un periodo L hacia la derecha, todos los campos adquieren simplemente una fase,

$$E^A(z \rightarrow L^+) = E^A(z \rightarrow 0^+)e^{ikL}, \quad (5.7a)$$

$$B^A(z \rightarrow L^+) = B^B(z \rightarrow 0^+)e^{ikL}. \quad (5.7b)$$

lo cual nos permite cerrar el sistema de ecuaciones (5.6a)-(5.6d). Sustituyendo en ellas la ec. (5.2), las expresamos como cuatro ecuaciones inhomogéneas acopladas con cuatro incógnitas, las cuales escribimos como

$$\begin{pmatrix} e^{ik_ALA} & -e^{ik_BLA} & e^{-ik_ALA} & -e^{-ik_BLA} \\ k_A e^{ik_ALA} & -k_B e^{ik_BLA} & -k_A e^{-ik_ALA} & +k_B e^{-ik_BLA} \\ 1 & -e^{i(k_B-k)L} & 1 & -e^{-i(k_B+k)L} \\ k_A & -k_B e^{i(k_B-k)L} & -k_A & k_B e^{-i(k_B+k)L} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_D^A \\ E_D^B \\ E_I^A \\ E_I^B \end{pmatrix} = \Delta E_0 \begin{pmatrix} e^{ik_ALA} \\ k e^{ik_ALA} \\ 1 \\ k \end{pmatrix} \quad (5.8)$$

donde $\Delta E_0 = E_0^B - E_0^A$.

Siendo una onda de Bloch, el campo eléctrico no es una función periódica en z , pero $E(z)e^{-ikz}$ sí lo es. Entonces podemos expandir esta función como una serie de Fourier [83] cuyos coeficientes son

$$E_G = \frac{1}{L} \int_0^L E(z) e^{-i(k+G)z} dz. \quad (5.9)$$

Identificamos el campo eléctrico macroscópico como el término $G = 0$ de dicha serie de Fourier, $E^M(z) \equiv E_{G=0} e^{ikz}$. De la relación macroscópica (4.9) tenemos que

$$E^M(z) = \frac{4\pi}{i\omega} \mathcal{W}_M^{-1} J^M(z), \quad (5.10)$$

donde podemos identificar $J^M(z) = J(z)$. Escribiendo al operador de onda macroscópico como $\mathcal{W}^M = \epsilon^M(\omega, k) - (kc/\omega)^2$ (ec. (4.5)), podemos identificar la *respuesta dieléctrica macroscópica transversal*

$$\begin{aligned} \epsilon^M(\omega, k) = (kc/\omega)^2 + \frac{4\pi J_0 L}{i\omega} / (L_A E_0^A + L_B E_0^B & \\ + E_D^A L_A \text{sinc}((k_A - k)L_A/2) e^{i(k_A - k)L_A/2} & \\ + E_I^A L_A \text{sinc}((k_A + k)L_A/2) e^{-i(k_A + k)L_A/2} & \quad (5.11) \\ + E_D^B L_B \text{sinc}((k_B - k)L_B/2) e^{i(k_B - k)L_B/2} & \\ + E_I^B L_B \text{sinc}((k_B + k)L_B/2) e^{-i(k_B + k)L_B/2}), & \end{aligned}$$

donde $\text{sinc}(x) \equiv \sin(x)/x$. Lo único que resta es sustituir en la ec. (5.11) los coeficientes E_0^α dados por la ec. (5.4) y los coeficientes E_β^α dados por la solución de la ec. (5.8).

El resultado (5.11) para la función macroscópica es exacto en el sentido que no se ha realizado ninguna aproximación para obtenerlo y es analítico al estar en términos de funciones analíticas y de la solución de un sistema de ecuaciones pequeño que puede resolverse explícitamente, aunque las expresiones resultantes sean tediosas. La respuesta macroscópica (5.11) es explícitamente una función del vector de onda k además de ser una función de la frecuencia ω . Debemos notar que las amplitudes $E_\beta^\alpha(z)$ dependen también de k y ω .

5.2. Ejemplo

En esta sección, estudiamos como ejemplo a un sistema periódico unidimensional hecho con materiales transparentes no dispersivos, cuyas constantes dieléctricas elegimos como $\epsilon_A = 1$ y $\epsilon_B = 12$, y con fracciones de llenado iguales $f_A = f_B = 0.5$. Obtenemos $\epsilon^M(\omega, k)$ simplemente sustituyendo los valores anteriores en la ec. (5.11).

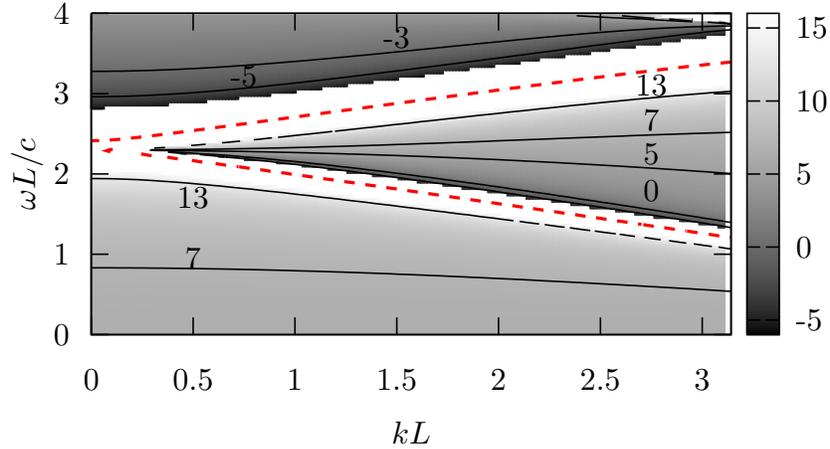


Figura 5.2: Respuesta dieléctrica macroscópica $\epsilon^M(\omega, k)$ del sistema periódico unidimensional mostrado en la figura 5.1 con $\epsilon_A = 1$, $\epsilon_B = 12$ y $f_A = f_B = 0.5$ como función de la frecuencia normalizada $\omega L/c$ y del vector de onda normalizado kL . Se muestran algunos contornos a lo largo de los cuales ϵ^M es constante (líneas sólidas) y las posiciones de los polos (líneas a trazos). Las regiones blancas corresponden a valores fuera del rango $\sim (-5, 15)$ elegido para obtener un contraste adecuado en la representación mediante tonos de grises.

En la fig. 5.2 mostramos el resultado, el cual ilustra explícitamente la dispersión temporal de ϵ^M , i.e., su dependencia en ω , y su dispersión espacial o no localidad. Dado que en este ejemplo los materiales son no dispersivos, la dispersión temporal y espacial de la respuesta macroscópica surge como consecuencia del retardamiento únicamente. La función $\epsilon^M(\omega, k)$ muestra una serie de polos simples, algunos de los cuales convergen entre sí cuando $k \rightarrow 0$. La presencia de singularidades en la respuesta en este caso está ligada a resonancias en las reflexiones múltiples en cada película y en cada periodo del material, análogas a las resonancias de Fabry-Perot [84] y aparecen a frecuencias relativamente grandes, en las que la frecuencia ω y/o el número de onda k son del orden de la frecuencia natural c/L que caracteriza la propagación de la luz en un periodo del sistema. Por ejemplo, esperaríamos estructuras en la respuesta dieléctrica cuando el camino óptico asociado a recorrer un periodo, $\Lambda = L_a\sqrt{\epsilon_A} + L_b\sqrt{\epsilon_B}$ se un múltiplo de la longitud de onda libre $\lambda_0 = 2\pi c/\omega$, condición que podemos escribir como $\omega L/c \approx 2\pi/(f_A\sqrt{\epsilon_A} + f_B\sqrt{\epsilon_B}) \approx 2.8$, que coincide aproximadamente con los polos en la fig. 5.2.

En los polos, el operador de onda \mathcal{W}_M diverge y de la ec. (5.10) concluimos que el campo eléctrico macroscópico se anula aún en presencia de una corriente externa no nula.

Por otro lado, en el límite estático ($\omega \ll c/L$) y para longitud de onda larga ($k \rightarrow 0$) la respuesta macroscópica transversal del sistema es el promedio simple de las constantes

dieléctricas, $\epsilon^M(\omega, 0) = \epsilon^M(0, 0) = f_A \epsilon_A + f_B \epsilon_B$ [55], debido a que las componentes del campo eléctrico tangenciales a cada superficies son continuas al atravesar cada una y a que en este límite el campo es constante dentro de cada película. Para nuestro ejemplo $\epsilon^M(0, 0) = 6.5$. Hemos verificado que nuestro cálculo toma este valor en el origen. Más aún, nuestro cálculo muestra que en el límite estático $\epsilon^M(\omega, k) = \epsilon^M(\omega, 0)$ *independientemente* de k , y por lo tanto está dado simplemente por el promedio de las respuestas de las componentes pesadas por sus correspondientes fracciones de llenado, siempre y cuando $qL \ll 1$. Podemos entender este comportamiento de la siguiente manera: Empezamos por escribir al operador de onda en bloques de la forma

$$\hat{\mathcal{W}} = \begin{pmatrix} \hat{\mathcal{W}}_{pp} & \hat{\mathcal{W}}_{pf} \\ \hat{\mathcal{W}}_{fp} & \hat{\mathcal{W}}_{ff} \end{pmatrix}. \quad (5.12)$$

De la identidad $\hat{\mathcal{W}}^{-1}\hat{\mathcal{W}} = \hat{1}$ es fácil obtener el elemento pp de la inversa

$$\hat{\mathcal{W}}_M^{-1} = (\hat{\mathcal{W}}^{-1})_{pp} = (\hat{\mathcal{W}}_{pp} - \hat{\mathcal{W}}_{pf}(\hat{\mathcal{W}}_{ff})^{-1}\hat{\mathcal{W}}_{fp})^{-1}, \quad (5.13)$$

donde debemos cuidar el orden en que realizamos las proyecciones y las inversiones. Usando la definición (4.5) y representando los operadores en el espacio recíproco,

$$\frac{1}{\epsilon^M(\omega, k) - \frac{k^2}{q^2}} = \left(\epsilon_{00} - \frac{k^2}{q^2} - \sum'_{GG'} \epsilon_{0G} (\tilde{\mathcal{W}}^{-1})_{GG'} \epsilon_{G'0} \right)^{-1}, \quad (5.14)$$

donde $\tilde{\mathcal{W}}_{GG'}$ es la matriz que obtenemos a partir de $\mathcal{W}_{GG'}$ eliminando el renglón $G = 0$ y la columna $G' = 0$, i.e., dejando únicamente los términos fluctuantes. A partir de su definición, escribimos

$$\tilde{\mathcal{W}}_{GG'} = \epsilon_{GG'} - \frac{(k+G)^2}{q^2} \delta_{GG'} \approx -\frac{(k+G)^2}{q^2} \delta_{GG'}, \quad G, G' \neq 0, \quad (5.15)$$

donde supusimos que la frecuencia es baja en términos de la frecuencia característica asociada a una estructura de periodo L , i.e., $qL \ll 1$. En este caso, $G/q \gg 1$ para todos los vectores recíprocos no nulos. Sustituyendo en la ec. (5.14) obtenemos

$$\frac{1}{\epsilon^M(\omega, k) - \frac{k^2}{q^2}} \approx \frac{1}{\epsilon_{00} - \frac{k^2}{q^2} - \sum'_G \frac{q^2}{(k+G)^2} |\epsilon_{G0}|^2}, \quad (5.16)$$

de donde obtenemos finalmente $\epsilon^M(\omega, k) \approx \epsilon_{00} = f_A \epsilon_A + f_B \epsilon_B$ al orden más bajo en $(qL)^2$, donde la aproximación es válida para frecuencias bajas $qL \ll 1$, es decir, a frecuencias bajas no hay dispersión espacial ni temporal y la respuesta transversal es el simple promedio de las funciones dieléctricas de las componentes pesadas por su fracción de llenado.

En esta deducción usamos el hecho de que en una superred unidimensional y para propagación a lo largo del eje de la estructura, no hay acoplamiento entre campos longitudinales y transversales y por ello el campo (que es transversal en nuestro ejemplo) no tiene fluctuaciones, o más bien, sus fluctuaciones son pequeñas, del orden de $(qL)^2$. En el caso genérico en 2D y en 3D habría fluctuaciones pero dominadas por campos de carácter longitudinal acoplados con el campo macroscópico, los cuales conducirían a efectos de campo local aún para ondas transversales a bajas frecuencias.

5.3. Cálculo recursivo

En la sección 4.3 del capítulo 4 propusimos un algoritmo recursivo para el cálculo de la respuesta macroscópica de un sistema estructurado. En esta sección implementamos dicho algoritmo para sistemas unidimensionales y lo empleamos para calcular la respuesta del mismo sistema estudiado en la sección 5.2. De esta manera podremos comparar los resultados numéricos con resultados analíticos, validando de esta manera nuestra teoría, el método recursivo de cálculo y su implementación.

Para la implementación numérica empleamos el lenguaje *PERL* [85] con la inclusión de los módulos numéricos *Perl Data Language* (PDL) [86] es un lenguaje de muy alto nivel, muy flexible y expresivo, que permite la programación modular y la programación orientada a objetos, mientras que PDL es un conjunto de módulos y objetos que permite utilizar desde programas en PERL un gran número de librerías científicas optimizadas escritas en lenguaje compilados de gran desempeño. Este software es libre y gratuito, y por lo tanto, ampliamente disponible para ser instalado y empleado en un sinnúmero de plataformas¹.

La figura 5.3 muestra $\epsilon^M(\omega, k)$ obtenida mediante ambos métodos para un valor fijo de $k = \pi/2L$. Notamos la fuerte dependencia de la respuesta macroscópica con la frecuencia (dispersión temporal) aún cuando las componentes del sistema no dependen de la frecuencia y son reales. La figura muestra que los resultados numéricos obtenidos con el método recursivo coinciden con los provenientes del cálculo exacto. Esto sugiere que es viable usar nuestro método recursivo para el cálculo de la respuesta macroscópica de sistemas estructurados en dos y tres dimensiones para cuya respuesta macroscópica no contamos con expresiones analíticas.

5.4. Modos propios

Para obtener los modos propios electromagnéticos, en esta sección estudiaremos en detalle la respuesta macroscópica $\epsilon^M(\omega, k)$ para algunos valores fijos del vector de onda k y discutiremos la dependencia respecto a ω . En la figura 5.4 mostramos la

¹Disponible en <http://pdl.perl.org>

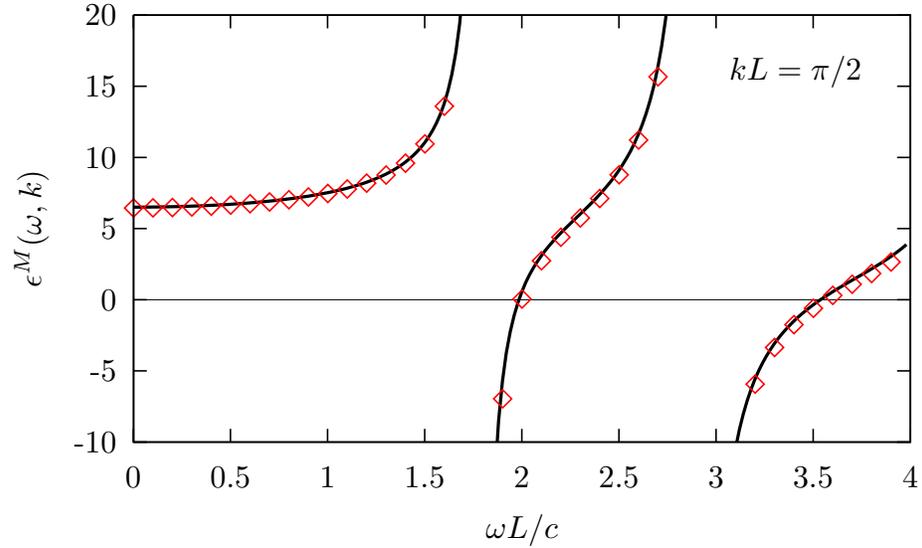


Figura 5.3: Respuesta macroscópica $\epsilon^M(\omega, k)$ del sistema unidimensional mostrado en la figura 5.1 como función de la frecuencia normalizada $\omega L/c$ para un vector de onda fijo $k = \pi/2L$. La línea sólida corresponde al cálculo analítico y los diamantes corresponden a resultados obtenidos con el esquema recursivo de Haydock con retardamiento.

respuesta dieléctrica macroscópica del mismo sistema unidimensional de la sec. 5.2 como función de ω para vectores de onda $k = 0$ y $k = 2\pi/L$ en el centro de la primera y de la segunda zona de Brillouin, respectivamente. La frecuencia de los modos propios electromagnéticos transversales del sistema, $\omega(k)$, puede obtenerse de la relación de dispersión $k^2 = q^2 \epsilon^M(\omega, k)$; $\omega(k)$ corresponde geoméricamente a la intersección de la hipérbola cúbica $(k/q)^2$ con la función $\epsilon^M(\omega, k)$, donde de nuevo abreviamos $q = \omega/c$. Conforme $k \rightarrow 0$, $(k/q)^2$ tiende hacia una recta vertical en el eje de las ordenadas unida a una recta horizontal en el eje de las abscisas. La figura indica con círculos los lugares donde ésta interseca a la función dieléctrica. Sobre la misma gráfica, mostramos con línea punteada roja la función macroscópica que corresponde a un vector de onda pequeño $k = 0.1/L$, la cual es muy parecida a la respuesta macroscópica con $k = 0$ excepto alrededor de la zona cercana a $qL \approx 2.3$, en la cual aparece un polo nuevo arriba del cual hay un cero, situado aproximadamente en $\omega \approx 2.3c/L$. En el panel inferior de la fig. 5.4 mostramos la respuesta macroscópica en el centro de la segunda zona de Brillouin $k = 2\pi/L$ y la hipérbola cúbica $(kc/\omega)^2$ correspondiente. Indicamos con círculos los lugares donde éstas dos funciones se intersecan.

En el panel superior hallamos una eigenfrecuencia en $\omega = 0$, la cual designamos con el numeral romano *I*. En el panel inferior no es evidente esta eigenfrecuencia, aunque aparece una intersección cercana cuando empleamos un vector de onda k que difiere un poco de $2\pi/L$, y para el cual aparece un polo en $\epsilon^M(\omega, k)$ muy cercano a $\omega = 0$. La

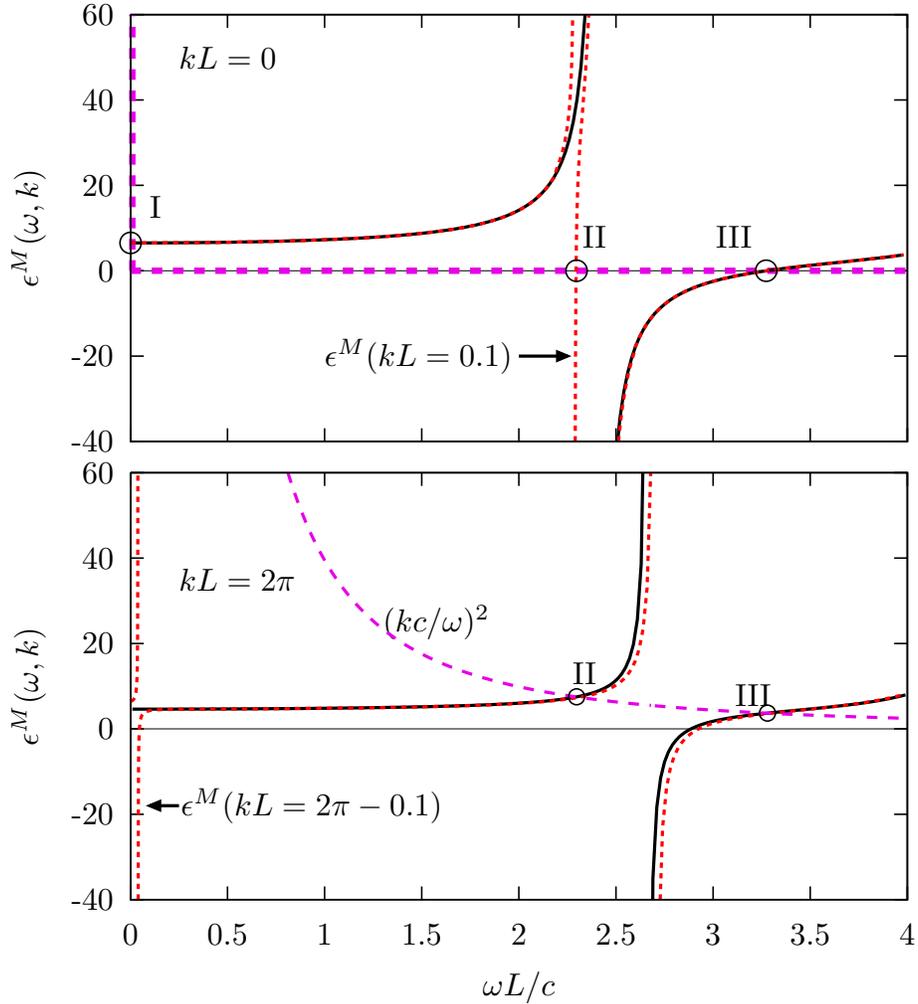


Figura 5.4: Respuesta dieléctrica macroscópica $\epsilon^M(\omega, k)$ del sistema unidimensional mostrado en la figura 5.1 como función de la frecuencia normalizada $\omega L/c$ para los vectores de onda $k = 0$ (arriba) y $k = 2\pi/L$ (abajo). Arriba se muestra la hipérbola cúbica degenerada $\lim_{k \rightarrow 0} (kc/\omega)^2$ (ver texto) mediante trazos largos. Se muestran con círculos los lugares donde ésta intersecta la gráfica de la función dieléctrica $\epsilon^M(\omega, 0)$: las eigenfrecuencias del sistema cuando $k = 0$. También se muestra con línea de trazos cortos la respuesta macroscópica para un vector de onda pequeño $k = 0.1/L$, la cual cruza por cero en $\omega \approx 2.3c/L$. Abajo se muestra con trazos largos la hipérbola cúbica $(k/q)^2$ para $k = 2\pi/L$. Las frecuencias en que ésta intersecta a la respuesta macroscópica $\epsilon(\omega, 2\pi/L)$ son las eigenfrecuencias del sistema en el centro de la segunda zona de Brillouin y se indican con círculos. También se muestra con línea punteada la respuesta macroscópica para un vector de onda cercano al borde de la zona, $k = (2\pi - 0.1)/L$.

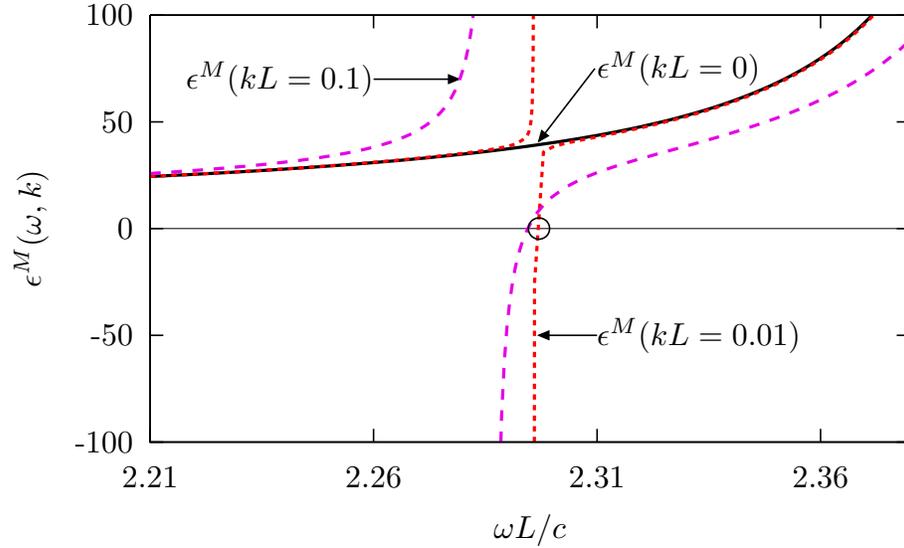


Figura 5.5: Respuesta dieléctrica macroscópica del sistema unidimensional mostrado en la figura 5.1 para tres valores de k cercanos a cero: 0 (línea continua negra), $0.1/L$ (trazos cortos rojos) y $0.01/L$ (trazos largos magentas).

intersección de esta curva con $(k/q)^2$ para k pequeño queda fuera de la gráfica, pero es evidente que sucede a una frecuencia $\omega \approx 0$ y que ésta tiende a cero cuando $k \rightarrow 0$. En el panel superior aparece otro modo cerca de $\omega = 3.27c/L$, indicado con el numeral *III*, el cual también aparece a la misma frecuencia en el panel inferior. Finalmente, en el panel inferior aparece un modo con frecuencia cercana a $\omega = 2.30c/L$, el cual indicamos con el numeral *II*, mientras que en el panel superior la función dieléctrica parece no cruzar al eje de las abscisas. Sin embargo, al variar muy poco el vector de onda $k \approx 0$ se desarrolla un nuevo polo en el panel superior muy cercano al polo inicial situado alrededor de $2.4c/L$, y aparece un cero de la función dieléctrica cerca de la frecuencia esperada.

El comportamiento de la función macroscópica cerca de $\omega \approx 2.30c/L$ y para valores de $k \approx 0$ parece muy peculiar. Para estudiarlo con mayor detalle, en la figura 5.5 mostramos un rango más estrecho de frecuencias en dicha región para dos vectores de onda pequeños pero distintos de cero $k = 0.1/L$ y $k = 0.01/L$, además del caso $k = 0$. La función dieléctrica alrededor de $\omega = 2.30c/L$ es continua cuando $k = 0$, pero con una minúscula modificación a k aparece un polo cuyo peso aumenta y cuya posición se desplaza hacia el rojo al incrementar k . La intersección del cero que sigue de este polo con el eje de las abscisas, indicado por un círculo en la figura 5.5, se halla en una frecuencia muy cercana a la frecuencia designada por el numeral romano *II* en la figura 5.4, y tiende a ella conforme $k \rightarrow 0$, aunque dicha intersección desaparece cuando se alcanza el valor $k = 0$. Por otro lado, podemos adivinar de la figura 5.4 que el desplazamiento al rojo del polo continúa conforme k continúa creciendo y conforme

$k \rightarrow 2\pi/L$ su posición se sitúa hasta $\omega \rightarrow 0$, aunque el polo colapsa en $\omega = 0$. Como vemos, todos los modos correspondientes a $k \rightarrow 0$ y a $k \rightarrow 2\pi/L$ coinciden entre sí, aunque su acoplamiento con el campo macroscópico varía y algunos de ellos pueden ausentarse del cálculo macroscópico en los límites $k = 0$ o $k = 2\pi/L$. Más adelante discutiremos la comparación entre modos cuyos vectores de onda difieren por un vector recíproco de la superred.

En la figura 5.6 mostramos la respuesta macroscópica del mismo sistema unidimensional de la sec. 5.2 como función de ω para otros vectores de onda, $k = \pi/2L$ como en la fig. 5.3 y para $k = \pi/L$, en el borde de la zona de Brillouin. En las gráficas también mostramos las hipérbolas cúbicas correspondientes y hemos utilizado numerales romanos para etiquetar sus intersecciones con $\epsilon^M(\omega, k)$. Estas intersecciones corresponden a los modos normales del sistema para dichos vectores de onda.

En esta sección hemos ilustrado cómo para cada vector de onda podemos obtener las frecuencias de los modos normales electromagnéticos correspondientes a partir de la solución de la relación de dispersión macroscópica, la cual corresponde a la ecuación de onda en un medio efectivo homogéneo que muestra dispersión espacial además de dispersión temporal. Para cada vector de onda puede haber varias frecuencias, lo cual está asociado a la presencia de varios polos en la respuesta dieléctrica macroscópica, aún en el ejemplo aquí desarrollado en el cual los componentes de nuestro metamaterial son no dispersivos y transparentes. En la siguiente sección estudiaremos sistemáticamente la dependencia de estas frecuencias en el vector de onda. Debemos notar que no sólo las posiciones, sino también los pesos de los polos de los que se originan los diversos modos dependen de k , por lo cual ciertos modos parecen desaparecer para algunos vectores de onda específicos.

5.5. Estructura de bandas

La propagación de ondas electromagnéticas libres, así como la propagación de cualquier otro tipo de ondas, en un sistema periódico, puede describirse a partir de un esquema de bandas. Así como sucede a los electrones en un sólido cristalino, la energía, o de manera equivalente, la frecuencia de los modos propios del sistema, son funciones del ímpetu, o de manera equivalente, su vector de onda. En el caso de una estructura periódica en una dimensión construida mediante la alternancia de películas delgadas homogéneas, es posible obtener la estructura de bandas fotónicas de manera analítica a partir de la *matriz de transferencia* que relaciona a los campos eléctrico a través de un periodo de la estructura. Para un sistema de dos componentes, ésta conduce a la relación de dispersión [23, 87]

$$\begin{aligned} \cos(kL) = & \cos(\sqrt{\epsilon_A}\omega L_A/c) \cos(\sqrt{\epsilon_B}\omega L_B/c) - \\ & \frac{1}{2} \left(\sqrt{\frac{\epsilon_A}{\epsilon_B}} + \sqrt{\frac{\epsilon_B}{\epsilon_A}} \right) \sin(\sqrt{\epsilon_A}\omega L_A/c) \sin(\sqrt{\epsilon_B}\omega L_B/c). \end{aligned} \quad (5.17)$$

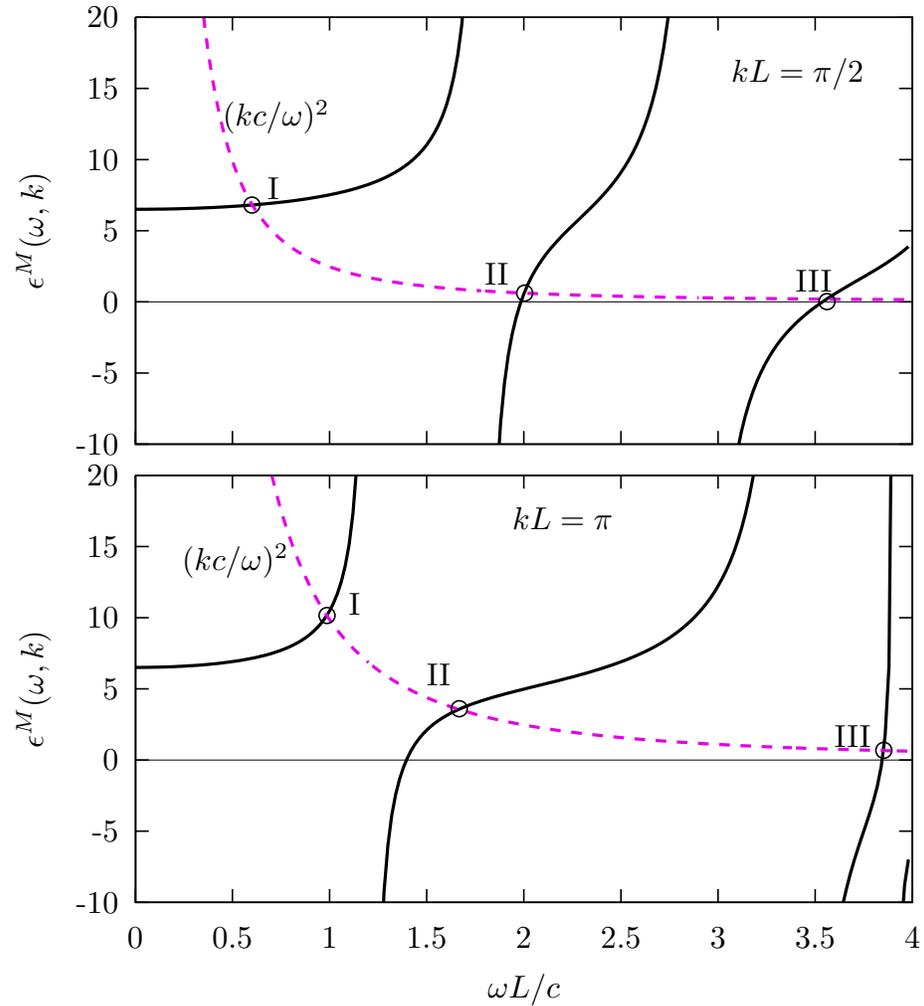


Figura 5.6: Respuesta macroscópica $\epsilon^M(\omega, k)$ del sistema mostrado en la figura 5.1 como función de ω para vectores de onda $k = \pi/2L$ (arriba) y $k = \pi/L$ (abajo). En ambos casos mostramos las hipérbolas cúbicas $(k/q)^2$ correspondientes (trazos largos) e indicamos con círculos y etiquetamos con numerales romanos sus intersecciones con $\epsilon^M(\omega, k)$, cuyas frecuencias corresponden a modos normales del sistema.

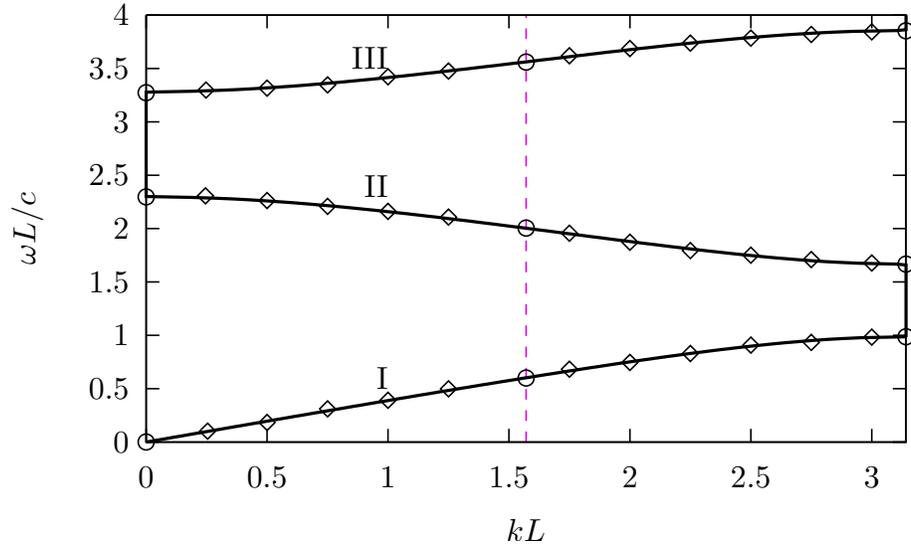


Figura 5.7: Relación de dispersión analítica obtenida de la ec. (5.17) (línea sólida). Indicamos con círculos los modos obtenidos en la sección anterior empleando la relación de dispersión macroscópica y con diamantes otros puntos obtenidos mediante el mismo procedimiento.

Por otro lado, hemos visto en la sección 2.3.1 del capítulo 2 y en la sección 5.4 que la relación de dispersión para los modos transversales de una superred pueden obtenerse con un enfoque macroscópico a partir de la relación de dispersión de un medio efectivo homogéneo pero no local

$$k^2 = \epsilon^M(\omega, k) \left(\frac{\omega}{c}\right)^2, \quad (5.18)$$

la cual podemos escribir como $\epsilon^M(\omega, k) = (kc/\omega)^2$. Bajo nuestro esquema macroscópico, para cada k , aquellas frecuencias $\omega_n(k)$ donde la hipérbola cúbica $(kc/\omega)^2$ se cruza con la función macroscópica $\epsilon^M(\omega, k)$ son las *eigenfrecuencias* del sistema, que corresponden a los *modos normales* del sistema, como ilustramos en las figuras 5.4 y 5.6 de la sección anterior, en las que hallamos los modos para tres valores específicos del vector de onda $k = 0$, ($k = 2\pi/L$), $k = \pi/2L$ y $k = \pi/L$. Basta repetir dicho procedimiento para otros vectores de onda, para construir toda la estructura de bandas fotónicas, como ilustramos en la figura 5.7.

En el rango de frecuencias que mostramos en la figura 5.7, obtenemos tres bandas $\omega_n(k)$ con $n = I, II$ y III . La comparación entre el cálculo macroscópico y el cálculo vía la matriz de transferencia muestran un excelente acuerdo a todo lo largo de la banda, excepto en ciertos puntos aislados, como discutiremos a continuación.

De acuerdo a la figura 5.4, en el centro $k = 0$ de la primera zona de Brillouin se pierde el modo II en el cálculo macroscópico, aunque se recupera para vectores de onda cercanos. El motivo por el cual este modo se pierde para $k = 0$ es que nuestro cristal

unidimensional es centrosimétrico. Una inversión cambia al vector de onda $k \rightarrow -k$ y por lo tanto lo deja invariante en el centro $k = 0$ de la zona de Brillouin. Por lo tanto, los modos con $k = 0$ son eigenmodos del operador de inversión, i.e., son pares o impares ante una inversión. Los modos impares promedian a cero, no contribuyen al campo macroscópico y no se acoplan a una excitación externa consistente en una onda plana con vector de onda $k = 0$. Más generalmente, un modo electromagnético que tenga simetría impar, no se puede acoplar a una excitación par ni viceversa [88], y por lo tanto, no podría obtenerse inmediatamente con nuestro formalismo macroscópico. Tal es el caso del modo II con $k = 0$.

Sin embargo, la misma figura 5.4 muestra que podemos obtener sin problema alguno el modo II con la frecuencia correcta si consideramos un vector de onda en el centro $k = 2\pi/L$ de la segunda zona de Brillouin. Esto se debe a que los modos con k finita ya no son eigenmodos del operador de inversión. Recordemos que en un sistema periódico, las frecuencias $\omega_n(k)$ de los modos propios son funciones *periódicas* de k con el periodo de la red recíproca, es decir, $\omega_n(k) = \omega_n(k + G)$ para cualquier vector recíproco G , lo cual nos permite obtener $\omega_{II}(k = 0)$ a partir de nuestra formulación macroscópica con $k = 2\pi/L$.

Puede parecer extraño el uso de una teoría macroscópica con un vector de onda k fuera de la primera zona de Brillouin. A este respecto, notamos que hemos definido nuestros campos macroscópicos a través de un proyector promedio que filtra todos los vectores recíprocos G no nulos. Aunque parece natural esperar que este procedimiento deje pasar únicamente vectores de onda k dentro de la primera zona de Brillouin, nada en nuestro formalismo impide que el vector k del campo macroscópico esté *fuera* de la primera zona de Brillouin; podríamos haber iniciado nuestro cálculo con una corriente externa que tuviera más de una oscilación en cada celda unitaria. En este caso, los campos fluctuantes son aquellos *con números de oscilaciones distintos*, acoplados a la perturbación externa a través de la textura del material, aunque dicho número de fluctuaciones podría ser tanto mayor como menor al de la perturbación. Recordamos que las ondas de Bloch son una suma de ondas planas, y podemos tomarnos la libertad de tomar a cualquiera de ellas como la representante *macroscópica* del campo. El precio a pagar por esta libertad es que perdemos la noción intuitiva común del concepto de macroscópico, como aquella componente del campo microscópico que oscila más lentamente que todas las demás. Sin embargo, seguimos pudiendo interpretar al campo macroscópico como aquel que tiene el mismo vector de onda que la corriente externa y podemos emplear esta libertad para sobreponernos de las limitaciones que podría imponernos la simetría.

Una forma de entender esta forma de extender nuestro cálculo sería sí limitándonos a vectores k dentro de la primera zona de Brillouin, pero interpretando a $k + G_0$ como el vector de onda macroscópico, donde G_0 es un vector recíproco específico, pero arbitrario. Entonces, los modos estarán dados por la solución de la relación de dispersión

macroscópica modificada

$$\epsilon^M(\omega, k + G_0) = \left(\frac{k + G_0}{q} \right)^2. \quad (5.19)$$

De manera similar, notamos en la fig. 5.4 que al escoger $k = 2\pi/L$ perdemos el modo I con frecuencia $w_I(k \rightarrow 2\pi/L) = 0$. Podemos explicar esto fácilmente, notando que cuando $k = 0$, la ecuación de onda $(k + G)^2 E_G = q^2 \sum_{G'} \epsilon_{G-G'} E'_G$ tiene una solución $q = 0$ ($\omega = 0$), con coeficientes $E_G = 0$ para todos los vectores recíprocos no nulos $G \neq 0$, mientras que E_0 es arbitrario. Entonces, en nuestro sistema unidimensional, el límite $k \rightarrow 0$, $\omega \rightarrow 0$ corresponde a un campo que no varía en el espacio y por lo tanto, es un modo que no se acopla a vectores recíprocos finitos como $G = 2\pi/L$. Es por ello que no podemos hallar dicho modo si iniciamos el cálculo macroscópico con un vector de onda $k = 2\pi/L$, pero una translación en el espacio recíproco que nos lleve al centro de la primera zona de Brillouin nos permite hallar el modo fácilmente.

Usaremos la libertad de trasladar los vectores de onda por vectores recíprocos cuando estudiemos las bandas fotónicas en sistemas de mayor dimensionalidad y con otras simetrías.

En esta sección vimos cómo la estructura de bandas fotónicas en un sistema unidimensional se puede reproducir de manera *exacta* con nuestro formalismo macroscópico, bien usando expresiones analíticas para la respuesta macroscópica o calculándola con el formalismo numérico iterativo desarrollado en el capítulo 4, siempre y cuando incorporemos en el cálculo los efectos de retardamiento, los cuales conducen a dispersión temporal y a no localidad, aún en sistemas cuyas componentes sean transparentes y no dispersivas. Desde luego, en este caso es más económico obtener las bandas directamente de la fórmula analítica 5.17 obtenida del formalismo de matrices de transferencia. Sin embargo, para sistemas de mayor dimensionalidad, no disponemos de dichas fórmulas analíticas. En la sección 6.2 del capítulo 6, mostraremos cómo nuestra formulación macroscópica nos permitirá obtener la estructura de bandas exacta para sistemas de mayor dimensionalidad.

La obtención de bandas fotónicas por medio de respuestas efectivas como la hemos propuesto fue publicado en [89]. También existen otras propuestas similares para obtener bandas fotónicas en la literatura [67, 90, 68, 40].

En esta sección ilustramos este tipo de cálculo aplicando el esquema macroscópico a la misma estructura de la sec. (5.2) y comparando nuestros resultados con el resultado exacto obtenido de la ecuación (5.17).

5.6. Aproximación local y respuesta magnética

La no localidad en la respuesta dieléctrica macroscópica (4.47) puede interpretarse bajo ciertas condiciones en términos de una respuesta magnética efectiva local del sistema

[91, 92]. Una manera simple de encontrarla, es expandiendo la ec. (5.18) en una serie de Taylor para vectores de onda k pequeños

$$k^2 = q^2 \epsilon^M(\omega, k) \approx q^2 \left(\epsilon^M(\omega, 0) + \frac{k^2}{2} \frac{\partial^2 \epsilon^M(\omega, 0)}{\partial k^2} + \dots \right). \quad (5.20)$$

El término lineal de la expansión no aparece en sistemas con simetría bajo inversión temporal (por ejemplo, en ausencia de campos magnéticos externos), ya que en ellos la respuesta macroscópica debe ser invariante frente al cambio $k \rightarrow -k$. Truncando la serie de Taylor al orden 2 y agrupando términos en k^2 y q^2 obtenemos

$$k^2 \approx q^2 \epsilon^M(\omega) \mu(\omega), \quad (5.21)$$

que es la relación de dispersión usual para los modos transversales en un medio *local* con permitividad $\epsilon^M(\omega) = \epsilon^M(\omega, 0)$ y con permeabilidad [59]

$$\mu(\omega) = \frac{1}{1 - \frac{q^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial k^2} \epsilon^M(\omega, 0)}. \quad (5.22)$$

Notamos aún cuando las componentes de la estructura sean no magnéticas, la no localidad de la función $\epsilon^M(\omega, k)$ implica que el sistema macroscópico puede tener una respuesta magnética $\mu(\omega) \neq 1$, i.e., el magnetismo puede surgir de la no localidad [93, 18] la cual en nuestro cálculo surge del retardamiento.

Podemos hacer un cálculo aproximado de las relaciones de dispersión de las ondas transversales de nuestra estructura 1D a partir de la permitividad y la permeabilidad local. Esperamos que esta aproximación sólo sea válida para vectores de onda pequeños. En la figura 5.8 mostramos las bandas calculadas bajo el esquema local aproximado para el mismo sistema que el discutido en la sección 5.2 junto con la relación de dispersión exacta. También mostramos la función dieléctrica macroscópica local $\epsilon^M(\omega)$ y la permeabilidad macroscópica $\mu(\omega)$. Observamos que para valores pequeños $\omega < c/L$ la permeabilidad es cercana a 1, es decir, nuestro sistema no muestra efectos magnéticos. Sin embargo, al aumentar ω , μ se incrementa y aproximadamente en $\omega = 1.5c/L$ tiene un polo, correspondiente a un cero en el denominador de la ec. (5.22), $q^2(\partial^2/\partial k^2)\epsilon^M(\omega, 0) = 2$. Para frecuencias ligeramente superiores, ϵ^M es positiva y μ es negativa, por lo cual el sistema se vuelve opaco. Esta es la contraparte local de la brecha fotónica que muestra el cálculo exacto cuando $\omega L/c \approx 1$. Claro que no esperamos que la aproximación local sea adecuada para vectores k grandes, cerca o más allá del borde de la zona de Brillouin. Como muestra la figura 5.5, cerca de $\omega \approx 2.3c/L$, $\epsilon^M(\omega, k)$ tiene un polo para $k \approx 0$, aunque este polo desaparece cuando $k = 0$ exactamente. Por lo tanto, las derivadas de ϵ^M con respecto a k divergen a dicha frecuencia y μ tiene un cero, arriba del cual toma un valor positivo. Es por ello que la aproximación local predice una banda de modos que se pueden propagar con $k \approx 0$ y $\omega \approx 2.3c/L$. Esto corresponde con el tope de la banda *II* de la figura 5.7. Sin embargo, a una frecuencia ligeramente superior $\epsilon^M(\omega, 0)$ tiene

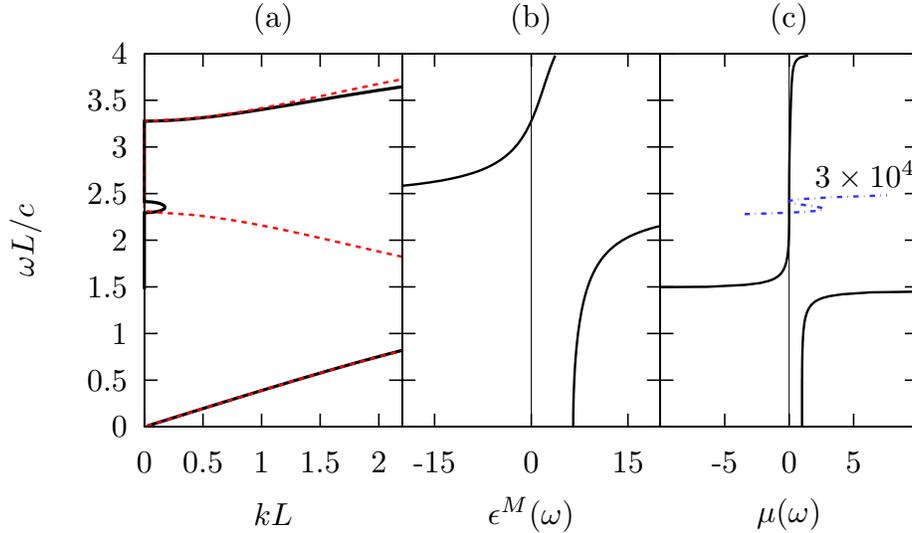


Figura 5.8: (a) Relación de dispersión local para el mismo sistema mostrado en la figura 5.1 (línea sólida) obtenida de la ec. (5.21) y relación de dispersión exacta (línea a trazos). (b) Función dieléctrica macroscópica local $\epsilon^M(\omega)$. (c) Respuesta macroscópica magnética $\mu(\omega)$ (línea sólida) y detalle escalado $3 \times 10^4 \mu(\omega)$ veces (línea a trazos y puntos azul).

un polo tras el cual cambia de signo. En este polo, μ tiene un cero doble, de manera que el producto $\epsilon^M \mu$ toma el valor 0 y la banda se regresa al valor $k = 0$. Este regreso no aparece en la relación de dispersión exacta. Arriba de este polo, ϵ^M es negativa y μ es positiva, por lo que aparece otra brecha prohibida que se extiende hasta $\omega \approx 3.35c/L$ en que ϵ^M tiene un cero. Ahí comienza la banda *III* que de nuevo es bien descrita por la aproximación local. Notamos que la aproximación local sin introducir la respuesta magnética sería incapaz de describir la banda *III*.

Hemos mostrado que las bandas *I* y *III* son bien descritas, sobre todo en la región de vectores de onda pequeños, por la aproximación local, siempre y cuando introduzcamos la permeabilidad magnética. En cambio, la banda *II* queda descrita bastante pobremente. Su borde es correctamente predicho, pero la aproximación local no conduce a una dispersión negativa y en cambio predice un regreso que no aparece en la banda original. El motivo de estas fallas proviene del hecho de que μ es cercana a cero alrededor de las singularidades de $\epsilon^M(\omega, k)$ y que nuestra expansión de Taylor cerca de ellas es cuestionable. En resumen, la aproximación local parece ser razonable para bandas acústicas y cerca de los ceros de ϵ^M , pero es cuestionable cerca de los ceros de μ .

En este capítulo estudiamos un sistema unidimensional de manera analítica y numérica y mostramos cómo un formalismo macroscópico nos permite obtener la estructura de bandas exactas del sistema. Analizamos también los límites de validez de la aprox-

imación local. En el siguiente capítulo, obtendremos la respuesta macroscópica de un sistema bidimensional y estudiaremos sus bandas fotónicas.

Capítulo 6

Sistema bidimensional

En el capítulo 4 hallamos la respuesta dieléctrica macroscópica de un material estructurado en presencia de retardamiento, la cual se puede implementar numéricamente mediante un algoritmo recursivo eficiente que mostramos en la sección 4.3. En el capítulo 5 pusimos a prueba dicho procedimiento y comparamos los resultados con aquellos que obtuvimos de una expresión analítica cerrada para la respuesta macroscópica de un sistema periódico unidimensional. También pusimos a prueba el formalismo calculando las bandas fotónicas a partir de la respuesta macroscópica y comparándolas con expresiones analíticas para la relación de dispersión exacta. En este capítulo hallaremos la respuesta macroscópica de sistemas con periodicidad en dos dimensiones, que por sencillez en la escritura les llamaremos sistema bidimensionales. Comparamos nuestros resultados con la fórmula de Maxwell-Garnett y con los resultados de nuestra formulación no retardada (cap. 3). También validaremos nuestros resultados comparándolos con los obtenidos de una formulación matricial exacta [60]. Discutimos la validez de dichas formulaciones en distintos rangos. Mostraremos cómo obtener las bandas fotónicas de la estructura a partir de la respuesta macroscópica e identificaremos la polarización de los modos resultantes. Por último, calcularemos la respuesta magnética efectiva del sistema y discutiremos la aproximación local para obtener las bandas fotónicas.

6.1. Respuesta dieléctrica

En esta sección implementaremos el formalismo propuesto en el capítulo 4, y en particular, el método recursivo desarrollado en la sec. 4.3, para obtener la respuesta macroscópica de un sistema bidimensional consistente en una red cuadrada de cilindros huecos ($\epsilon_B = 1$) perforados en un medio con respuesta dieléctrica $\epsilon_A = 12$. Los cilindros tienen radio ρ y el tamaño de la celda unitaria es $a \times a$ como se ilustra en la figura 6.1. Los ejes de los cilindros son paralelos al eje z . En este ejemplo escogimos el radio $\rho = 0.45a$.

En la figura 6.2 mostramos la respuesta longitudinal $\epsilon_L^M(\omega) \equiv \epsilon_{xx}^M(\omega, \mathbf{k} \rightarrow 0\hat{\mathbf{x}})$ para

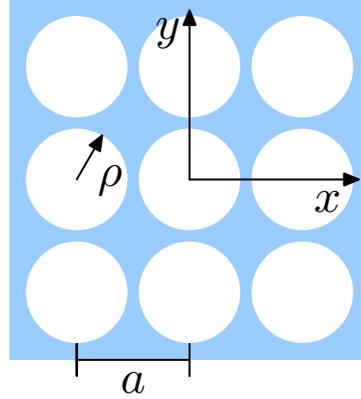


Figura 6.1: Sistema bidimensional consistente en una red cuadrada, con parámetro de red a , de cilindros huecos de radio ρ y respuesta $\epsilon_B = 1$ en un medio dieléctrico con constante dieléctrica $\epsilon_A = 12$. Se muestra la orientación del sistema de referencia.

un vector de onda $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{0}$ a lo largo del dirección x , donde hemos introducido los vectores unitarios \mathbf{x} , \mathbf{y} y \mathbf{z} . Cabe mencionar que debemos asignar una dirección al vector \mathbf{k} aún en este límite para poder distinguir la dirección longitudinal de las direcciones transversales. En la figura 6.2 mostramos los resultados de nuestro formalismo (líneas sólidas) para dos parámetros de red diferentes $a = 40\text{nm}$ y 120nm y los comparamos con los de otros métodos. Uno de ellos corresponde al cálculo exacto matricial propuesto en [60] en el que se resuelven las ecuaciones de Maxwell en una base de ondas planas. Los resultados de ambos métodos de cálculo muestran un completo acuerdo. Sin embargo, los costos computacionales del método propuesto en la ref. [60] es significativamente superior al costo del método propuesto en la sección 4.3.2, como mostramos a continuación. En estos cálculos empleamos como punto de inicio una imagen digitalizada de la celda unitaria, con $N \times N$, con $N \approx 10^2$ para tener una precisión adecuada [60]. Hemos verificado que la precisión del cálculo de la respuesta dieléctrica efectiva escala con $1/N$. Debido a la discretización, debemos emplear un espacio recíproco con las mismas dimensiones, i.e., con N^2 vectores recíprocos. Un campo en el plano, se describe con dos coordenadas para cada uno de los vectores recíprocos. Luego entonces, para representar un estado requerimos $2N^2$ números. El cálculo matricial de la referencia [60] requiere calcular, guardar, multiplicar y resolver ecuaciones con matrices de $2N^2 \times 2N^2$ que tienen $\approx 4 \times 10^8$ elementos. En contraste, el método propuesto en la sección 4.3.2 requiere manipular solamente vectores con $\approx 2 \times 10^4$ elementos. Así, cada uno de los puntos mostrados en las figuras 6.2 y 6.3 requieren de varias horas de cómputo cuando se ha paralelizado el proceso en un cúmulo con 40 núcleos, mientras que nuestra implementación toma algunos segundos por punto en una *laptop* convencional. El tiempo de cómputo de nuestro procedimiento es alrededor de 4 órdenes de magnitud más rápido. La ganancia es aún mayor en sistemas tridimensionales.

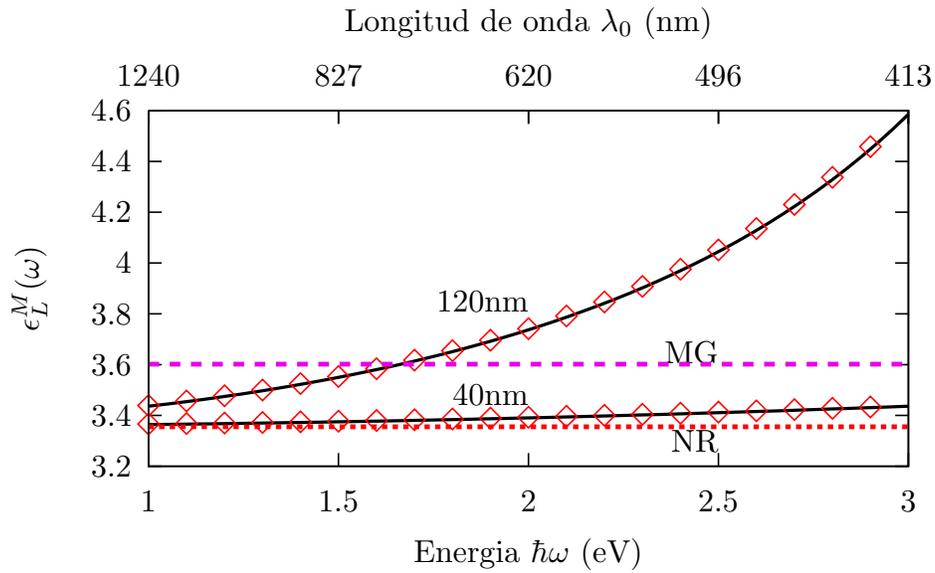


Figura 6.2: Función dieléctrica macroscópica longitudinal $\epsilon_L^M(\omega, 0\hat{x})$ del sistema ilustrado en la fig. 6.1. Mostramos resultados para dos parámetros de red $a = 40\text{nm}$ y $a = 120\text{nm}$. Las líneas sólidas corresponden al formalismo recursivo con retardamiento desarrollado en la sección 4.3.2. También mostramos el resultado del cálculo no retardado (NR) obtenida mediante el método recursivo discutido en la sección 3.4 (línea roja punteada). Como comparación se muestra el resultado de usar la fórmula de Maxwell-Garnett (MG) (línea magenta a trazos). Con diamantes se muestran los resultados de un cálculo numérico matricial exacto [60].

En la figura 6.2 también mostramos el resultado obtenido con el procedimiento no retardado (NR) que presentamos en la sección 3.4. Como podríamos haber esperado, los cálculos exactos convergen hacia el cálculo no retardado en el límite de frecuencias bajas, en el que la longitud de onda se vuelve mucho mayor que el parámetro de red del sistema.

Una de las fórmulas más sencillas y comúnmente empleadas para calcular la respuesta dieléctrica de medios efectivos es la fórmula de Maxwell- Garnett (MG) [55]

$$\epsilon_{MG}^M(\omega) = \epsilon_A + f_B \epsilon_{BA} - \frac{\epsilon_{BA}^2 f_B (1 - f_B)}{D \epsilon_A + \epsilon_{BA} (1 - f_B)}, \quad (6.1)$$

donde $D = 1, 2, 3$ es la dimensionalidad del sistema, f_B es la fracción de llenado de las partículas tipo B . La formulación de MG toma en cuenta solamente las interacciones de tipo dipolar no retardadas y sólo se considera adecuada para sistemas isotrópicos con fracciones de llenado bajas. Sin embargo es una fórmula fácil de usar y es muy común hallarla en la literatura sobre medios homogéneos. Existen otras fórmulas simples para medios efectivos, entre las cuales podemos mencionar la fórmula de Bruggeman [94], que resulta útil para sistemas estructurados de dos o más componentes pero donde la geometría de la inclusión/matriz no es la misma de posición a posición, situación que es muy común en sistemas experimentales, por ejemplo, en silicio poroso.

En la figura 6.2 mostramos el valor de ϵ^M predicho por la teoría MG. Notamos que conduce a resultados significativamente mayores que los nuestros no retardados. La diferencia entre nuestro cálculo NR y el de MG se debe a que la fracción de llenado de los cilindros huecos que propusimos $f \approx 0.64$ es alta, lo cual conduce a interacciones multipolares entre vecinos cercanos, no incluidas en la formulación MG. Para sistemas como el ilustrado en la figura 6.1 pero con fracciones de llenado bajas, MG sí coincide con NR.

En la fig. 6.3 mostramos la respuesta longitudinal correspondiente a un parámetro de red $a = 360\text{nm}$, mayor que los mostrados en la fig. 6.2. Esta figura muestra claramente el desarrollo de polos $\epsilon_L^M(\omega) \rightarrow \infty$, en este caso para $\omega \approx 1.5\text{eV}$ y 2.25eV , debidos a las múltiples reflexiones coherentes en las distintas interfaces del sistema, originando una fuerte dependencia de la función dieléctrica en la frecuencia (dispersión temporal) a pesar de que la respuesta de cada una de las componentes del sistema no depende de la frecuencia. Recordemos que en el límite no retardado, la respuesta macroscópica depende de la frecuencia únicamente a través de la variable espectral u que depende del cociente entre las respuestas dieléctricas de las componentes del medio. Como en el caso que aquí presentamos, éstas son no dispersivas, el resultado no retardado $\epsilon_L^M(\omega) \approx 3.36$ es independiente de la frecuencia, en contraste con el resultado retardado. Como en la figura previa, verificamos que nuestro procedimiento recursivo conduce a los mismos resultados que se obtienen con el cálculo con la formulación matricial [60], y que el cálculo no retardado no es adecuado más que en el límite de frecuencias bajas.

Como las componentes del sistema que estamos analizando son no dispersivas y la

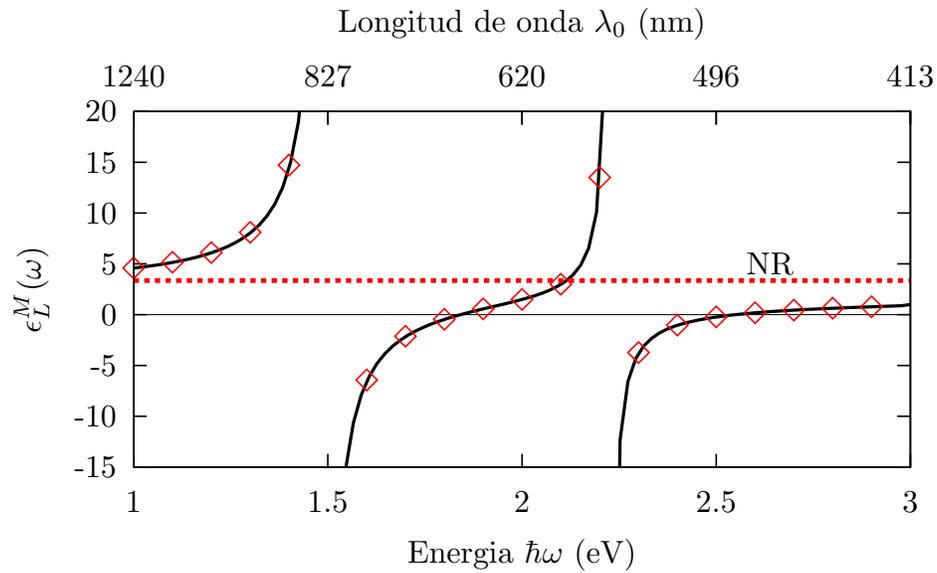


Figura 6.3: Función dieléctrica macroscópica longitudinal $\epsilon_L^M(\omega, 0\mathbf{x})$ para el sistema 2D mostrado en la figura 6.1 con un parámetro de red $a = 360\text{nm}$. Se muestra el resultado de nuestro cálculo recursivo con retardamiento desarrollado en la sección 4.3.2 (línea sólida), el resultado del cálculo no retardado (NR). Con diamantes se muestra el resultado de un cálculo numérico matricial exacto [60].

dependencia en la frecuencia de la respuesta macroscópica tiene un origen meramente geométrico, entonces $\epsilon^M(\omega, \mathbf{k})$ depende de ω y k únicamente a través de las cantidades adimensionales qa y ka . En consecuencia, las tres curvas presentadas en las figuras 6.2 y 6.3 pueden colapsarse en una sola curva escalando los ejes adecuadamente.

6.2. Bandas fotónicas

Una vez que hemos validado nuestros cálculos con las fórmulas analíticas y con los resultados de otras formulaciones, mostraremos cómo la respuesta dieléctrica macroscópica puede ser utilizada para encontrar la relación de dispersión de las bandas fotónicas del sistema estructurado. Consideraremos ondas que se propagan con vector de onda \mathbf{k} en el plano xy del sistema mostrado por la fig. 6.1, normal al eje de los cilindros. En este caso es conveniente distinguir dos casos: aquel en que el campo eléctrico apunta a lo largo del eje de los cilindros, correspondiente a la polarización transversal eléctrica (TE) y aquel en que es el campo magnético el que apunta a lo largo de los ejes, correspondiente a la polarización transversal magnética (TM). Estos modos no se acoplan entre sí y pueden estudiarse por separado debido a que el sistema presenta una simetría de reflexión $z \rightarrow -z$. En el caso TE, los modos electromagnéticos son claramente de carácter transversal y su relación de dispersión $\omega = \omega(\mathbf{k})$ se pueden obtener de la ecuación de onda macroscópica [18], tal como la escribimos en la ec. (2.31)

$$\epsilon_T^M(\omega, \mathbf{k}) = \frac{k^2}{q^2}, \quad (6.2)$$

con $\epsilon_T^M(\omega, \mathbf{k})$ la respuesta dieléctrica a lo largo del eje de los cilindros, la dirección z . En el segundo caso hay que analizar varias posibilidades. Cuando el vector de onda \mathbf{k} se halla a lo largo de líneas de alta simetría, de forma que el sistema sea invariante frente a reflexiones en dichas líneas, el campo eléctrico macroscópico a lo largo de \mathbf{k} no se acopla con el campo macroscópico en direcciones perpendiculares a \mathbf{k} . Esto permite identificar una función respuesta macroscópica longitudinal y otra transversal. Las relaciones de dispersión $\omega = \omega(\mathbf{k})$ de los modos transversales quedan descritas por la misma ecuación de onda (6.2), donde ahora debemos identificar a $\epsilon_T^M(\omega, \mathbf{k})$ con la componente transversal de la respuesta macroscópica en el plano, mientras que las ondas longitudinales cumplen la relación de dispersión que escribimos en la ec. (2.25)

$$\epsilon_L^M(\omega, \mathbf{k}) = 0, \quad (6.3)$$

con $\epsilon_L^M(\omega, \mathbf{k})$ la componente longitudinal de la respuesta dieléctrica macroscópica. Para otros vectores de onda, no es posible separar modos longitudinales de modos trasversales, la polarización de los modos propios es mixta, con una componente longitudinal y otra transversal, y la relación de dispersión se obtiene de las singularidades de el operador de onda macroscópico

$$\det [\mathcal{W}^M(\omega, \mathbf{k})] = 0. \quad (6.4)$$

Esta es una condición general que incluye como casos particulares a los de los modos con polarización T y L bien definida, cuando ellos están bien definidos (cuando los campos T y L no se acoplan entre sí), y conduce a modos mixtos cuando los campos T y L sí se hallan acoplados. Esto lo podemos ver directamente si dividimos la ecuación (4.9) en sus componentes longitudinal y transversal mediante la notación matricial

$$\begin{pmatrix} \hat{\mathcal{W}}_{LL}^M & \hat{\mathcal{W}}_{LT}^M \\ \hat{\mathcal{W}}_{TL}^M & \hat{\mathcal{W}}_{TT}^M \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{E}_L^M \\ \mathbf{E}_T^M \end{pmatrix} = \frac{4\pi}{i\omega} \begin{pmatrix} \mathbf{J}_L^M \\ \mathbf{J}_T^M \end{pmatrix}. \quad (6.5)$$

La existencia de modos propios del sistema implica que aún para una corriente $\mathbf{J}^M = \mathbf{0}$, el campo \mathbf{E}^M no es nulo. Los modos con polarización T y L están bien definidos cuando no hay acoplamiento entre ellos, es decir, cuando los términos fuera de la diagonal de la matriz de la ec. (6.5) son cero. En este caso se cumplen $\hat{\mathcal{W}}_{LL}^M \mathbf{E}_L^M = \mathbf{0}$ y $\hat{\mathcal{W}}_{TT}^M \mathbf{E}_T^M = \mathbf{0}$, que dan como resultado las ecs. (6.3) y (6.2), respectivamente. Sin embargo sí hay términos que acoplan los campos T con los L , los modos propios se obtienen de las singularidades la matriz del lado izquierdo de la ec. (6.5), lo cual nos lleva a la ec. (6.4).

6.2.1. Polarización TE

Para estudiar la función dieléctrica transversal $\epsilon_T^M(\omega, \mathbf{k}) = \epsilon_{zz}^M(\omega, \mathbf{k})$ empezaremos por escoger algunos puntos \mathbf{k} fijos de alta simetría [73]. En la fig. 6.4 mostramos la respuesta dieléctrica correspondiente al un vector de onda $\mathbf{k}_\Delta = (\pi/2a, 0, 0)$, correspondiente al punto medio de la línea Δ que une al punto $\Gamma = (0, 0, 0)$ en el centro de la primera zona de Brillouin (1ZB) con el punto $X = (\pi/a, 0, 0)$ en su frontera. La figura muestra los primeros tres polos de $\epsilon_T^M(\omega, \mathbf{k}_\Delta)$ originados en las reflexiones múltiples coherentes en las interfaces entre las regiones A y B . En la misma figura, mostramos la hipérbola cúbica $(k_\Delta/q)^2$, cuyas intersecciones con la curva $\epsilon_T^M(\omega, \mathbf{k}_\Delta)$ corresponderán a los modos trasversales del tipo 6.2 con eigenfrecuencias $\omega_\alpha(\mathbf{k}_\Delta)$, $\alpha = I, II, \dots$

La fig. 6.5 es similar a la fig. 6.4 pero para un vector de onda $\mathbf{k}_Z = (\pi/a, \pi/2a)$ en el punto medio de la línea Z que une al punto X con el punto $M = (\pi/a, \pi/a)$. Análogamente, la fig. 6.6 es similar a la fig. 6.4 pero para un vector de onda $\mathbf{k}_\Sigma = (\pi/2a, \pi/2a)$ en el punto medio de la línea Σ que une al punto Γ con el punto M .

Notamos en las figs. 6.4, 6.5 y 6.6 que a pesar de corresponder a tres vectores de onda distintos, los límites $\epsilon_T^M(\omega \rightarrow 0, \mathbf{k}) \approx 5$ coinciden. De hecho, en este caso TE podemos elaborar un argumento similar al elaborado en las ecuaciones (5.12)-(5.16), el cual nos permite mostrar que en el límite estático $\epsilon_T^M(\omega \rightarrow 0, \mathbf{k})$ es independiente de \mathbf{k} y está dado por el simple promedio de $\epsilon(\mathbf{r})$, i.e., $\epsilon_T^M(\omega \rightarrow 0, \mathbf{k}) = f_A \epsilon_A + f_B \epsilon_B$. Este argumento no es aplicable sin embargo al caso TM (abajo), pues en dicho caso hay fluctuaciones apreciables del campo longitudinal aún en el límite estático.

Repitiendo los procedimientos ilustrados en las figuras 6.5-6.6 pero para otras elecciones del vector de onda \mathbf{k} y resolviendo la ec. (6.2) podemos obtener las relaciones de dispersión $\omega_\alpha(\mathbf{k})$ de todos los modos TE del sistema y reproducir así el esquema de

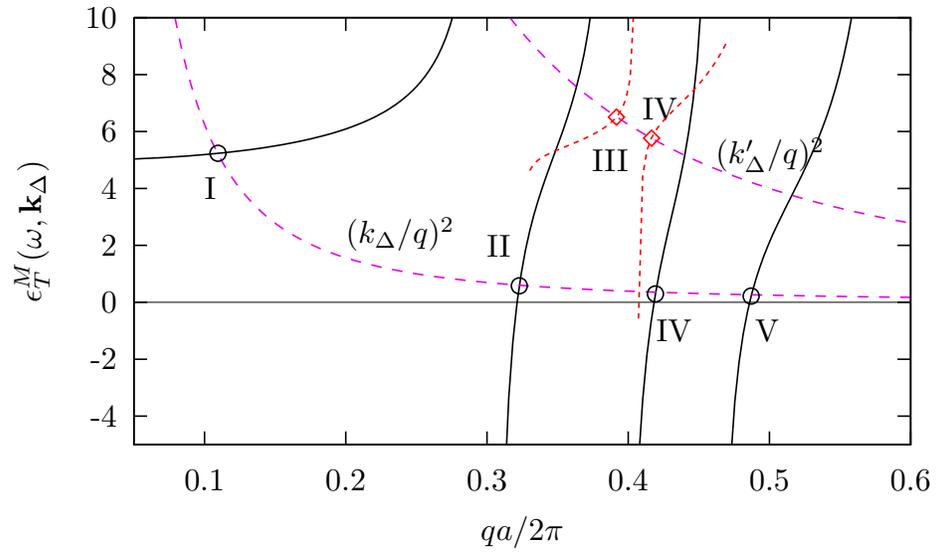


Figura 6.4: Función dieléctrica macroscópica (línea sólida) $\epsilon_T^M(\omega, \mathbf{k}_\Delta)$ en la dirección fuera del plano del sistema mostrado en la figura 6.1 para el vector de onda \mathbf{k}_Δ sobre la línea Δ de la primera zona de Brillouin. La hipérbola cúbica $(k_\Delta/q)^2$ (guión largo) intersecta a la función $\epsilon_T^M(\omega, \mathbf{k}_\Delta)$ en las eigenfrecuencias $\omega_\alpha(\mathbf{k}_\Delta)$ de los modos normales TE, con $\alpha = I, II, IV, V$ (círculos). También se muestran algunas intersecciones (diamantes) de $\epsilon_T^M(\omega, \mathbf{k}'_\Delta)$ (guión corto) con $(k'_\Delta/q)^2$ (guión largo) correspondientes al vector de onda modificado $\mathbf{k}'_\Delta = \mathbf{k}_\Delta + (2\pi/a)\mathbf{y}$ que corresponden a los modos $\alpha = III, IV$.

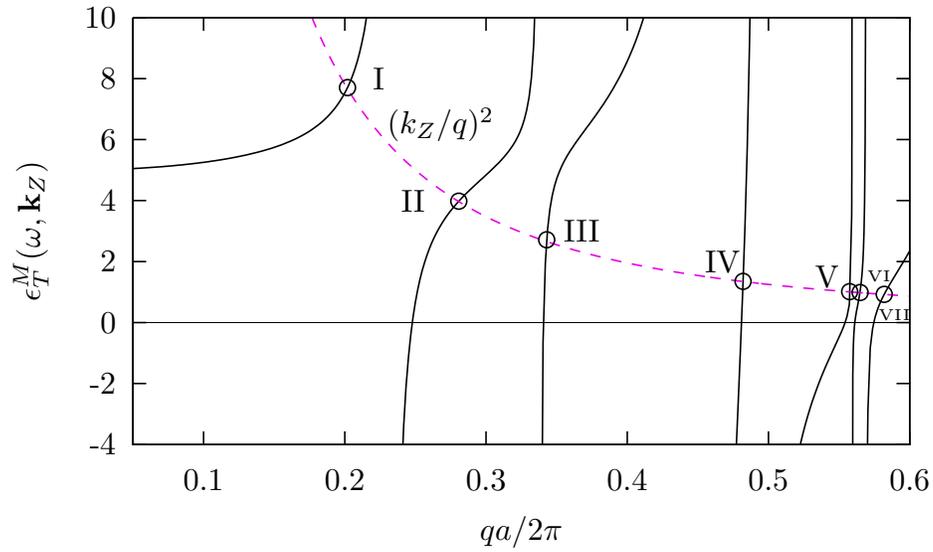


Figura 6.5: Función dieléctrica macroscópica (línea sólida) $\epsilon_T^M(\omega, \mathbf{k}_Z)$ en la dirección fuera del plano del mismo sistema periódico mostrado en la figura 6.1 para el vector de onda $\mathbf{k}_Z = (\pi/a, \pi/2a)$ sobre la línea Z de la primera zona de Brillouin. La hipérbola cúbica $(k_Z/q)^2$ (guión largo) interseca a la función $\epsilon_T^M(\omega, \mathbf{k}_Z)$ en las eigenfrecuencias $\omega_\alpha(\mathbf{k}_Z)$ de los modos normales TE, con $\alpha = I, II, III, IV, V, VI$ y VII (círculos).

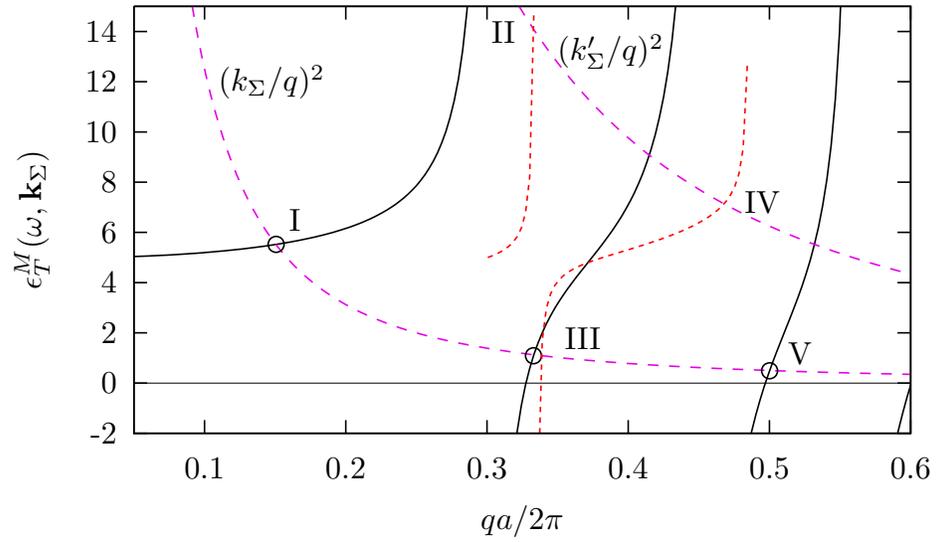


Figura 6.6: Función dieléctrica macroscópica (línea sólida) $\epsilon_T^M(\omega, \mathbf{k}_\Sigma)$ en la dirección fuera del plano del mismo sistema periódico mostrado en la figura 6.1 para el vector de onda $\mathbf{k}_\Sigma = (\pi/2a, \pi/2a)$ sobre la línea Σ de la primera zona de Brillouin. La hipérbola cúbica $(k_\Sigma/q)^2$ (guión largo) interseca a la función $\epsilon_T^M(\omega, \mathbf{k}_\Sigma)$ en las eigenfrecuencias $\omega_\alpha(\mathbf{k}_\Sigma)$ de los modos normales TE, con $\alpha = I, III$ y V (círculos). Las intersecciones (diamantes) de $\epsilon_T^M(\omega, \mathbf{k}'_\Sigma)$ (guión corto) con $(k'_\Sigma/q)^2$ (guión largo) correspondientes al vector de onda modificado $\mathbf{k}'_\Sigma = \mathbf{k}_\Sigma + (2\pi/a)\mathbf{y}$ y proporciona los modos $\alpha = II$ y IV .

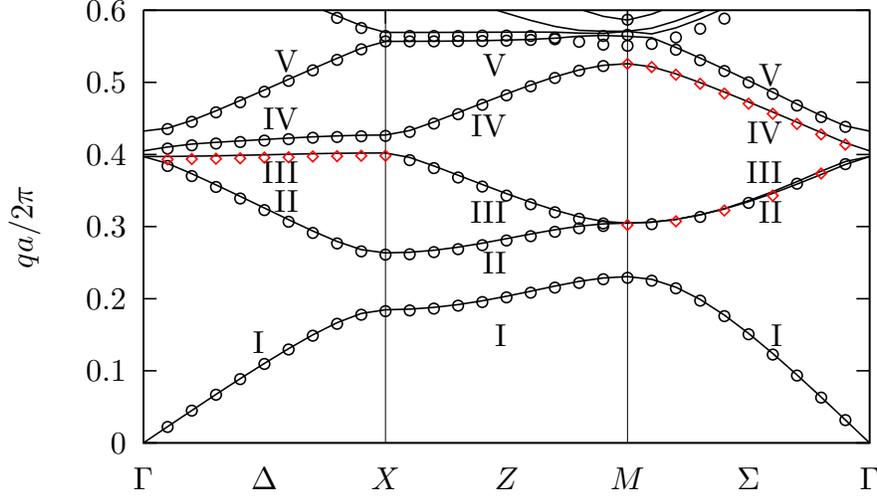


Figura 6.7: Bandas fotónicas de los modos electromagnéticos TE para el mismo sistema mostrado en la figura 6.1 obtenidos al resolver la ecuación (6.2) (círculos). Se muestra también la estructura de bandas fotónicas obtenidas al resolver el correspondiente problema de eigenvalores de la ecuación (6.6) (línea sólida). Se muestran también aquellos modos obtenidos al cambiar el vector de onda $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}' = \mathbf{k} + (2\pi/a)\mathbf{y}$ (diamantes).

bandas fotónicas del sistema. En la figura 6.7 mostramos las bandas fotónicas (círculos) de los modos TE de nuestro sistema correspondientes a un recorrido del vector de onda \mathbf{k} a lo largo de la trayectoria $\Gamma - \Delta - X - Z - M - \Sigma - \Gamma$ dentro de la primera zona de Brillouin.

Para verificar nuestros resultados, también obtuvimos los modos TE mediante la solución de la ecuación de eigenvalores [95]

$$\left(\frac{1}{\sqrt{\epsilon(\mathbf{r})}} \nabla^2 \frac{1}{\sqrt{\epsilon(\mathbf{r})}} \right) \left(\sqrt{\epsilon(\mathbf{r})} E_z(\mathbf{r}) \right) = -\frac{\omega^2}{c^2} \left(\sqrt{\epsilon(\mathbf{r})} E_z(\mathbf{r}) \right). \quad (6.6)$$

Para ello, empleamos una iteración implícita de Arnoldi [96], aplicando el *operador* $1/\sqrt{\epsilon(\mathbf{r})}$ en el espacio real y $\nabla \rightarrow i(\mathbf{k} + \mathbf{G})$ en el espacio recíproco. Los resultados se muestran en la fig. 6.7 mediante líneas sólidas. También verificamos los resultados calculando las bandas por medio del paquete de *software* libre *MIT Photonic Bands* (MPB) [97] y comparamos con los resultados presentados en la ref. [98] para el mismo sistema. La coincidencia entre todos estos resultados nos muestra que es posible hallar la estructura de bandas fotónicas del sistema mediante la respuesta macroscópica teniendo en cuenta su naturaleza no local.

Debemos también mencionar que aunque hemos obtenido las bandas fotónicas correctas aun para vectores de onda grandes, lejos del centro Γ de la zona de Brillouin,

existen regiones donde no fuimos capaces de obtener los modos normales. Por ejemplo, el modo etiquetado como *III* en la figura 6.4 y todos los puntos similares a lo largo de la línea Δ en la fig. 6.7, así como el modo etiquetado como *IV* en la fig. 6.6) y la banda correspondiente a lo largo de la línea Σ . Tampoco obtuvimos la segunda banda (*II*) que está cuasidegenerada con la tercera banda (*III*) a lo largo de Σ .

Notamos que para \mathbf{k} sobre la línea Δ el sistema es simétrico frente a la reflexión $G_y \leftrightarrow -G_y$ respecto a la línea Δ . Por lo tanto, los modos propios correspondientes tienen paridad bien definida. No es difícil mostrar que el campo microscópico correspondiente a la banda *III* es antisimétrico. De manera similar, las dos bandas que faltan a lo largo de la línea Σ son antisimétricas con respecto a la reflexión $G_x \leftrightarrow G_y$ respecto a la línea Σ . Por lo tanto, para estas bandas el campo eléctrico microscópico no tiene una componente finita correspondiente al vector recíproco $\mathbf{G} = 0$ [88], i.e., los modos perdidos no tienen componente macroscópica y por lo tanto, aparentemente no se pueden obtener como raíces de la relación de dispersión macroscópica (6.2).

Sin embargo, como discutimos en el caso 1D, dentro de nuestro formalismo, el vector de onda \mathbf{k} no está necesariamente restringido a la 1BZ. Ello nos permite calcular la respuesta dieléctrica macroscópica para vectores fuera de la 1BZ y obtener los modos propios en el esquema extendido. En la fig. 6.4 mostramos un fragmento de la gráfica la función dieléctrica macroscópica $\epsilon_T^M(\omega, \mathbf{k}'_\Delta)$ para un vector de onda \mathbf{k}'_Δ tomado fuera de la primera zona de Brillouin, obtenido mediante la translación de \mathbf{k}_Δ por un vector recíproco $(2\pi/a)\mathbf{y}$ a lo largo de la dirección y , i.e., $\mathbf{k}'_\Delta = \mathbf{k}_\Delta + (2\pi/a)\mathbf{y}$. Se debe hacer notar que la función $\epsilon^M(\omega, \mathbf{k})$ no es periódica en \mathbf{k} , ya que ésta corresponde a una componente de Fourier con un vector de onda específico y no a la onda de Bloch microscópica. La intersección de la curva $(k'_\Delta/q)^2$ con $\epsilon_T^M(\omega, \mathbf{k}'_\Delta)$ corresponde a los correspondientes modos macroscópicos. De esta manera, recuperamos los modos que habían sido obtenidos con \mathbf{k}_Δ y obtenemos los modos faltantes. Los diamantes de las figuras 6.4 y en 6.7 muestran cómo se recuperó la banda etiquetada como *III*, además el modo *IV* que habíamos obtenido previamente. El modo *III* aparece justo debajo de $qa/2\pi = 0.4$ en la fig. 6.4. Podemos mapear al vector de onda modificado hacia la 1BZ con la finalidad de mostrar los modos recuperados en el esquema reducido. Mediante este procedimiento para reducir la simetría de las líneas Δ y Σ hemos recuperado todas las bandas que parecían perdidas, las cuales se indican mediante diamantes en la figura 6.7. Por lo tanto, podemos obtener toda la estructura de bandas fotónicas para los modos TE a partir de la función dieléctrica macroscópica no local del sistema periódico.

Debemos mencionar que el procedimiento inverso, es decir, obtener la respuesta macroscópica a partir de la relación de dispersión, es un procedimiento que si bien se ha intentado [99] no conduce a una respuesta definida de manera única y las expresiones que se han propuesto no son válidas en general; fallan para frecuencias y vectores de onda que no satisfagan la relación de dispersión. Por lo mismo, dichas funciones respuesta no se pueden emplear en contextos en que la no localidad sea importante y en los cuales se deben considerar variables independientes al vector de onda y a la frecuencia. Nuestro

procedimiento no tiene esa limitación.

6.2.2. Polarización TM

Un procedimiento similar como al que discutimos en la sec. 6.2.1 puede emplearse para el caso de polarización transversal magnética TM, en el cual el campo magnético es paralelo al eje de los cilindros y el campo eléctrico, así como el vector de onda, descansan sobre del plano xy . En la fig. 6.8 mostramos las componentes $\epsilon_{xx}^M(\omega, \mathbf{k}_\Delta)$ y $\epsilon_{yy}^M(\omega, \mathbf{k}_\Delta)$ del tensor dieléctrico para un vector de onda fijo \mathbf{k}_Δ . Tanto este vector de onda como el sistema son simétricos bajo la reflexión $y \leftrightarrow -y$. Por lo tanto $\epsilon_{xy}^M = 0$ y se puede identificar a la respuesta transversal y longitudinal como $\epsilon_T^M(\omega, \mathbf{k}_\Delta) = \epsilon_{yy}^M(\omega, \mathbf{k}_\Delta)$ y $\epsilon_L^M(\omega, \mathbf{k}_\Delta) = \epsilon_{xx}^M(\omega, \mathbf{k}_\Delta)$ respectivamente. Los modos normales se obtienen de la relaciones macroscópicas transversal (6.2) o longitudinal (6.3), es decir, interesectando $\epsilon_T^M(\omega, \mathbf{k}_\Delta)$ con la hipérbola cúbica $(k_\delta/q)^2$ y buscando los ceros de $\epsilon_L^M(\omega, \mathbf{k}_\Delta)$. Identificamos los primeros modos con círculos y los últimos con diamantes en la figura.

En la figura 6.9 mostramos resultados similares pero a lo largo de la línea de simetría Σ para el vector de onda $\mathbf{k}_\Sigma = (\pi/2a, \pi/2a)$. A lo largo de esta línea, el vector de onda y el sistema son simétricos bajo la reflexión $x \leftrightarrow y$, y por lo tanto $\epsilon_{xx}^M(\omega, \mathbf{k}_\Sigma) = \epsilon_{yy}^M(\omega, \mathbf{k}_\Sigma)$. Podemos ahora identificar la respuesta macroscópica longitudinal como $\epsilon_T^M(\omega, \mathbf{k}_\Sigma) = \epsilon_{xx}^M(\omega, \mathbf{k}_\Sigma) - \epsilon_{xy}^M(\omega, \mathbf{k}_\Sigma)$ y $\epsilon_L^M(\omega, \mathbf{k}_\Sigma) = \epsilon_{xx}^M(\omega, \mathbf{k}_\Sigma) + \epsilon_{xy}^M(\omega, \mathbf{k}_\Sigma)$ respectivamente. La figura muestra $\epsilon_T^M(\omega, \mathbf{k}_\Sigma)$, y la curva $(k_\Sigma/q)^2$, cuyas intersecciones, señaladas con círculos, proporcionan los modos transversales, También se muestra la función $\epsilon_L^M(\omega, \mathbf{k}_\Sigma)$ cuyos sus ceros (diamantes) corresponden a los modos macroscópicos longitudinales.

A lo largo de la línea Z , en la trayectoria del punto X al punto M en el borde de la zona de Brillouin, no hay operaciones de simetría que conserven invariante el vector de onda, y por lo tanto los campos longitudinales y transversales están mezclados entre sí. No obstante, es posible obtener la eigenfrecuencias de estos modos mixtos a través de las singularidades del operador de onda macroscópico dados en la ec. (6.4) la cual es una condición general que incluye como casos particulares a los de los modos con polarización T y L bien definida, cuando ellos existen. En la figura 6.10 se muestra el determinante del operador de onda $\det[\mathcal{W}^M(\omega, \mathbf{k}_Z)]$ para un vector de onda $\mathbf{k}_Z = (\pi/a, \pi/2a)$ a lo largo de la línea Z . Los ceros, indicados con cuadros, corresponden a los modos de polarización mixta para dicho vector de onda.

De cálculos como los mostrados en las figuras 6.8, 6.9, y 6.10 pero para vectores de onda arbitrarios \mathbf{k} , podemos obtener la estructura de banda fotónica completa para el caso TM, como mostramos en la fig. 6.11. Podemos además, clasificar los modos TM de acuerdo a su polarización macroscópica como longitudinales o transversales cuando el vector de onda se halla a lo largo de líneas de alta simetría, o mixtos en el caso genérico.

Con la finalidad de probar nuestra teoría, hemos graficado los modos TM que se

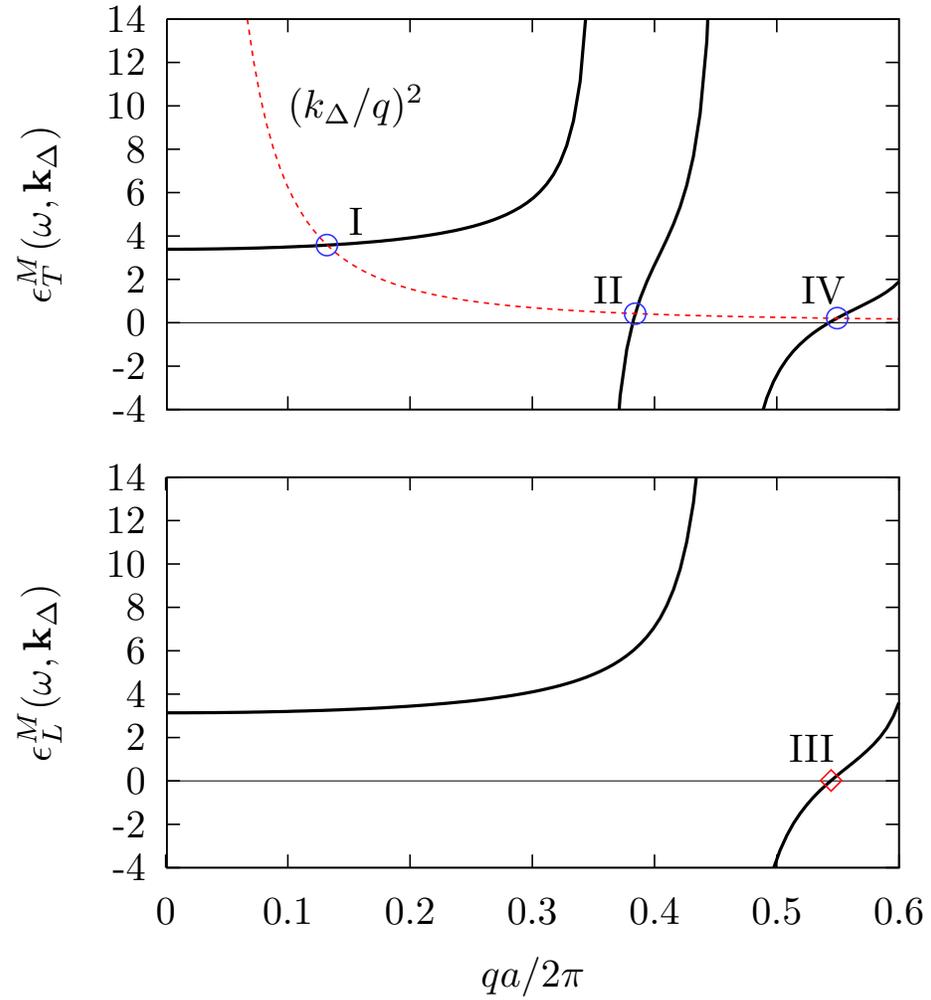


Figura 6.8: (a) Función dieléctrica macroscópica en el plano $x - y$ $\epsilon_T^M(\omega, \mathbf{k}_\Delta) = \epsilon_{yy}^M(\omega, \mathbf{k}_\Delta)$ y (b) $\epsilon_L^M(\omega, \mathbf{k}_\Delta) = \epsilon_{xx}^M(\omega, \mathbf{k}_\Delta)$ del mismo sistema mostrado en la figura 6.1 para el vector de onda $\mathbf{k}_\Delta = (\pi/2a, 0)$ (línea sólida). La hipérbola cúbica $(k_\Delta/q)^2$ (guiones) interseca a $\epsilon_T^M(\omega, \mathbf{k}_\Delta)$ en las frecuencias $\omega_\alpha(\mathbf{k}_\Delta)$ (círculos) de los modos electromagnéticos transversales con $\alpha = I, II, IV$. El cero (diamante) de la función $\epsilon_L^M(\omega, \mathbf{k}_\Delta)$ corresponde al modo longitudinal III .

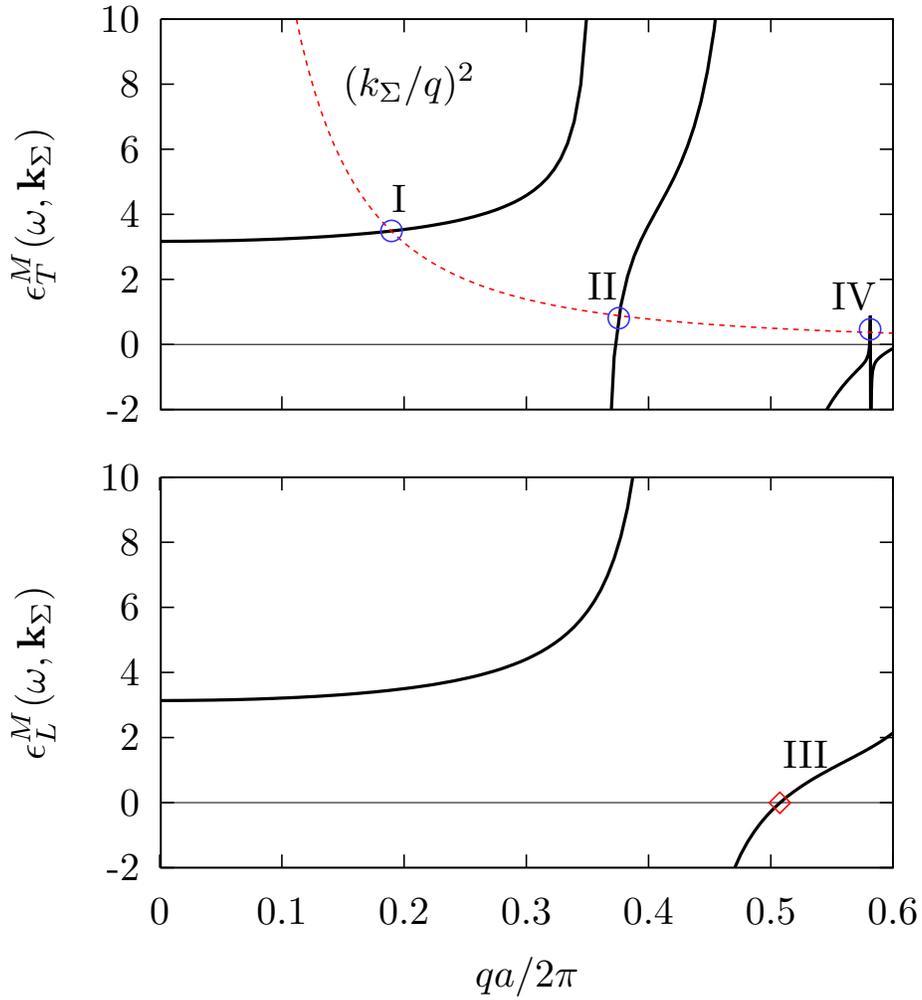


Figura 6.9: (a) Componente transversal $\epsilon_T^M(\omega, \mathbf{k}_\Sigma)$ y (b) longitudinal $\epsilon_L^M(\omega, \mathbf{k}_\Sigma)$ del tensor dieléctrico macroscópico $x-y$ del mismo sistema mostrado en la figura 6.1 para el vector de onda $\mathbf{k}_\Sigma = (\pi/2a, \pi/2a)$. La línea $(k_\Sigma/q)^2$ (guiones) interseca a $\epsilon_T^M(\omega, \mathbf{k}_\Sigma)$ en las frecuencias $\omega_\alpha(\mathbf{k}_\Sigma)$ (círculos) de los modos electromagnéticos transversales con $\alpha = I, II$ y IV . El cero (diamante) de la función $\epsilon_L^M(\omega, \mathbf{k}_\Sigma)$ corresponde al modo longitudinal III .

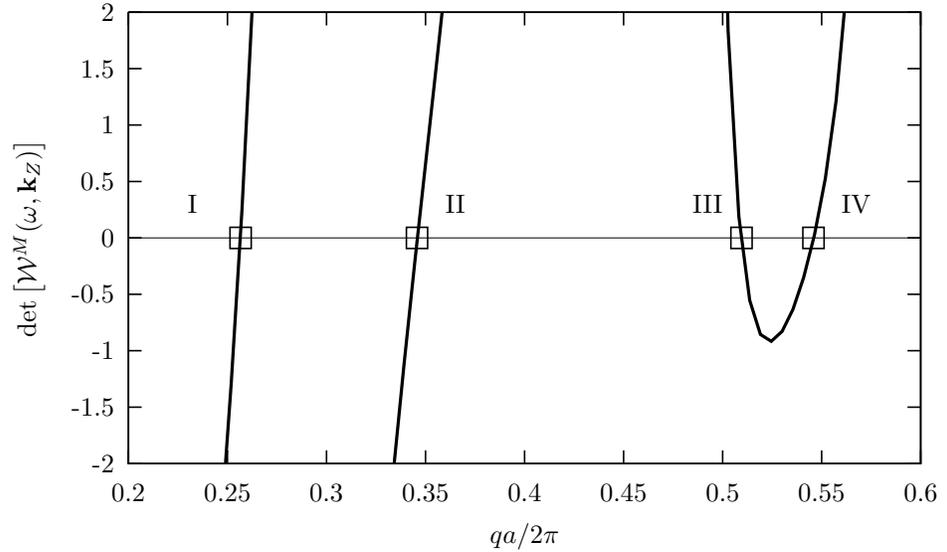


Figura 6.10: Determinante $\det[\mathcal{W}^M(\omega, \mathbf{k}_Z)]$ de la matriz del operador de onda macroscópico para un vector de onda $\mathbf{k}_Z = (\pi/a, \pi/2a)$ a lo largo de la línea Z . Los modos normales del sistema $\omega_\alpha(\mathbf{k}_Z)$, $\alpha = I, II, III, IV$, corresponden a sus ceros (cuadrados).

obtienen al resolver la ecuación de eigenvalores [95]

$$\nabla \cdot \frac{1}{\epsilon(\mathbf{r})} \nabla B_z(\mathbf{r}) = -\frac{\omega^2}{c^2} B_z(\mathbf{r}) \quad (6.7)$$

usando un método similar [96] al empleado en el caso TE. También comparamos nuestros resultados con resultados previos [98] para obtenidos para el mismo sistema. El acuerdo de los distintos procedimientos muestra que es viable usar la respuesta macroscópica del sistema para obtener su estructura de banda fotónica para el caso TM.

6.3. Aproximación local y respuesta magnética

La estructura de bandas se puede obtener de manera aproximada para las ondas transversales en la región donde los vectores de onda son pequeños $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{0}$ expandiendo el lado izquierdo de la ec. (6.2) hasta segundo orden en k y resolviendo la ecuación para k^2 . El resultado es una relación de dispersión tipo local

$$k^2 = q^2 \epsilon_T^M(\omega) \mu(\omega), \quad (6.8)$$

donde la permitividad se sustituye por una respuesta local $\epsilon_T^M(\omega) = \epsilon_T^M(\omega, \mathbf{k} \rightarrow 0)$ y la no localidad se toma parcialmente en cuenta a través de la permeabilidad magnética

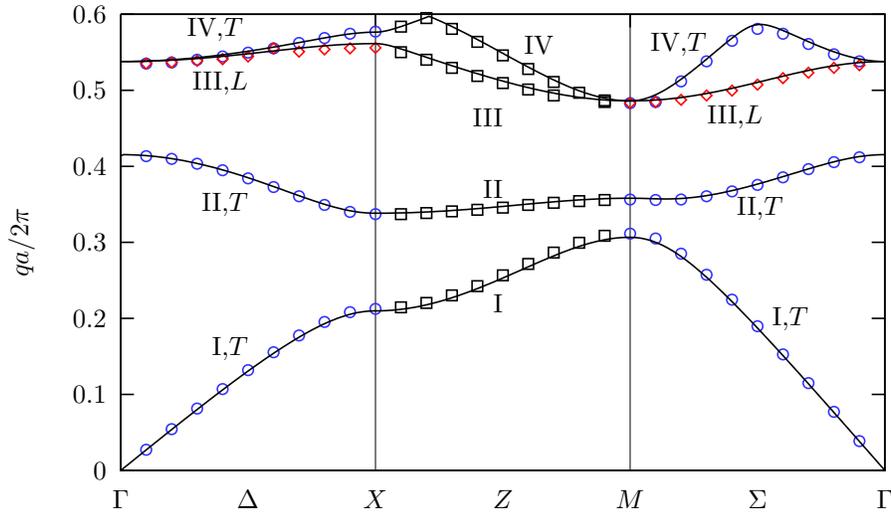


Figura 6.11: Bandas fotónicas de los modos TM para el mismo sistema que se muestra en la figura 6.1. Los modos que se encuentran a lo largo de la línea Δ , entre los puntos Γ y X , y aquellos en la línea Σ , entre M y Γ , se pueden obtener de resolver la ecuación (6.2) para los modos transversales (T , círculos) y la ecuación (6.3) para los modos longitudinales (L , diamantes), o la ec. (6.4) para ambos casos. Los modos a lo largo de la línea Z entre los puntos $X \rightarrow M$ se obtienen de la ecuación ec. (6.4) y tienen polarización mixta (cuadrados). Se muestran las bandas fotónicas obtenidas al resolver el problema de eigenvalores correspondiente a los modos TM, ec. (6.7) (línea sólida).

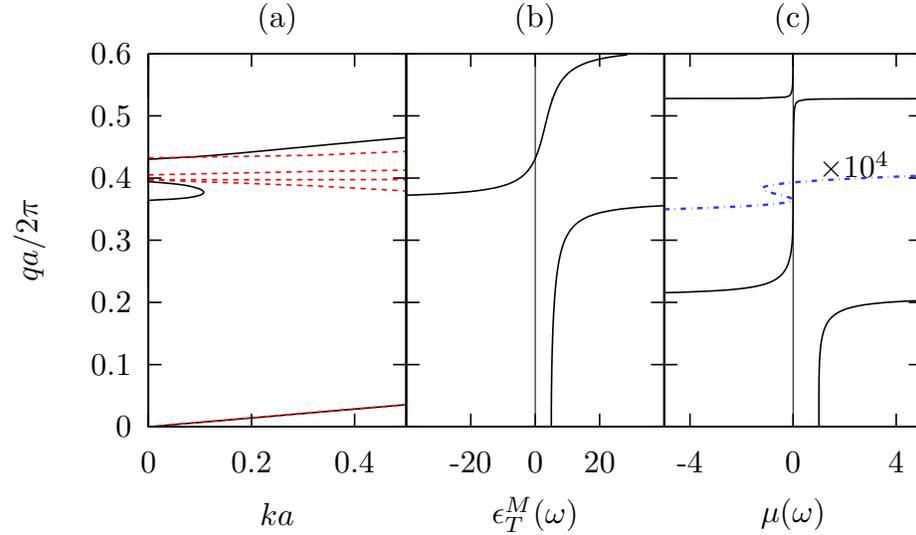


Figura 6.12: (a) Relación de dispersión local para las bandas TE del sistema mostrado en la fig. 6.1 (línea sólida) obtenida de la ec. (6.8). (b) Función dieléctrica local $\epsilon_T^M(\omega)$. (c) Permeabilidad magnética macroscópica $\mu(\omega)$ (línea sólida) y $10^4 \mu(\omega)$ (línea punteada). Por comparación, mostramos en (a) la relación de dispersión exacta (línea punteada).

macroscópica [59]

$$\mu(\omega) = \frac{1}{1 - \frac{q^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial k^2} \epsilon_T^M(\omega, k\mathbf{x})} \Big|_{k=0}, \quad (6.9)$$

que es la generalización de la ec. (5.22). En la figura 6.12 mostramos las bandas TE obtenidas a través de esta aproximación local para el sistema ilustrado en la figura 6.1. Análogamente, en la figura 6.13 mostramos las bandas TM. Las figuras 6.12 y 6.13 muestran que la aproximación local conduce a bandas acústicas que para vectores de onda y frecuencias pequeñas son prácticamente indistinguible del resultado exacto. Para el caso TE, esta banda local acústica se extiende hasta poco más allá de la frecuencia $qa/2\pi \approx 0.2$ donde μ tiene un polo, mostrado en la figura 6.12 (c), arriba del cual μ cambia de signo, correspondiente a una brecha prohibida. El siguiente polo de μ se encuentra en la frecuencia $qa/2\pi \approx 0.52$. Para frecuencias menores a este valor, pero mayores a $qa/2\pi \approx 0.4$, $\epsilon_T^M(\omega)$ es positiva y $\mu(\omega)$ también lo es, por lo cual se tiene una región de propagación permitida. Pero para frecuencias mayores a $qa/2\pi \approx 0.52$, $\mu(\omega)$ es negativa y $\epsilon_T^M(\omega)$ es positiva, por lo cual se tiene una brecha prohibida.

La aproximación local para el caso TE también reproduce la parte inicial de la banda TE etiquetada con el numeral *V* en la fig. 6.7, pero solamente en la vecindad de Γ , cerca del cero de $\epsilon_T^M(\omega)$ en $qa/2\pi \approx 0.43$. Como habíamos discutido, la banda etiquetada como *III* en la figura 6.12 no se acopla al campo macroscópico para \mathbf{k} a lo largo de la línea

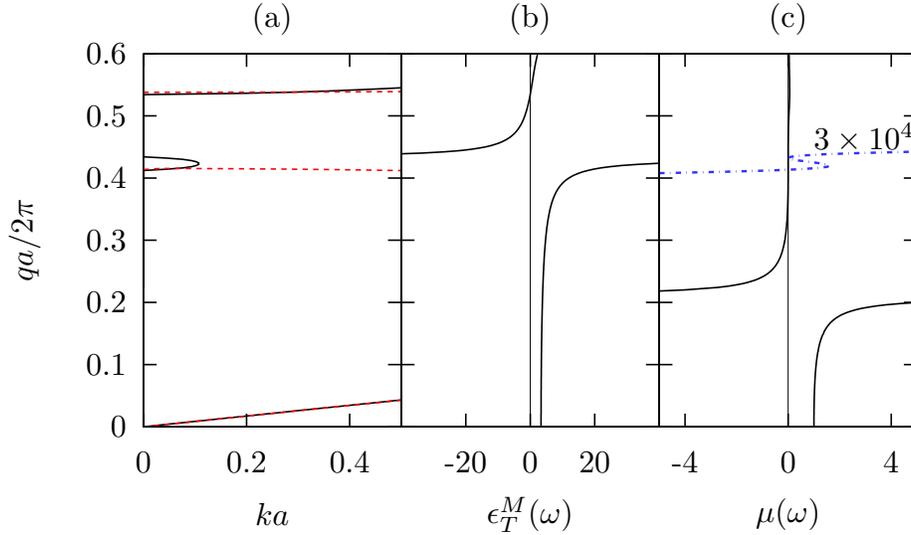


Figura 6.13: (a) Relación de dispersión local para las bandas TM del sistema mostrado en la casa 6.1 (línea sólida) obtenida de la ec. (6.8). (b) Función dieléctrica local $\epsilon_T^M(\omega)$. (c) Permeabilidad magnética macroscópica $\mu(\omega)$ (línea sólida) y $3 \times 10^4 \mu(\omega)$ (línea punteada). Por comparación, mostramos en (a) la relación de dispersión exacta (línea punteada).

Δ , mientras que la la banda etiquetada como IV no se acopla a lo largo de la línea Σ . Por lo tanto, estas dos bandas no se acoplan al campo macroscópico en Γ y como consecuencia, estas bandas no se pueden obtener por medio de la aproximación local (6.8) y no están presentes en la fig. 6.12.

En la región $qa/2\pi \approx 0.36 - 0.40$ la fig. 6.12 muestra que la aproximación local predice una banda curiosa que se dobla de vuelta. La parte baja de esta banda comienza con el polo de la función $\epsilon_T^M(\omega)$, la cual corresponde a un cero doble de $\mu(\omega)$. Esta parte de la relación de dispersión es espuria, ya que la expansión de Taylor a segundo orden de la función dieléctrica que da la ec. (6.9) y (6.8) comenzando de la ec. (6.2) es cuestionable en la vecindad del polo. Por lo tanto, esta parte de la banda local no corresponde a banda alguna en el cálculo exacto. Por otra parte, la parte de superior de la banda que se dobla corresponde a un cero simple de μ originado en otro tipo de singularidad, que consiste en un polo de $\epsilon_T^M(\omega, \mathbf{k})$ en $qa/2\pi \approx 0.40$ el cual desaparece en $k = 0$ dado que su peso es aproximadamente proporcional a k^2 . Esta parte de relación de dispersión local coincide con la banda II de la figura 6.7 cerca de Γ y presenta dispersión negativa. Para esta banda las funciones macroscópicas ϵ_T^M y μ son simultáneamente negativas [8, 48]. Por lo tanto, esta estructura fotónica hecha de huecos dentro de un dieléctrico sin dispersión, se comporta a dicha frecuencia como un metamaterial izquierdo [100, 40]. Sin embargo, se debe tener precaución al utilizar las ecuaciones (6.9) y (6.8) cerca de

las singularidades de $\epsilon_T^M(\omega, \mathbf{k})$.

Para el caso TM, también la banda local acústica se extiende poco más allá de la frecuencia $qa/2\pi \approx 0.2$ donde μ tiene un polo, mostrado en la figura 6.13 (c), arriba del cual μ cambia de signo, correspondiente a una brecha prohibida, lo cual es muy parecido a lo que sucede para el caso TE. La aproximación local también reproduce la parte inicial de la banda TM etiquetada con el numeral *IV* en la fig. 6.11, pero solamente en la vecindad de Γ , cerca del cero de $\epsilon_T^M(\omega)$ en $qa/2\pi \approx 0.53$.

La banda etiquetada como *III* en la figura 6.13 no se acopla al campo transversal macroscópico, puesto que es un modo longitudinal. Por lo tanto, esta banda no se acopla al campo macroscópico en Γ y no se puede obtener por medio de la aproximación local, que es para modos transversales (6.8) y por lo tanto no está presente en la fig. 6.13.

En la región $qa/2\pi \approx 0.41 - 0.43$ la fig. 6.13 (a) muestra que la aproximación local predice también la banda que se dobla de vuelta. La parte inferior de la banda que se dobla corresponde a un cero simple de μ originado en otro tipo de singularidad: la del polo de $\epsilon_T^M(\omega, \mathbf{k})$ en $qa/2\pi \approx 0.41$ el cual desaparece en $k = 0$ dado que su peso es aproximadamente proporcional a k^2 . Esta parte de relación de dispersión local coincide con la banda *II* de la figura 6.11 cerca de Γ y presenta dispersión positiva. Para esta banda las funciones macroscópicas ϵ_T^M y μ son simultáneamente positivas y el modo electromagnético se propagará de manera convencional. La parte alta de esta banda comienza con el polo de la función $\epsilon_T^M(\omega)$, la cual corresponde a un cero doble de $\mu(\omega)$ en $qa/2\pi \approx 0.43$. Esta parte de la relación de dispersión es espuria, ya que la expansión de Taylor a segundo orden de la función dieléctrica que da la ec. (6.9) y (6.8) comenzando de la ec. (6.2) es cuestionable en la vecindad del polo. Por lo tanto, esta parte de la banda local no corresponde a ninguna banda del cálculo exacto.

6.4. Componente metálica

Una de las ventajas que tiene nuestro método para obtener la función dieléctrica macroscópica es poder incluir metales en la composición de la estructura periódica. La función dieléctrica de los metales es compleja y tiene dependencia en la frecuencia. La absorción en metales es considerable en el rango visible y la dispersión también juega un papel importante en las propiedades electromagnéticas en dicho intervalo [101]. Métodos como elemento finito y FFTD se han implementado en sistemas con componentes metálicas y existen estudios sobre el problema de la convergencia en la solución a las ecuaciones de campo, debido principalmente a los cambios abruptos del campo en la vecindad de las interfaces [64, 102, 65] En esta sección mostramos un ejemplo consistente en una red de cuadrada de cilindros metálicos en el vacío ($\epsilon_A = 1$). Elegimos la respuesta dieléctrica de los metales cilíndricos como una función tipo Drude [17, 18]

$$\epsilon_B(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\gamma)}, \quad (6.10)$$

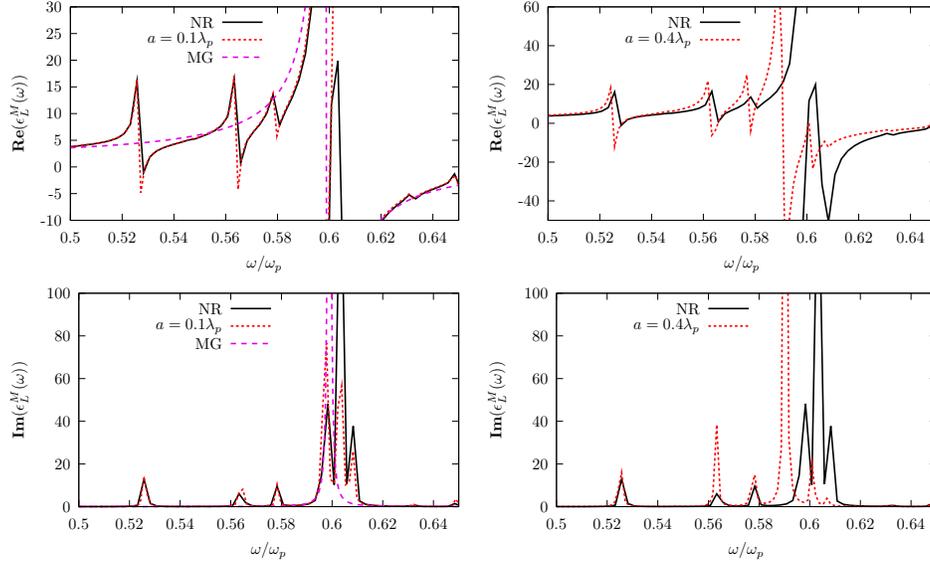


Figura 6.14: Parte real (arriba) e imaginaria (abajo) de la función dieléctrica macroscópica longitudinal $\epsilon_L^M(\omega, 0\mathbf{x})$ de un sistema 2D como el mostrado en la figura 6.1 formado por una red de cilindros conductores con parámetro de red $a = 0.1a_0$ (izquierda) y $a = 0.4a_0$ (derecha). Se muestra el resultado del cálculo no retardado (NR, línea sólida), el cálculo retardado (guiones cortos) y la fórmula de Maxwell-Garnett (guiones largos, izquierda).

donde ω_p es la frecuencia del plasmón de bulto y $1/\gamma$ es el tiempo medio de colisión entre los portadores de carga. Elegimos como radio de los cilindros es $\rho = .3a$ donde a es el tamaño de la celda unitaria. Los ejes de los cilindros son paralelos al eje z y la red cuadrada está orientada con los ejes cartesianos X y y .

En la fig. 6.14 mostramos la respuesta longitudinal $\epsilon_L^M(\omega) \equiv \epsilon_{xx}^M(\omega, \mathbf{k} \rightarrow 0\mathbf{x})$ en el límite de vector de onda cero donde tomamos dicho límite a lo largo de la dirección x . Para el cálculo empleamos el formalismo recursivo con retardamiento desarrollado en la sección 4.3. También mostramos los resultados de nuestro cálculo no retardado, desarrollado en la sección 3 y la predicción de la fórmula de Maxwell-Garnett, ec. (6.1) (MG). Presentamos resultados para distintos valores del parámetro de red a . Recordemos que el límite no retardado es equivalente a considerar que el tamaño de la celda unitaria es despreciable comparado con la longitud de onda. Para elaborar la figura 6.14 hemos escogido un valor de la disipación de $\gamma = 0.001\omega_p$ y dimos los valores $a = 0.1\lambda_p$ (izquierda) y $a = 0.4\lambda_p$ (derecha) al parámetro de red, donde $\lambda_p = 2\pi c/\omega_p$ es la longitud de onda de una onda libre cuya frecuencia es la frecuencia de plasma del metal y es una escala de distancias introducida por la dispersión temporal de la respuesta metálica.

La función macroscópica más simple de MG. Esta presenta un único polo de origen

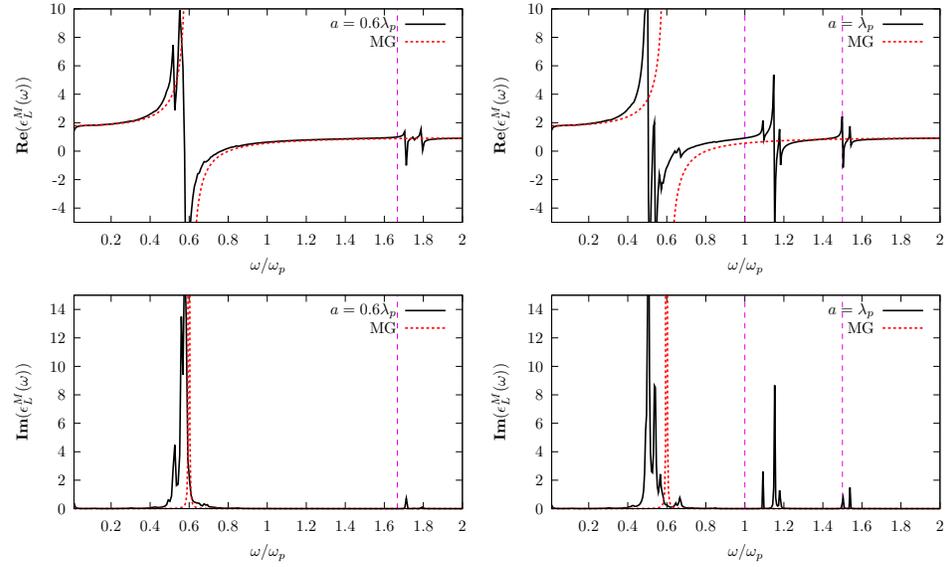


Figura 6.15: Partes real (arriba) e imaginaria (abajo) de la función dieléctrica macroscópica longitudinal $\epsilon_L^M(\omega, 0\mathbf{x})$ para el mismo sistema que en la figura 6.14 pero para parámetros de red $a = 0.6\lambda_p$ (izquierda) y $a = \lambda_p$ (derecha). Se muestra el resultado del cálculo retardado (línea sólida) y la fórmula de Maxwell-Garnett (guiones cortos). Con líneas a trazos verticales se indican las posiciones estimadas de las resonancias de Bragg.

dipolar cuya posición ω_d está dada por [103]

$$\omega_d = \sqrt{\frac{1 - f_B}{2}} \omega_p. \quad (6.11)$$

Para nuestro caso $f_B \approx 0.28$ y $\omega_d \approx 0.6/\omega_p$. Nuestra formulación no retardada presenta múltiples estructuras, además de la resonancia dipolar predicha por MG. Estas tienen su origen en las resonancias multipolares de los cilindros y que se acoplan al campo externo debido a las interacciones entre cilindros vecinos. Dichas resonancias multipolares se vuelven más importantes conforme aumenta la fracción de llenado. El retardamiento permite el acoplamiento directo entre el campo macroscópico y las oscilaciones multipolares, además de correr la posición de las correspondientes resonancias hacia el rojo.

La fig. 6.15 es similar a la fig. 6.14 pero para parámetros de red aún mayores $a = 0.6\lambda_p$ y $a = \lambda_p$. Mostramos un rango mas amplio de frecuencias con la finalidad de enfatizar las reflexiones múltiples coherentes tipo Bragg, para las cuales en cada periodo del sistema podría caber un número entero de semilongitudes de onda,

$$a = m\lambda/2, \quad (6.12)$$

con m un número entero y $\lambda = 2\pi c/\omega$ la longitud de onda libre. Dichas reflexiones coherentes hacen que la interacción entre celdas vecinas sea significativa y conducen a la excitación de modos con frecuencias cercanas a las frecuencias de Bragg. Debemos recordar que para frecuencias mayores a ω_p los cilindros se vuelven transparentes y el campo que dispersan individualmente se vuelve pequeño.

El cálculo presentado en esta sección ilustra la capacidad de nuestra teoría para calcular la respuesta macroscópica dependiente de la frecuencia para sistemas fabricados de componentes dispersivos y disipativos. Un estudio más profundo basado en el aquí mostrado podría ser útil para estudiar eficientemente la excitaciones de plasmones y bandas plasmónicas en metamateriales conductores, dispersivos en presencia de retardamiento.

En este capítulo hemos ilustrado algunas aplicaciones de los formalismo desarrollados en los capítulo 3 y 4 para obtener eficientemente la respuesta macroscópica en sistemas periódicos tanto en ausencia y como en presencia de retardamiento. Hemos validado nuestros resultados comparándolos con los de teorías más sencillas en los casos en que éstas son válidas, o con teorías generales pero cuya implementación derrocha innecesariamente recursos computacionales. Hemos mostrado que el formalismo macroscópico tiene una aplicabilidad mayor que la que uno esperaría ingenuamente y verificamos que podemos obtener la estructura exacta de bandas fotónicas de un sistema a partir del mismo. La respuesta que hemos obtenido tiene un carácter no local, parte del cual puede absorberse por una permeabilidad magnética efectiva. Exploramos las limitaciones de los esquemas macroscópicos locales que introducen dicha permeabilidad. Por último, mostramos que nuestro formalismo puede emplearse en cálculos que involucran materiales tanto dispersivos como disipativos.

Capítulo 7

Conclusiones

En este trabajo presentamos un formalismo para obtener la respuesta dieléctrica macroscópica de sistemas que presentan textura espacial arbitraria. Aunque nuestra propuesta es de carácter general, lo hemos aplicado principalmente a estructuras periódicas. En particular consideramos sistemas periódicos binarios los cuales modelamos como partículas de cierto material incrustadas de manera periódica en otro material distinto. Las componentes de dicho sistema, en el caso general, tienen funciones dieléctricas que pueden corresponder a medios dieléctricos o conductores, a materiales disipativos, a medios transparentes u opacos. También la geometría de las partículas y la red de Bravais, es decir, la manera en cómo hacemos la repetición periódica de la inclusión en la estructura, son arbitrarias.

En una primera aproximación, obtuvimos la respuesta macroscópica del sistema para el caso en que la longitud de onda fuese muy grande comparada con la longitud de la celda unitaria. Después, generalizamos el formalismo para poderlo aplicar a valores arbitrarios de la longitud de onda con respecto a las otras escalas de distancia características del sistema. Esta generalización nos permitió incorporar los efectos del retardamiento dentro de la respuesta macroscópica del sistema. Nuestra teoría macroscópica conduce a una función dieléctrica macroscópica que resulta ser dispersiva y no local, aun cuando el sistema está compuesto por dieléctricos no dispersivos.

El formalismo que presentamos se puede aplicar a sistemas en una, dos y tres dimensiones. En particular, obtuvimos expresiones analíticas para la respuesta dieléctrica de sistemas 1D y de ella derivamos una respuesta magnética local, lo cual nos permitió ilustrar cómo obtener la estructura de bandas fotónicas a partir del esquema macroscópico y hacer una comparación con resultados exactos. En el caso de dos dimensiones recurrimos a un cálculo numérico, para el cual se propuso un esquema recursivo modificado que nos permitió obtener la respuesta macroscópica de manera eficiente. Aplicamos nuestro formalismo al estudio de la propagación de ondas electromagnéticas en sistemas periódicos bidimensionales cuyas componentes tienen respuestas dieléctricas constantes y reales. También implementamos el caso en que una de las componentes del sistema es

metálica.

En el enfoque macroscópico, clasificamos los modos electromagnéticos del sistema como longitudinales y transversales, cuando la simetría del cristal y la dirección de propagación lo permiten. En caso contrario, obtuvimos modos mixtos con campos longitudinales y transversales acoplados. La función dieléctrica macroscópica presenta un conjunto de polos, que están relacionados a las reflexiones coherentes múltiples dentro de la estructura. También la respuesta magnética presenta una serie de polos. Hemos mostrado que se puede obtener la estructura de bandas fotónicas completa del sistema al tomar en cuenta la dispersión espacial en la respuesta macroscópica del sistema, empleando para ello las relaciones de dispersión macroscópicas correspondientes a un medio efectivo homogéneo.

La no localidad de la respuesta dieléctrica macroscópica fue utilizada para tomar en cuenta efectos magnéticos a través de la respuesta magnética macroscópica, que junto con la función dieléctrica macroscópica del sistema puede emplearse para calcular propiedades de bandas obtenidas a partir de la aproximación local con los resultados exactos y mostramos que hay cierta semejanza de las bandas fotónicas para cuando los vectores de onda son muy pequeños comparados con la periodicidad de la red. En una de las estructuras bidimensionales, encontramos que existe una región de frecuencia con dispersión negativa, en la cual la permeabilidad y la permitividad macroscópica son ambas negativas.

Apéndice A

Correspondencia entre formulaciones macroscópicas

En la sección 3.1 del capítulo 3 mostramos cómo obtener la respuesta macroscópica en el límite sin retardo, ec. (3.5), de un sistema estructurado. También mencionamos que dicho resultado había sido obtenido por Mochán et al. [24, 25] mediante una formulación general basada en las ecuaciones de Maxwell. Dicha propuesta no necesita de representación alguna para escribir los operadores, por lo cual se le puede aplicar a una gran variedad de sistemas que presentan textura espacial. Varios de los operadores que utilizamos en este trabajo los adaptamos de aquel trabajo. En este apéndice, vamos a presentar algunas de las deducciones de ese trabajo que antecede a nuestra propuesta y demostraremos la correspondencia con la formulación que hemos presentado.

Comencemos separando la proyección promedio y la proyección fluctuante de la relación constitutiva (2.9) y la expresamos mediante un arreglo matricial

$$\begin{pmatrix} \mathbf{D}_p \\ \mathbf{D}_f \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{\epsilon}_{pp} & \hat{\epsilon}_{pf} \\ \hat{\epsilon}_{fp} & \hat{\epsilon}_{ff} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{E}_p \\ \mathbf{E}_f \end{pmatrix}. \quad (\text{A.1})$$

Para hallar la relación constitutiva macroscópica, $\mathbf{D}^M = \hat{\epsilon}^M \mathbf{E}^M$, necesitamos que la proyección promedio del desplazamiento quede solamente en términos de la componente promedio del campo eléctrico. Esto se puede hacer considerando la ecuación (4.2),

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{E} = \frac{4\pi i\omega}{c^2} \mathbf{J} + \frac{\omega^2}{c^2} \mathbf{D} \quad (\text{A.2})$$

Para que una formulación macroscópica tenga sentido físico, la corriente externa no deben tener fluctuaciones, es decir $\hat{\mathcal{P}}_f \mathbf{J} = \mathbf{0}$. Así que podemos proyectar la ec. (A.2) hacia el subespacio fluctuante para obtener

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{E}_f = \frac{\omega^2}{c^2} (\hat{\epsilon}_{fp} \mathbf{E}_p + \hat{\epsilon}_{ff} \mathbf{E}_f), \quad (\text{A.3})$$

expresión de la cual podemos despejar la componente fluctuante del campo eléctrico en términos de la componente del campo eléctrico promedio como

$$\mathbf{E}_f = - \left[\left(\hat{\epsilon} - \frac{1}{q^2} \nabla \times \nabla \times \right)_{ff} \right]^{-1} \hat{\epsilon}_{fp} \mathbf{E}_a, \quad (\text{A.4})$$

donde $q = \omega/c$ y donde hemos de proyectar el término entre paréntesis sobre el subespacio de campos fluctuantes antes realizar la inversión. Al sustituir la ec. (A.4) en la componente promedio de la ec. (A.1) se tiene

$$\mathbf{D}_p = \hat{\epsilon}_{pp} \mathbf{E}_p + \hat{\epsilon}_{pf} \mathbf{E}_f \quad (\text{A.5})$$

$$= \left(\hat{\epsilon}_{pp} - \hat{\epsilon}_{pf} \left[\left(\hat{\epsilon} - \frac{1}{q^2} \nabla \times \nabla \times \right)_{ff} \right]^{-1} \hat{\epsilon}_{fp} \right) \mathbf{E}_p, \quad (\text{A.6})$$

expresión que relaciona exclusivamente campos promedios y por lo tanto relaciones entre desplazamiento y campo macroscópicos. Identificamos la respuesta macroscópica del sistema como

$$\hat{\epsilon}^M = \hat{\epsilon}_{pp} - \hat{\epsilon}_{pf} \left[\left(\hat{\epsilon} - \frac{1}{q^2} \nabla \times \nabla \times \right)_{ff} \right]^{-1} \hat{\epsilon}_{fp}. \quad (\text{A.7})$$

Este resultado nos proporciona una expresión cerrada para la respuesta macroscópica en función de la respuesta microscópica del sistema con fluctuaciones espaciales arbitrarias y es exacta en el sentido de que no se realizó aproximación alguna en su deducción.

La implementación numérica del resultado expresado en la ec. (A.7) para un sistema periódico se puede llevar a cabo mediante una expansión del campo eléctrico en una base de ondas planas. Para poder representar al operador diferencial $\nabla \times \nabla \times$ de manera adecuada, es necesario considerar un número grande de onda planas para así obtener una convergencia numérica razonable en la respuesta macroscópica [60]. Esto implica un alto costo computacional de uso de memoria y procesadores debido a la necesidad de realizar operaciones sobre matrices grandes.

Una manera de simplificar el cálculo de la respuesta macroscópica es considerar la aproximación de onda larga que hemos discutido en el capítulo 3. Bajo esta consideración, podemos simplificar la expresión (A.7) y calcular la respuesta macroscópica del sistema de manera eficiente [62]. Supongamos que en un sistema periódico incide una onda electromagnética cuya longitud de onda λ es mucho mayor a la periodicidad L del cristal. En esas condiciones, según las consideraciones que discutimos en la sección 3.1 del capítulo 3, podemos ignorar los efectos de retardamiento de la luz.

Usamos la notación matricial para separar al operador $(\hat{\epsilon} - q^{-2} \nabla \times \nabla \times)_{ff}$ en sus

componentes longitudinal, transversal y mixtas mediante

$$\begin{aligned}
\left[\hat{\epsilon}_{ff} - \frac{1}{q^2} (\nabla \times \nabla \times)_{ff} \right]^{-1} &= \left[\begin{array}{cc} \hat{\epsilon}_{ff}^{LL} & \hat{\epsilon}_{ff}^{LT} \\ \hat{\epsilon}_{ff}^{TL} & \hat{\epsilon}_{ff}^{TT} + \frac{1}{q^2} \nabla^2 \hat{\mathcal{P}}^T \hat{\mathcal{P}}_f \end{array} \right]^{-1} \\
&= \left[\begin{array}{cc} (\hat{\epsilon}_{ff}^{LL})^{-1} & 0 \\ 0 & 0 \end{array} \right] + \\
& \quad q^2 \left[\begin{array}{cc} (\hat{\epsilon}_{ff}^{LL})^{-1} \hat{\epsilon}_{ff}^{LT} \nabla^{-2} \hat{\epsilon}_{ff}^{TL} (\hat{\epsilon}_{ff}^{LL})^{-1} & -(\hat{\epsilon}_{ff}^{LL})^{-1} \hat{\epsilon}_{ff}^{LT} \nabla^{-2} \\ -\nabla^{-2} \hat{\epsilon}_{ff}^{TL} (\hat{\epsilon}_{ff}^{LL})^{-1} & \nabla^{-2} \hat{\mathcal{P}}^T \hat{\mathcal{P}}_f \end{array} \right] + \dots
\end{aligned} \tag{A.8}$$

donde hemos hecho una expansión en series y cada uno de los términos consecutivos es más pequeño que su antecesor por un factor de $(L/\lambda)^2$, L es el parámetro de red y $\lambda = 2\pi/q$ es la longitud de onda en el vacío. Al orden más bajo, que corresponde a la aproximación de onda larga, nos quedamos con el primer término de la expansión hecha en (A.8) para aproximar la ec. (A.7) como

$$\hat{\epsilon}^M = \hat{\epsilon}_{pp} - \hat{\epsilon}_{pf} (\hat{\epsilon}_{ff}^{LL})^{-1} \hat{\epsilon}_{fp}. \tag{A.9}$$

No es difícil mostrar que la proyección longitudinal-longitudinal de la ecuación (A.9) la podemos escribir simplemente como

$$(\hat{\epsilon}_{LL}^M)^{-1} = (\hat{\epsilon}_{LL})_{pp}^{-1}. \tag{A.10}$$

Tenemos entonces otra manera para deducir la expresión (3.5) que obtuvimos en la sección 3. Este resultado indica que para obtener la proyección longitudinal de la respuesta macroscópica debemos invertir la respuesta longitudinal microscópica, promediarla e invertirla. Debemos notar que la proyección longitudinal $\hat{\epsilon}^{LL}$ es invertible cuando se restringe solamente al subespacio de campos longitudinales, lo cual asumimos implícitamente en las expresiones que utilicen el resultado de la ec. (A.10).

Ahora mostraremos de manera explícita la correspondencia entre la formulación que propusimos en el capítulo 4 con la formulación también exacta expresada en la ec. (A.7), previamente obtenida por Mochán et al. en [24, 25]. Probaremos explícitamente que nuestro resultado de la expresión (4.11)

$$\hat{\mathcal{W}}_M^{-1} = \hat{\mathcal{W}}_{pp}^{-1}, \tag{A.11}$$

implica a la ecuación (A.7). Para ello dividimos al operador $\hat{\mathcal{W}}$ en sus componentes promedio, fluctuante y mixtas promedio-fluctuante mediante la notación matricial

$$\hat{\mathcal{W}} = \begin{pmatrix} \hat{\mathcal{W}}_{pp} & \hat{\mathcal{W}}_{pf} \\ \hat{\mathcal{W}}_{fp} & \hat{\mathcal{W}}_{ff} \end{pmatrix}. \tag{A.12}$$

Dividimos también a su inversa en sus componentes promedio, fluctuante y acoplamiento promedio-fluctuante,

$$\hat{\mathcal{W}}^{-1} = \begin{pmatrix} (\hat{\mathcal{W}}^{-1})_{pp} & (\hat{\mathcal{W}}^{-1})_{pf} \\ (\hat{\mathcal{W}}^{-1})_{fp} & (\hat{\mathcal{W}}^{-1})_{ff} \end{pmatrix}. \quad (\text{A.13})$$

Usamos que $\hat{\mathcal{W}}^{-1}\hat{\mathcal{W}}$ es el operador identidad, para hallar

$$(\hat{\mathcal{W}}^{-1})_{pp} = \left(\hat{\mathcal{W}}_{pp} - \hat{\mathcal{W}}_{pf}(\hat{\mathcal{W}}_{ff})^{-1}\hat{\mathcal{W}}_{fp} \right)^{-1}, \quad (\text{A.14})$$

donde debemos cuidar el orden en que realizamos las proyecciones y las inversiones. Utilizamos el resultado expresado en la ec. (A.11) para obtener

$$\hat{\mathcal{W}}_M = \hat{\mathcal{W}}_{pp} - \hat{\mathcal{W}}_{pf}(\hat{\mathcal{W}}_{ff})^{-1}\hat{\mathcal{W}}_{fp}. \quad (\text{A.15})$$

Basta con identificar cada uno de los términos:

$$\hat{\mathcal{W}}_{pp} = \hat{\epsilon}_{pp} + \frac{1}{q^2} \nabla^2 \hat{\mathcal{P}}_T \hat{\mathcal{P}}_p, \quad (\text{A.16})$$

$$\hat{\mathcal{W}}_{pf} = \hat{\epsilon}_{pf}, \quad (\text{A.17})$$

y

$$\hat{\mathcal{W}}_{fp} = \hat{\epsilon}_{fp}, \quad (\text{A.18})$$

ya que el operador Laplaciano no acopla campos fluctuantes con campos promedio.

El operador de onda macroscópico está relacionado con la respuesta macroscópica mediante la ec. (4.10) como

$$\hat{\mathcal{W}}_M = \hat{\epsilon}_M + \frac{1}{q^2} \nabla^2 \hat{\mathcal{P}}_T \hat{\mathcal{P}}_p, \quad (\text{A.19})$$

Sustituimos esta relación en la ec. (A.15) y también consideramos las ecs. (A.16), (A.17) y (A.18) para obtener finalmente

$$\hat{\epsilon}_M = \hat{\epsilon}_{pp} - \hat{\epsilon}_{pf} \left[\left(\hat{\epsilon} - \frac{1}{q^2} \nabla \times \nabla \times \right)_{ff} \right]^{-1} \hat{\epsilon}_{fp}, \quad (\text{A.20})$$

expresión ya obtenida en la ec. (A.7). Concluimos que ambas formulaciones para obtener la respuesta macroscópica son equivalentes. La expresión (A.20) da una expresión cerrada para la respuesta macroscópica del sistema, pero su implementación directa, sin aproximaciones, es engorrosa numéricamente por la necesidad de invertir el operador entre paréntesis cuadrados, el cual corresponde a una matriz cuyo número de entradas es del orden del número total de vectores de onda que empleemos para representar los campos microscópicos. Por otro lado, la expresión que derivamos de nuestro formalismo (A.11) da de manera implícita al tensor dieléctrico macroscópico. Haciendo la inversión del operador de onda microscópico de manera eficiente, aceleramos significativamente los cálculos numéricos de la respuesta dieléctrica.

Apéndice B

Respuesta macroscópica: generalización para metales

En la sección 4.2 del capítulo 4 hicimos una propuesta para obtener la respuesta macroscópica. En particular, en la sec. 4.2 hicimos la suposición de que la respuesta dieléctrica $\epsilon_A(\omega)$ de la matriz del sistema estructurado fuera una función real. Pedimos ese requisito para utilizar al operador \hat{g} como una métrica. En este apéndice mostramos cómo generalizar el procedimiento para incluir el caso general, en el cual las respuestas dieléctricas de las componentes son disipativas.

Consideramos un cristal artificial binario formado de inclusiones de cierto material colocado de manera periódica dentro de una matriz. Denotaremos con la letra B la región del espacio ocupada por las inclusiones y con A la ocupada por la matriz. Utilizamos dos funciones indicadoras para cada una de las regiones, análogas a la definición (3.17) para escribir la respuesta microscópica del sistema como

$$\begin{aligned}\epsilon(\mathbf{r}) &= \epsilon_A A(\mathbf{r}) + \epsilon_B B(\mathbf{r}) \\ &= \epsilon_0 \left(1 - \frac{A(\mathbf{r})}{u_A} - \frac{B(\mathbf{r})}{u_B} \right),\end{aligned}\tag{B.1}$$

donde ϵ_0 es una constante dieléctrica de referencia *arbitraria, pero real*. Respecto a esta definimos las variable espectrales como $u_\alpha = 1/(1 - \epsilon_\alpha/\epsilon_0)$, $\alpha = A, B$, las cuales en general son funciones complejas de la frecuencia.

En el operador de onda, dado en la ec. 4.5

$$\hat{\mathcal{W}} = \hat{\epsilon} + \frac{1}{q^2} \nabla^2 \hat{\mathcal{P}}_T,\tag{B.2}$$

sustituimos la respuesta microscópica (B.1) para obtener

$$\hat{\mathcal{W}} = \epsilon_0 \left(1 - \frac{A(\mathbf{r})}{u_A} - \frac{B(\mathbf{r})}{u_B} \right) + \frac{1}{q^2} \nabla^2 \hat{\mathcal{P}}_T, \quad (\text{B.3})$$

$$= \epsilon_0 \left(1 - \left(\frac{A(\mathbf{r})}{u_A} + \frac{B(\mathbf{r})}{u_B} \right) \hat{g} \right) \hat{g}^{-1}, \quad (\text{B.4})$$

donde hemos definido el operador \hat{g} como

$$\hat{g} \equiv \left(1 + \frac{1}{q^2 \epsilon_0} \nabla^2 \hat{\mathcal{P}}_T \right)^{-1}, \quad (\text{B.5})$$

Con estas definiciones, escribimos el inverso del operador macroscópico, usando el resultado de la ec. (4.11), como

$$\hat{\mathcal{W}}_M^{-1} = \frac{\hat{g}_{pp}}{\epsilon_0} \left(1 - \left(\frac{\hat{A}}{u_A} - \frac{\hat{B}}{u_B} \right) \hat{g} \right)_{pp}^{-1}, \quad (\text{B.6})$$

donde pudimos hacer la separación del operador \hat{g}_{pp} ya que éste no acopla campos promedios con campos fluctuantes y hemos utilizado la notación \hat{A} , \hat{B} para hacer énfasis en que los operadores son independientes de alguna representación.

En el esquema recursivo que presentamos en la sección 4.3, comenzamos con un estado inicial $|0\rangle$ y obtenemos los siguientes estados mediante la relación de recursión (4.32)

$$|\widetilde{n+1}\rangle \equiv \hat{B}\hat{g}|n\rangle = |b_{n+1}|n+1\rangle + a_n|n\rangle + g_{n-1}g_n b_n |n-1\rangle. \quad (\text{B.7})$$

Encontramos los coeficientes a_n , b_n y g_n mediante la condición de normalización (4.28) que discutimos en la sec. 4.3.1. En la nueva base $\{|n\rangle\}$, mostramos que el operador $\hat{B}\hat{g}$ se puede representar mediante una matriz tridiagonal con los coeficientes a_n a lo largo de la diagonal principal, b_n a lo largo de la subdiagonal y $g_{n-1}g_n b_n$ a lo largo de la supradiagonal, ver ec. (4.34).

Ya que los operadores A y B son complementarios, es decir $\hat{A} + \hat{B} = \hat{1}$, en la misma base $\{|n\rangle\}$, la representación de $\hat{A}\hat{g}$ es también una matriz tridiagonal con elementos $g_n - a_n$ en la diagonal, $-b_n$ a lo largo de la subdiagonal y $-g_{n-1}g_n b_n$ a lo largo de la supradiagonal. Por lo tanto, el operado $\hat{\mathcal{W}}\hat{g}$ puede representarse mediante

$$\hat{\mathcal{W}}\hat{g}/\epsilon_0 \rightarrow \begin{pmatrix} 1 - \frac{g_0}{u_A} - \frac{a_0}{u} & -\frac{g_0 g_1 b_1}{u} & 0 & 0 & \cdots \\ -\frac{b_1}{u} & 1 - \frac{g_1}{u_A} - \frac{a_1}{u} & -\frac{g_1 g_2 b_2}{u} & 0 & \cdots \\ 0 & -\frac{b_2}{u} & 1 - \frac{g_2}{u_A} - \frac{a_2}{u} & -\frac{g_2 g_3 b_3}{u} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}, \quad (\text{B.8})$$

donde introducimos la *variable espectral relativa* definida como $u = \epsilon_0/\epsilon_{AB}$.

El procedimiento para invertir al operador $\hat{\mathcal{W}}$ y promediarlo es análogo al que se sigue después de la ec. (4.34). La fracción continuada modificada (4.46) es

$$\hat{\mathcal{W}}_M^{-1} \rightarrow \frac{u}{\epsilon_0 u - a_0 - \frac{u}{u_A} g_0 - \frac{g_0 b_0^2}{u - a_1 - \frac{u}{u_A} g_1 - \frac{g_0 g_1 b_1^2}{u - a_2 - \frac{u}{u_A} g_2 - \frac{g_1 g_2 b_2^2}{u - a_3 - \frac{u}{u_A} g_3 - \dots}}}. \quad (\text{B.9})$$

Esta fracción continuada es una generalización de la fracción continuada (4.46). Podemos comprobarlo fácilmente haciendo la sustitución $\epsilon_0 = \epsilon_A$, por lo tanto $u_A \rightarrow \infty$ y u es la misma variable espectral usada para la fracción continuada (4.46)

$$\mathcal{W}_M^{-1} \rightarrow \frac{u}{\epsilon_0 u - a_0 - \frac{g_0 b_0^2}{u - a_1 - \frac{g_1 g_2 b_2^2}{u - a_2 - \frac{g_2 g_3 b_3^2}{\dots}}}}}. \quad (\text{B.10})$$

En este apéndice hemos generalizado los resultados para obtener la respuesta macroscópica aun para el caso en que todas las componentes del medio estructurado tengan respuestas dieléctricas complejas con dispersión y disipación.

Bibliografía

- [1] H. A. Bethe. Theory of diffraction by small holes. *Phys. Rev.*, 66(7-8):163–182, Oct 1944.
- [2] Ebbesen T. W., Lezec H. J., Thio T. Ghaemi H. F., and Wolff P. A. Extraordinary optical transmission through sub-wavelength hole arrays. *Nature*, 391(667), 1998.
- [3] W. Luis Mochan. Plasmons. *Encyclopaedia of Condensed Matter Physics*, 310, 2005.
- [4] Martín-Moreno, L., García-Vidal, F. J., Lezec, H. J., Pellerin, K. M., T. Thio, Pendry, J. B., and T. W. Ebbesen. Theory of extraordinary optical transmission through subwavelength hole arrays. *Phys. Rev. Lett.*, 86(6):1114–1117, Feb 2001.
- [5] Haitao Liu and Philippe Lalanne. Microscopic theory of the extraordinary optical transmission. *Nature*, 452(7188):728–731, 2008.
- [6] Reuven Gordon, David Sinton, Karen L Kavanagh, and Alexandre G Brolo. A new generation of sensors based on extraordinary optical transmission. *Accounts of chemical research*, 41(8):1049–1057, 2008.
- [7] Tae Jin Kim, Tineke Thio, Thomas W Ebbesen, DE Grupp, and Henri J Lezec. Control of optical transmission through metals perforated with subwavelength hole arrays. *Optics Letters*, 24(4):256–258, 1999.
- [8] J. B. Pendry, L. Martin-Moreno, and F. J. Garcia-Vidal. Mimicking Surface Plasmons with Structured Surfaces. *Science*, 305(5685):847–848, 2004.
- [9] F. J. García de Abajo and J. J. Sáenz. Electromagnetic surface modes in structured perfect-conductor surfaces. *Phys. Rev. Lett.*, 95:233901, Nov 2005.
- [10] M. Beruete, M. Navarro-Cía, F. Falcone, I. Campillo, and M. Sorolla. Single negative birefringence in stacked spoof plasmon metasurfaces by prism experiment. *Opt. Lett.*, 35(5):643–645, 2010.

- [11] Julia Braun, Bruno Gompf, Georg Kobiela, and Martin Dressel. How holes can obscure the view: Suppressed transmission through an ultrathin metal film by a subwavelength hole array. *Phys. Rev. Lett.*, 103(20):203901, Nov 2009.
- [12] Mingkai Liu, Yanjun Song, Yanbing Zhang, Xuehua Wang, and Chongjun Jin. Mode evolution and transmission suppression in a perforated ultrathin metallic film with a triangular array of holes. *Plasmonics*, 7(3):397–410, 2012.
- [13] A Yu Nikitin, F Guinea, Francisco J Garcia-Vidal, and Luis Martin-Moreno. Surface plasmon enhanced absorption and suppressed transmission in periodic arrays of graphene ribbons. *Physical Review B*, 85(8):081405, 2012.
- [14] Wen-Di Li, Jonathan Hu, and Stephen Y. Chou. Extraordinary light transmission through opaque thin metal film with subwavelength holes blocked by metal disks. *Opt. Express*, 19(21):21098–21108, Oct 2011.
- [15] Edward M Purcell and Carlton R Pennypacker. Scattering and absorption of light by nonspherical dielectric grains. *The Astrophysical Journal*, 186:705–714, 1973.
- [16] Rongzhou Wang, Xue-Hua Wang, Ben-Yuan Gu, and Guo-Zhen Yang. Effects of shapes and orientations of scatterers and lattice symmetries on the photonic band gap in two-dimensional photonic crystals. *Journal of Applied Physics*, 90(9):4307–4313, 2001.
- [17] John David Jackson. *Classical Electrodynamics*. Wiley, 1998.
- [18] L.D. Landau and E.M. Lifshits. *Electrodynamics of continuous media*. Course of theoretical physics. Pergamon Press Ltd., 1984.
- [19] B.E.A. Saleh and M.C. Teich. *Fundamentals of Photonics*. Wiley Series in Pure and Applied Optics. John Wiley & Sons, 2007.
- [20] J.B. Pendry, A. J. Holden, D. J. Robbins, and W. J. Stewart. Magnetism from conductors and enhanced nonlinear phenomena. *Microwave Theory and Techniques, IEEE Transactions on*, 47(11):2075–2084, 1999.
- [21] M. Notomi. Theory of light propagation in strongly modulated photonic crystals: Refractionlike behavior in the vicinity of the photonic band gap. *Phys. Rev. B*, 62:10696–10705, Oct 2000.
- [22] Rubén G. Barrera, Alejandro Reyes-Coronado, and Augusto García-Valenzuela. Nonlocal nature of the electrodynamic response of colloidal systems. *Phys. Rev. B*, 75:184202, May 2007.

- [23] Pochi Yeh, Amnon Yariv, and Chi-Shain Hong. Electromagnetic propagation in periodic stratified media. i. general theory. *J. Opt. Soc. Am.*, 67(4):423–438, Apr 1977.
- [24] W. Luis Mochán and Rubén G. Barrera. Electromagnetic response of systems with spatial fluctuations. I. General formalism. *Phys. Rev. B*, 32(8):4984–4988, Oct 1985.
- [25] W. Luis Mochán and Rubén G. Barrera. Electromagnetic response of systems with spatial fluctuations. II. Applications. *Phys. Rev. B*, 32(8):4989–5001, Oct 1985.
- [26] Hideo Kosaka, Takayuki Kawashima, Akihisa Tomita, Masaya Notomi, Toshia-ki Tamamura, Takashi Sato, and Shojiro Kawakami. Superprism phenomena in photonic crystals. *Phys. Rev. B*, 58:R10096–R10099, Oct 1998.
- [27] D. Stroud and F. P. Pan. Self-consistent approach to electromagnetic wave propagation in composite media: Application to model granular metals. *Phys. Rev. B*, 17:1602–1610, Feb 1978.
- [28] G.P. Ortiz and W.L. Mochán. Scaling of light scattered from fractal aggregates at resonance. *Phys. Rev. B.*, 67(184204), 2003.
- [29] G.P. Ortiz and W.L. Mochán. Scaling condition for multiple scattering in fractal aggregates. *Physica B*, 338:54, 2003.
- [30] G.P. Ortiz, C.López-Bastidas, J.A.Maytorena, and W.L.Mochán. Bulk response of composite from finite samples. *Physica B*, 338:103, 2003.
- [31] M. Hilke. Seeing anderson localization. *Phys. Rev. A*, 80:063820, Dec 2009.
- [32] Sahar A. El-Naggar. Dependency of the photonic band gaps in two-dimensional metallic photonic crystals on the shapes and orientations of rods. *Optical Engineering*, 51(6):068001–1–068001–8, 2012.
- [33] Linfang Shen, Sailing He, and Sanshui Xiao. Large absolute band gaps in two-dimensional photonic crystals formed by large dielectric pixels. *Physical Review B*, 66(16):165315, 2002.
- [34] Cheryl M Anderson and Konstantinos P Giapis. Larger two-dimensional photonic band gaps. *Physical review letters*, 77(14):2949–2952, 1996.
- [35] Xiangdong Zhang and Zhao-Qing Zhang. Creating a gap without symmetry breaking in two-dimensional photonic crystals. *Physical Review B*, 61(15):9847, 2000.
- [36] D Cassagne, C Jouanin, and D Bertho. Hexagonal photonic-band-gap structures. *Physical Review B*, 53(11):7134, 1996.

- [37] Xue-Hua Wang, Ben-Yuan Gu, Zhi-Yuan Li, and Guo-Zhen Yang. Large absolute photonic band gaps created by rotating noncircular rods in two-dimensional lattices. *Physical Review B*, 60(16):11417, 1999.
- [38] Zhi-Yuan Li, Ben-Yuan Gu, and Guo-Zhen Yang. Large absolute band gap in 2d anisotropic photonic crystals. *Physical review letters*, 81(12):2574–2577, 1998.
- [39] M. Ouaddari, S. Delprat, F. Vidal, M. Chaker, and Ke Wu. Microwave characterization of ferroelectric thin-film materials. *Microwave Theory and Techniques, IEEE Transactions on*, 53(4):1390–1397, 2005.
- [40] K. Vynck, D. Felbacq, E. Centeno, A. I. Căbuz, D. Cassagne, and B. Guizal. All-dielectric rod-type metamaterials at optical frequencies. *Phys. Rev. Lett.*, 102:133901, Mar 2009.
- [41] Tal Schwartz, Guy Bartal, Shmuel Fishman, and Mordechai Segev. Transport and anderson localization in disordered two-dimensional photonic lattices. *Nature*, 446(7131):52–55, 2007.
- [42] Henri J. Lezec, Jennifer A. Dionne, and Harry A. Atwater. Negative refraction at visible frequencies. *Science*, 316(5823):430–432, 2007.
- [43] Jiabi Chen, Yan Wang, Baohua Jia, Tao Geng, Xiangping Li, Lie Feng, Wei Qian, Bingming Liang, Xuanxiong Zhang, Min Gu, and Songlin and Zhuang. Observation of the inverse doppler effect in negative-index materials at optical frequencies. *P Nat Photon*, 5(4):239–245, 2011.
- [44] Baile Zhang, Yuan Luo, Xiaogang Liu, and George Barbastathis. Macroscopic invisibility cloak for visible light. *Phys. Rev. Lett.*, 106:033901, Jan 2011.
- [45] Yaroslav A. Urzhumov and Gennady Shvets. Optical magnetism and negative refraction in plasmonic metamaterials. *Solid State Communications*, 146(5 6):208 – 220, 2008. Special section on Negative Refraction and Metamaterials for Optical Science and Engineering.
- [46] Costas M Soukoulis and Martin Wegener. Past achievements and future challenges in the development of three-dimensional photonic metamaterials. *Nature Photonics*, 5(9):523–530, 2011.
- [47] Richard A Shelby, David R Smith, and Seldon Schultz. Experimental verification of a negative index of refraction. *science*, 292(5514):77–79, 2001.
- [48] Victor Georgievich Veselago. The electrodynamics of substances with simultaneously negative values of ϵ and μ . *Physics-Uspekhi*, 10(4):509–514, 1968.

- [49] Kane Yee. Numerical solution of initial boundary value problems involving maxwell's equations in isotropic media. *Antennas and Propagation, IEEE Transactions on*, 14(3):302–307, may 1966.
- [50] Wenbo Sun, Huiying Pan, and Gorden Videen. General finite-difference time-domain solution of an arbitrary electromagnetic source interaction with an arbitrary dielectric surface. *Applied optics*, 48(31):6015–6025, 2009.
- [51] Howard DeVoe. Optical properties of molecular aggregates. i. classical model of electronic absorption and refraction. *The Journal of Chemical Physics*, 41(2):393–400, 1964.
- [52] G. W. Milton, R. C. McPhedran, and D. R. McKenzie. Transport properties of arrays of intersecting cylinders. *Applied Physics A: Materials Science and Processing*, 25(1):23–30, 1981.
- [53] David J. Bergman and Keh-Jim Dunn. Bulk effective dielectric constant of a composite with a periodic microgeometry. *Phys. Rev. B*, 45(23):13262–13271, Jun 1992.
- [54] Ruibao Tao, Zhe Chen, and Ping Sheng. First-principles fourier approach for the calculation of the effective dielectric constant of periodic composites. *Phys. Rev. B*, 41(4):2417–2420, Feb 1990.
- [55] S. Datta, C. T. Chan, K. M. Ho, and C. M. Soukoulis. Effective dielectric constant of periodic composite structures. *Phys. Rev. B*, 48(20):14936–14943, Nov 1993.
- [56] A. Alexopoulos. Effective-medium theory of surfaces and metasurfaces containing two-dimensional binary inclusions. *Phys. Rev. E*, 81(4):046607, Apr 2010.
- [57] William T. Doyle. Optical properties of a suspension of metal spheres. *Phys. Rev. B*, 39(14):9852–9858, May 1989.
- [58] Alon Ludwig and Kevin J. Webb. Accuracy of effective medium parameter extraction procedures for optical metamaterials. *Phys. Rev. B*, 81(11):113103, Mar 2010.
- [59] João T. Costa, Mário G. Silveirinha, and Stanislav I. Maslovski. Finite-difference frequency-domain method for the extraction of effective parameters of metamaterials. *Phys. Rev. B*, 80:235124, Dec 2009.
- [60] Guillermo P. Ortiz, Brenda E. Martínez-Zérega, Bernardo S. Mendoza, and W. Luis Mochán. Effective optical response of metamaterials. *Phys. Rev. B*, 79(24):245132, Jun 2009.

- [61] Mário G. Silveirinha. Nonlocal homogenization model for a periodic array of ϵ -negative rods. *Phys. Rev. E*, 73:046612, Apr 2006.
- [62] W. Luis Mochan, Guillermo P. Ortiz, and Bernardo S. Mendoza. Efficient homogenization procedure for the calculation of optical properties of 3d nanostructured composites. *Opt. Express*, 18(21):22119–22127, Oct 2010.
- [63] V. Myroshnychenko and C. Brosseau. Analysis of the effective permittivity in percolative composites using finite element calculations. *Physica B: Condensed Matter*, 405(14):3046 – 3049, 2010. Proceedings of the Eighth International Conference on Electrical Transport and Optical Properties of Inhomogeneous Media; ETOPIIM-8.
- [64] S. Guenneau, F. Zolla, and A. Nicolet. Homogenization of 3d finite photonic crystals with heterogeneous permittivity and permeability. *Waves in Random and Complex Media*, 17(4):653–697, 2007.
- [65] A. I. Căbuz, A. Nicolet, F. Zolla, D. Felbacq, and G. Bouchitté. Homogenization of nonlocal wire metamaterial via a renormalization approach. *J. Opt. Soc. Am. B*, 28(5):1275–1282, May 2011.
- [66] Shreyas B. Raghunathan and Neil V. Budko. Effective permittivity of finite inhomogeneous objects. *Phys. Rev. B*, 81:054206, Feb 2010.
- [67] P. Halevi, A. A. Krokhin, and J. Arriaga. Photonic crystal optics and homogenization of 2d periodic composites. *Phys. Rev. Lett.*, 82:719–722, Jan 1999.
- [68] P. Halevi and F. Pérez-Rodríguez. From photonic crystals (via homogenization) to metamaterials. In *Society of Photo-Optical Instrumentation Engineers (SPIE) Conference Series*, volume 6320 of *Society of Photo-Optical Instrumentation Engineers (SPIE) Conference Series*, August 2006.
- [69] C R Simovski. On electromagnetic characterization and homogenization of nanostructured metamaterials. *Journal of Optics*, 13(1):013001, 2011.
- [70] Christoph Menzel, Thomas Paul, Carsten Rockstuhl, Thomas Pertsch, Sergei Tretyakov, and Falk Lederer. Validity of effective material parameters for optical fishnet metamaterials. *Phys. Rev. B*, 81(3):035320, Jan 2010.
- [71] Peter Halevi. *Spatial dispersion in solids and plasmas*. North-Holland Amsterdam, 1992.
- [72] Oleg D Jefimenko. *Electricity and Magnetism: An Introduction to the Theory of Electric and Magnetic Fields*. Electret Scientific Company, 1989.

- [73] Kazuaki. Sakoda. *Optical Properties of Photonic Crystals*. Springer Series in Optical Sciences. Springer, 2004.
- [74] Adrian P. Sutton. *Electronic Structure of Materials*. Oxford, 2004.
- [75] Supriyo. Datta. *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*. Cambridge Studies in Semiconductor Physics and Microelectronic Engineering. Cambridge University Press, 1997.
- [76] Claude Cohen-Tannoudji, Bernard Diu, and Frank Laloë. *Quantum Mechanics, 1 Volume Set*. NewYork: John Wiley & Sons, Inc, 2006.
- [77] R Haydock, V Heine, and M J Kelly. Electronic structure based on the local atomic environment for tight-binding bands. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, 5(20):2845, 1972.
- [78] R Haydock, V Heine, and M J Kelly. Electronic structure based on the local atomic environment for tight-binding bands. ii. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, 8(16):2591, 1975.
- [79] J.W. Goodman. *Introduction to Fourier Optics*. McGraw-Hill physical and quantum electronics series. Roberts & Company, 2005.
- [80] Guillermo P. Ortiz, Brenda E. Martínez-Zérega, Bernardo S. Mendoza, and W. Luis Mochán. Respuesta macroscópica de materiales nanoestructurados. In *XVI Escuela de Verano en Física*, pages 98–106. UNAM, 2008.
- [81] Ernesto Cortes, Luis Mochán, Bernardo S. Mendoza, and Guillermo P. Ortiz. Optical properties of nanostructured metamaterials. *physica status solidi (b)*, 247(8):2102–2107, 2010.
- [82] Nouredine Zettili. *Quantum mechanics: concepts and applications*. Wiley. com, 2009.
- [83] Murray R Spiegel. *Fourier analysis with applications to boundary value problems (Shaum's outline series)*. McGraw-Hill Companies, 1974.
- [84] Max Born and Emil Wolf. *Principles of optics: electromagnetic theory of propagation, interference and diffraction of light*. Pergamon Press, 1999.
- [85] Simon Cozens and Peter Wainwright. *Beginning Perl*. Wrox Press, 2000.
- [86] K. Glazebrook and F. Economou. Pdl: The perl data language. *Dr. Dobb's Journal*, 1997.

- [87] Pochi Yeh. Optics of anisotropic layered media: a new 4×4 matrix algebra. *Surface Science*, 96(1):41–53, 1980.
- [88] W. M. Robertson and G. Arjavalingam. Measurement of photonic band structure in a two-dimensional periodic dielectric array. *Phys. Rev. Lett.*, 68(13):2023, 1992.
- [89] J S Pérez-Huerta, Guillermo P Ortiz, Bernardo S Mendoza, and W Luis Mochán. Macroscopic optical response and photonic bands. *New Journal of Physics*, 15(4):043037, 2013.
- [90] J A Reyes-Avenidaño, U Algreto-Badillo, P Halevi, and F Pérez-Rodríguez. From photonic crystals to metamaterials: the bianisotropic response. *New Journal of Physics*, 13(7):073041, 2011.
- [91] Mário G. Silveirinha. Metamaterial homogenization approach with application to the characterization of microstructured composites with negative parameters. *Phys. Rev. B*, 75:115104, Mar 2007.
- [92] V. M. Agranovich, Y. R. Shen, R. H. Baughman, and A. A. Zakhidov. Linear and nonlinear wave propagation in negative refraction metamaterials. *Phys. Rev. B*, 69:165112, Apr 2004.
- [93] V.M. Agranovič and V.L. Ginzburg. *Spatial Dispersion in Crystal Optics and the Theory of Excitons*. Number v. 18 in Interscience monographs and texts in physics and astronomy, v. 18. Interscience Publishers, 1966.
- [94] Von DAG Bruggeman. Berechnung verschiedener physikalischer konstanten von heterogenen substanzen. i. dielektrizitätskonstanten und leitfähigkeiten der mischkörper aus isotropen substanzen. *Annalen der Physik*, 416(7):636–664, 1935.
- [95] J.D. Joannopoulos, R.D. Meade, and J.N. Winn. *Photonic Crystals: Molding the Flow of Light*. University Press, 1995.
- [96] Yousef Saad. *Numerical methods for large eigenvalues problems*. SIAM, 2011.
- [97] Steven G. Johnson and J. D. Joannopoulos. Block-iterative frequency-domain methods for maxwell's equations in a planewave basis. *Opt. Express*, 8(3):173–190, 2001.
- [98] K. Busch, G. von Freymann, S. Linden, S.F. Mingaleev, L. Tkeshelashvili, and M. Wegener. Periodic nanostructures for photonics. *Physics Reports*, 444(3–6):101 – 202, 2007.
- [99] Justin Elser, Viktor A. Podolskiy, Ildar Salakhutdinov, and Ivan Avrutsky. Non-local effects in effective-medium response of nanolayered metamaterials. *Applied Physics Letters*, 90(19):191109, 2007.

- [100] Liang Peng, Lixin Ran, Hongsheng Chen, Haifei Zhang, Jin Au Kong, and Tomasz M. Grzegorzczuk. Experimental observation of left-handed behavior in an array of standard dielectric resonators. *Phys. Rev. Lett.*, 98:157403, Apr 2007.
- [101] Edward D Palik. *Handbook of Optical Constants of Solids: Index*, volume 3. Academic press, 1998.
- [102] R. Mittra and P.H. Harms. A new finite-difference time-domain (fdtd) algorithm for efficient field computation in resonator narrow-band structures. *Microwave and Guided Wave Letters, IEEE*, 3(9):316–318, 1993.
- [103] J. M. Pitarke, J. E. Inglesfield, and N. Giannakis. Surface-plasmon polaritons in a lattice of metal cylinders. *Phys. Rev. B*, 75(16):165415, Apr 2007.